

Einführung in die Quanten- und Computerchemie (QCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	5.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
QCCC Vorlesung		V	3	90	45	250
QCCC Seminar		Sem	1	30	15	30
QCCC Praktikum		PExp	4	120	60	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. M. Marian				
Beteiligte Dozierende		Dozentinnen und Dozierende der Theoretischen Chemie				
Sprache		Deutsch (Fachwörter Englisch)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
		B. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Quantenchemie wiedergeben, • Energieniveaus und Wellenfunktionen der exakt lösbaren Modellsysteme skizzieren, • die Hückeltheorie sicher anwenden, • Molekülorbitalschemata konstruieren, • chemische Bindungen klassifizieren, • Moleküleigenschaften im elektronischen Grundzustand mit Standardprogrammpaketen berechnen und interpretieren, • Auswahlregeln für IR- und Ramanübergänge anwenden. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Observable und Operatoren: Was ist ein Operator? Eigenfunktionen und Eigenwerte, Eigenschaften quantenmechanischer Operatoren, Spektrum, Korrespondenzprinzip, zeitabhängige und zeitunabhängige Schrödingergleichung, Energiequantelung. • Erwartungswerte und Varianz: Erwartungswerte, Varianz und Standardabweichung, Ehrenfesttheorem, Vertauschbarkeit von Operatoren, Unschärfe, Variationsprinzip für die Energie, Übergangswahrscheinlichkeiten. • Das Hückel-Orbital-Modell: Näherungen im HMO-Modell, Ladungsordnung, Bindungsordnung, freie Valenz. • Separation von Variablen: zweidimensionaler Kasten, Abseparation der Schwerpunktsbewegung, Wasserstoffatom, Wasserstofforbitale. • Mehrelektronenatome: Näherung der unabhängigen Teilchen, Orbitale, Hartree-Näherung, Teilchenvertauschung, Slaterdeterminante, Hartree-Fock-Ansatz. • Moleküle: Molekularer Hamiltonoperator, Born-Oppenheimer-Näherung, Elektronische Schrödingergleichung, LCAO-MO-Modell, gebräuchliche Basisfunktionen. • Potentialhyperflächen: Stationäre Punkte, Koordinatenwahl, Geometrieoptimierung, Molekülschwingungen. • Chemische Bindung: Einelektronenbindung, kovalente Bindung, delokalisierte Bindung, ionische Bindung, polare Bindung, intermolekulare Wechselwirkungen (statische, induzierte), Wasserstoffbrückenbindung, eindimensionaler Festkörper. • Kraftfelder und Molekülmechanik. • Elektronenkorrelation (qualitativ): 						

- a) Definition, Fermi-/Coulomb-Loch;
 - b) Wellenfunktionsmethoden zur Beschreibung der Elektronenkorrelation: Multikonfigurationsansatz (CASSCF), Konfigurationswechselwirkung (CI), Møller-Plesset-Störungstheorie (MP2);
 - c) Dichtefunktionaltheorie: Hohenberg-Kohn-Theorem, Kohn-Sham-Gleichungen, Austauschkorrelationsfunktionale.
- Symmetrie in der Chemie: Klassifikation von Symmetrieeigenschaften, Richtung des Dipolmoments, Chiralität, reduzible und irreduzible Darstellungen, Ausreduzieren, Symmetrieeigenschaften von Schwingungsmoden, Auswahlregeln für Infrarot- und Ramanübergänge.

Seminar:

Seminarvortrag über ein Thema aus Vorlesung oder Praktikum.

Computerpraktikum:

- Literaturrecherche und Chemiedatenbanken im Internet.
- Computergestützte Lösung von Übungen zur Vorlesung am PC unter Windows und Linux: Wellen und Interferenz, Aufenthaltswahrscheinlichkeit, Erwartungswerte, Wasserstoffatom
- Berechnung von Moleküleigenschaften mit Standardquantenchemieprogrammen:
 - a) Elektronische Schrödingergleichung (Teilchen im Kasten, Hückeltheorie, Restricted Hartree-Fock-Verfahren, Kohn-Sham-Verfahren),
 - b) Geometrieoptimierung; Konstitutionsisomere,
 - c) Molekülschwingungen und Kraftkonstanten, Übergangswahrscheinlichkeiten.

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC1 und MMC2.		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anwesenheitsaufgaben, Protokolle, Seminarvortrag		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QCCC-Praktikums und des QCCC-Seminars.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Skript zur Vorlesung. Fachbücher: J. Reinhold, <i>Quantentheorie der Moleküle. Eine Einführung</i> , Springer Spektrum, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden, 2015 . W. Kutzelnigg, <i>Einführung in die Theoretische Chemie</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2002 . N. J. B. Green, <i>Quantum Mechanics 1: Foundations (Oxford chemistry primers)</i> , Oxford University Press, Oxford, 2001 . G.H. Grant, W.G. Richards, <i>Computational Chemistry (Oxford chemistry primers)</i> , Oxford University Press, Oxford, 2004 .			