

Modul Einführung in die Theoretische Chemie

a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls

Fundierte Kenntnisse der Theoretischen Chemie sowie deren relevanten quantentheoretischen Grundlagen werden vermittelt. Operatorformalismus, Kommutatoren, der Begriff der Funktionsbasis, Fourierdarstellung und Matrixtechniken werden eingeführt. Allgemeine Techniken zur Lösung der Schrödinger Gleichung, wie Variationsverfahren und Störungstheorie werden behandelt und die Verbindung zur klassischen Physik mittels des Ehrenfestformalismus bzw. Virialtheorems hergestellt. Das Prinzip der Ununterscheidbarkeit von Quantenteilchen und die sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Wellenfunktion werden eingeführt. Die Konzepte werden auf Modellsysteme angewandt.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des TC Moduls einen fundierten Überblick über die molekulare Quantentheorie erworben haben und deren mathematischen Prinzipien auf die theoretische Beschreibung einfacher Quantensystemen anwenden können.

Das Modul besteht aus einer Vorlesung und Übungstutorien, in denen die in der Vorlesung erworbenen Kenntnisse anhand von Übungsaufgaben wiederholend diskutiert und zunehmend selbständig angewendet werden.

b) Lehrformen: Vorlesung (2 SWS), Übungen (2 SWS). Wahlweise TC-Seminar (2 SWS, WiSe)

c) Voraussetzung für die Teilnahme: Mathematik I + II, Physik I+II, Physikalische Chemie I

d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Bachelor+Master), wobei Kompetenzen im Bereich der Theoretischen Chemie kumulativ erworben werden müssen. Einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter naturwissenschaftlicher Studiengänge.

e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten:

Die erfolgreiche Teilnahme an den Übungstutorien und das Bestehen der Klausur zur Vorlesung TC I, ggf. erfolgreiche Teilnahme am Seminar.

f) Leistungspunkte und Noten:

Im Bachelor: 6 LP (jeweils 3 für die VL / Ü). Wahlweise zusätzlich 3 LP für die Teilnahme am Seminar und eigenem Vortrag. Maximal 9 LP. Die Modulnote entspricht bei einem Modulumfang von 6 LP der Klausurnote, bei einem Modulumfang von 9 LP wird die Modulnote aus der Klausurnote (2/3) und der Benotung des Vortrags (1/3) gebildet. Das TC-Seminar ist lediglich einmal mit dem Modul TC bzw. mit dem Modul CC kombinierbar.

Im Master: 3 LP (als Spezialvorlesung), die Teilnahme an den Übungen wird aber empfohlen. Die Note des Moduls entspricht der Klausurnote.

g) Häufigkeit des Angebots: Im SoSe

h) Arbeitsaufwand: Der Arbeitsaufwand beträgt 180 bzw. 270 Stunden für Bachelor, 90 Stunden für Master (nur VL), Teilnahme an den Übungen wird aber empfohlen.

i) Dauer: ein Semester, Vorlesungszeit

Modul Computergestützte Chemie

a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls

Kenntnisse über die relevanten Ansätze und Methoden zur Berechnung von Atomen, Molekülen und Clustern werden vermittelt. Folgende Themenschwerpunkte werden gesetzt: Born-Oppenheimer-Näherung, Mean-Field Näherung, Møller-Plesset Störungstheorie und Grundlagen der Coupled-Cluster Methoden. Folgend wird die Kern-Schrödingergleichung als Basis der Quantenmoleküldynamik eingeführt sowie die Ankopplung des elektromagnetischen Feldes. Das Modul CC bildet die Grundlage für die praktische Anwendung und Interpretierung von Elektronstrukturrechnungen sowie für das Verständnis von chemischen Strukturen und reaktiven Prozessen und für die Berechnung von einfachen spektroskopischen Observablen.

Das Modul besteht aus einer Vorlesung und Übungstutorien, in denen die in der Vorlesung erworbenen Kenntnisse anhand von Übungsaufgaben wiederholend diskutiert und zunehmend selbstständig angewendet werden.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des CC Moduls den Aufbau molekularer Systeme anhand der Born-Oppenheimer Näherung und des Molekülorbitalbilds beschreiben können. Sie sollen die unterschiedlichen Näherungsmethoden der Quantenchemie vergleichen können und ansatzweise an einfachen Problemen selbstständig anwenden können. Die Studierenden sind in der Lage, aktuelle Themen aus der Forschung im Rahmen von Praktika bzw. Bachelor- und Masterarbeiten erfolgreich zu bearbeiten.

b) Lehrformen: Vorlesung (2 SWS), Übungen (2 SWS), Wahlweise TC-Seminar (2 SWS).

c) Voraussetzung für Teilnahme: Mathematik I+II, Physik I+II, Physikalische Chemie I

d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Bachelor+Master), wobei Kompetenzen im Bereich der Theoretischen Chemie kumulativ erworben werden müssen. Einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter naturwissenschaftlicher Studiengänge.

e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten:

Bachelor: erfolgreiche Teilnahme an den Übungstutorien, Bestehen der Klausur zur Vorlesung CC, ggf. erfolgreiche Teilnahme am Seminar.

Master: Bestehen der Klausur zur Vorlesung CC

f) Leistungspunkte und Noten:

Im Bachelor: 6 LP (jeweils 3 für die VL / Ü). Wahlweise zusätzlich 3 LP für die Teilnahme am Seminar und eigenem Vortrag. Maximal 9 LP. Die Modulnote entspricht bei einem Modulumfang von 6 LP der Klausurnote, bei einem Modulumfang von 9 LP wird die Modulnote aus der Klausurnote (2/3) und der Benotung des Vortrags (1/3) gebildet.

Im Master: 3 LP (als Spezial- bzw. Zyklusvorlesung), die Teilnahme an den Übungen wird aber empfohlen. Die Note des Moduls entspricht der Klausurnote.

g) Häufigkeit des Angebots: Im WiSe

h) Arbeitsaufwand: Der Arbeitsaufwand beträgt 180 bzw. 270 Stunden für Bachelor (VL / Ü) bzw. 90 Stunden für Master (VL). Für das Seminar und die Vortragsvorbereitung: 90 Stunden.

i) Dauer: ein Semester, Vorlesungszeit