
Modulbezeichnung: Theoretische Chemie 3/Computational Molecular Chemistry (CBG-15/MSG-15) 5 ECTS
 (Theoretical Chemistry 3/Computational molecular chemistry)

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling
 Lehrende: Christian Neiß, Andreas Görling

Startsemester: SS 2021	Dauer: 1 Semester	Turnus: jährlich (SS)
Präsenzzeit: 56 Std.	Eigenstudium: 94 Std.	Sprache: Deutsch

Lehrveranstaltungen:

Theoretische Chemie III / Computational Molecular Chemistry (SS 2021, Vorlesung, 2 SWS, Andreas Görling)
 Theoretische Chemie III / Computatonal Molecular Chemistry (Übungen) (SS 2021, Übung, 2 SWS, Andreas Görling et al.)

Inhalt:

- Mehrelektronenwellenfunktionen, Slater-Determinanten
- Einführung in die Hartree-Fock-Methode
- Einführung in die Dichtefunktionaltheorie
- Anwendungsbeispiele quantenchemischer Methoden
- Mathematische Grundlagen der Gruppentheorie
- molekulare Punktgruppen
- Konstruktion symmetrieadaptierter Linearkombinationen von Atomorbitalen
- Molekülorbitale und ihre Symmetrie
- Molekülschwingungen in harmonischer Näherung
- Symmetrierauswahlregeln in der IR-Spektroskopie
- Ligandenfeldtheorie, Jahn-Teller-Effekt

Lernziele und Kompetenzen:

Die Studierenden

- kennen die Grundlagen der wichtigsten quantenchemischen Methoden und deren Anwendung auf Mehrelektronensysteme (Atome und Moleküle)
- verstehen und beherrschen die Prinzipien der Molekülorbitaltheorien und können verschiedene Bindungstypen beschreiben und erklären
- sind mit den Grundlagen der Gruppentheorie und ihrer Anwendung in der Chemie vertraut
- verstehen gruppentheoretische Sachverhalte und deren Anwendung auf verschiedene Spektroskopien
- verstehen die Ligandenfeldtheorie und können sie zur Charakterisierung metallorganischer Verbindungen einsetzen

Literatur:

Ein umfassendes Skript für die Vor- und Nachbereitung des Stoffes der Vorlesung und der Übungen wird im Internet auf StudOn zur Verfügung gestellt.

Studien-/Prüfungsleistungen:

Theoretische Chemie III (Prüfungsnummer: 21211)
 (englische Bezeichnung: Theoretical Chemistry III)
 (diese Prüfung gilt nur im Kontext der Studienfächer/Vertiefungsrichtungen [1], [2])
 Prüfungsleistung, Klausur, Dauer (in Minuten): 90
 Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%
 weitere Erläuterungen:
 W90: Klausur (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung!
 Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2021, 1. Wdh.: SS 2021
 1. Prüfer: Andreas Görling

Klausur zu Computational Molecular Chemistry (Prüfungsnummer: 21261)

(englische Bezeichnung: Examination (Klausur) on Computational Molecular Chemistry)

(diese Prüfung gilt nur im Kontext der Studienfächer/Vertiefungsrichtungen [3], [4])

Prüfungsleistung, Klausur, Dauer (in Minuten): 90

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

W90: Klausur (90 Minuten) der Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2021, 1. Wdh.: SS 2021

1. Prüfer: Andreas Görling
