

Modultitel		Modulcode		
Einführung in die Computerchemie		chem0407		
Modulverantwortliche(r)				
Prof. Dr. Bernd Hartke				
Veranstalter				
Sektion Chemie				
Fakultät				
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät				
Prüfungsamt				
Prüfungsamt Chemie				
Leistungspunkte		4 (5 für BSc. Chemie 2-Fach)		
Bewertung		Benotet		
Dauer		Ein Semester		
Angebotshäufigkeit		Findet nur im Sommersemester statt		
Arbeitsaufwand pro Leistungspunkt		30 Stunden		
Arbeitsaufwand insgesamt		120 Stunden		
Präsenzstudium		42 Stunden		
Selbststudium		78 Stunden		
Lehrsprache		Deutsch		
Empfohlene Voraussetzung				
Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MNF-chem0102, MNF-chem0202 und MNF-chem0304.				
Modulveranstaltung(en)				
Veranstaltungsart	Lehrveranstaltungstitel	Pflicht/Wahl	SWS	
Vorlesung	Einführung in die Computerchemie	Pflicht	2	
Übung	Übungen zur Vorlesung Einführung in die Computerchemie	Pflicht	1	
Prüfung(en)				
Prüfungstitel	Prüfungsform	Bewertung	Pflicht/Wahl	Gewicht

Mischprüfung: Einführung in die Computerchemie	Sonstiges	Benotet	Pflicht	100
Weitere Bemerkungen zu der/den Prüfung(en)				
<p>Prüfungsleistungen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Klausur am Ende der Vorlesungszeit; bestanden bei $\geq 50\%$ (inkl. Bonus). <p>Bonusleistungen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Zwischentests zu den einzelnen Stoffkapiteln während den Übungen, • $0.4 \times (\% \text{Zwischentests}) = \text{Bonusprozentpunkte}$ für die Abschlussklausur. <p>Die Klausur wird insgesamt drei Mal angeboten: Im ersten und im zweiten Prüfungszeitraum des laufenden Semesters und im zweiten Prüfungszeitraum des Folgesemesters.</p> <p>Benotung, Relevanz für Endnote B.Sc. Chemie, Wirtschaftschemie, M.Sc. Biochemie und Molekularbiologie:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die B.Sc. Endnote ein. <p>Benotung, Relevanz für Endnote B.Sc. und M.Ed. Chemie 2-Fach, B.Sc. Biochemie und Molekularbiologie</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modulnote geht nicht in die Endnote ein. 				
Lehrinhalte				
<ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen: klassische Mechanik, Quantenmechanik, Born-Oppenheimer-Separation, Potentialenergieflächen, Genauigkeitsanforderung, Skalenprobleme, • Molekülmechanik/-dynamik: Kraftfelder, Trajektorien, Verlet-Algorithmus, großskalige MD-Simulationen, Diskussion der Resultate, • allgemeine Methoden: Eigenwertproblem, Entwicklung in Basisfunktionen, • SCF-Verfahren: molekularer Hamiltonoperator, Orbitale, Slaterdeterminanten, Hartree-Fock als effektive 1-Teilchen-Theorie, iterativer SCF-Zyklus, Computeranforderungen, Genauigkeit der Resultate, methodische Fehler, Dichtefunktionaltheorie mit Resultaten, • Strukturoptimierung, Frequenzrechnung, Übergangszustandssuche, Reaktionswege, Populationsanalyse, • Elektronenkorrelationsmethoden: full-CI und seine praktische Unmöglichkeit, coupled-cluster (Grundprinzip, Resultate), MP2-Störungstheorie (Grundprinzip, Resultate), • quantenmechanische Kerndynamik: stationäre Eigenzustände in generischen Potentialformen, Zeitabhängigkeit durch Eigenzustandssuperposition, zeitliches Verhalten von Wellenpaketen, Spektrensimulation, direkte Berechnung von $k(T)$, • Übungen: exemplarische Molekülmechanik- und -dynamikrechnungen, Einführung in die wichtigsten Quantenchemiepakete, mit Anwendungen und Vergleich der Resultate mit experimentellen Daten. 				
Lernziele				
<p>Die Studierenden erhalten unter weitest gehender Umgehung mathematischer Details einen exemplarischen aber gleichwohl realistischen Eindruck davon, was mit modernen molekülmechanischen und quantenchemischen Verfahren berechenbar ist, wie hoch der Rechenaufwand dafür ist, welche prinzipiellen Näherungen man dabei macht und wie genau die Resultate sind. Sie sind in der Lage, Eigenschaften kleinerer Moleküle vorherzusagen, sowie Reaktionen und Energiehyperflächen mit einfachen Standardmethoden selbstständig zu berechnen. Sie können die erlernten theoretischen Methoden problemspezifisch anwenden und die Resultate kritisch auswerten.</p>				
Literatur				
<ul style="list-style-type: none"> • Koch/Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley, • F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, • C. J. Cramer, Computational Chemistry – Theories and Models, Wiley, 2004, • E. G. Lewars, Computational Chemistry, Springer, 2011, • J. H. Jensen, Molecular Modeling Basics, CRC Press, 2010, • Vorlesungsskripte der Dozenten. 				
Verwendung		Pflicht/Wahl	Fachsemester	

Bachelor, 1-Fach, Chemie, (Version 2007)	Pflicht	4
Bachelor, 1-Fach, Chemie, (Version 2016)	Pflicht	4
Bachelor, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2007)	Wahl	4 oder 6
Bachelor, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2016)	Wahl	4 oder 6
Master, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2016)	Wahl	1, 2 oder 3
Bachelor, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2008)	Wahl	4 oder 6
Bachelor, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2014)	Wahl	4 oder 6
Bachelor, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2017)	Wahl	4 oder 6
Bachelor, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2007)	Wahl	4 oder 6
Bachelor, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2017)	Wahl	4 oder 6
Master, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2007)	Wahl	1 - 4
Master, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2017)	Wahl	1 - 4