

Modul Theoretische Chemie I (TC I)

a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls

Fundierte Kenntnisse der für die Theoretische Chemie relevanten quantentheoretischen Grundlagen werden vermittelt. Dies umfasst die Hinführung zur Schrödingergleichung (SGL) und deren Anwendung auf freie Teilchen, die als Wellenpakete beschreibbar sind. Danach erfolgt die Einführung eines Potentials in die SGL und die Diskussion der möglichen Lösungen. Der Operatorformalismus, Kommutatoren, der Begriff der Funktionsbasis, die Fourierdarstellung und Matrixtechniken werden eingeführt. Allgemeine Techniken zur Lösung der SGL, wie Variationsverfahren und Störungstheorie werden behandelt und die Verbindung zur klassischen Physik mittels des Ehrenfest- und Virialtheorems hergestellt. Kenntnisse zur Drehimpulsalgebra, zur Kopplung von Drehimpulsen und zum Leiteroperatorformalismus werden vermittelt und am Beispiel der Spin-Bahn-Kopplung vertieft. Das Prinzip der Ununterscheidbarkeit von Quantenteilchen und die sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Wellenfunktion werden eingeführt. Das Zweiteilchenproblem mit Spineigenfunktionen und Slaterdeterminanten wird im Detail besprochen.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des TC I Moduls einen fundierten Überblick über die quantentheoretische Basis erworben haben und deren Prinzipien auf die theoretische Beschreibung einfacher Quantensystemen anwenden können, wodurch sie in die Lage versetzt werden, in fortgeschrittene VL zur Theoretischen Chemie einzusteigen.

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).

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

d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Bachelor+Master). 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.

f) Leistungspunkte und Noten:

6 LP's für Bachelor-Studierende (jeweils 3 LP für VL / Ü)

bzw.

3 LP's für Master-Studierende (3 LP für VL als Spezialvorlesung)

Die Note des Moduls wird aus der Klausurnote gebildet.

g) Häufigkeit des Angebots: Im SoSe: TC I.

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

i) Dauer: ein Semester, Vorlesungszeit

Modul Theoretische Chemie II (TC II)

a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls

Kenntnisse der für die Theoretische Chemie relevanten Ansätze und Methoden zur Berechnung von Atomen, Molekülen und Clustern werden vermittelt. Des Weiteren wird ein Verständnis der chemischen Bindung und zeitabhängiger Phänomene als Grundlage der Spektroskopie erarbeitet. Der letzte Teil besteht aus einem Einblick in moleküldynamische Prozesse und Modellbildungen. Folgende Themenschwerpunkte werden gesetzt: Born-Oppenheimer-Separation und deren Bedeutung für die Spektroskopie, Chemische Bindung im H_2^+ -Molekülion, Symmetrie der Wellenfunktionen und deren Konsequenz, zeitabhängige Störungstheorie und Ankopplung des elektromagnetischen Felds, nähere Betrachtung der Kern-Schrödingergleichung als Basis der Moleküldynamik, Modelle zur Behandlung des Vielteilchenproblems der Quantenchemie.

Die VL setzt eine erfolgreiche Teilnahme an TC I voraus, die die quantentheoretischen Grundlagen vermittelt. Weiterhin bildet die TC II eine solide Grundlage für das Verständnis der für die aktuelle Forschung relevanten Aufbauvorlesungen im Rahmen der Theoretischen sowie Computergestützten Chemie.

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 TC II Moduls den Aufbau molekularer Systeme anhand der Born-Oppenheimer Näherung beschreiben können sowie die für die theoretische molekulare Spektroskopie Näherungsverfahren verstehen und anwenden können. Sie sollen einen fundierten Überblick über die wichtigsten Grundlagen der Theoretischen Chemie erworben haben, der sie in die Lage versetzt, aktuelle Themen aus der Forschung im Rahmen von Praktika bzw. Bachelor- und Masterarbeiten erfolgreich zu bearbeiten.

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

c) Voraussetzung für Teilnahme: TC I

d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Bachelor+Master). 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 TC II, erfolgreiche Teilnahme am Seminar.

Master: Bestehen der Klausur zur Vorlesung TC II

f) Leistungspunkte und Noten:

Im Bachelor: 6 LP (jeweils 3 für die VL / Ü). 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 Spezialvorlesung), die Teilnahme an den Übungen wird aber empfohlen. Die Note des Moduls entspricht der Klausurnote.

g) Häufigkeit des Angebots: Im WiSe: TC II.

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

i) Dauer: ein Semester, Vorlesungszeit