

Grundlagen der Theoretischen Chemie		Pflichtmodul		6 CP				
Inhalte:								
Grundlagen der Quantentheorie: Wellenfunktion, Pauli-Prinzip, Operatoren, zeitunabhängige und zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, Eigenwerte, Erwartungswerte, Superpositionsprinzip; einfache Eigenwertprobleme: Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, starrer Rotator, Wasserstoffatom; Grundlagen der chemischen Bindung: Born-Oppenheimer-Näherung, elektronische Schrödinger-Gleichung, Potentialflächen, Behandlung der Kerndynamik (Trajektorien, Wellenpakete), adiabatische Näherung und nicht-adiabatische Effekte; zweiatomige Moleküle (H_2^+ -Molekül-Ion, H_2 -Molekül): LCAO-MO-Verfahren (Linear Combination of Atomic Orbitals / Molecular Orbitals), Slater-Determinanten, Variationstheorem, Hartree-Fock-Theorie, Elektronenkorrelation (Konfigurationswechselwirkung); Molekülsymmetrie: Symmetriepunktgruppen; mehratomige Moleküle: Hybridisierung; π -Elektronensysteme: Hückel-Verfahren, Aromatizität, Woodward-Hoffmann-Regeln; elektrische Dipolübergänge: zeitabhängige Störungstheorie, Übergangsmomente und -intensitäten								
Qualifikationsziele und Kompetenzen:								
Die Studierenden erlernen anhand einfacher Beispiele die Grundlagen der quantenmechanischen Beschreibung von Atomen und Molekülen. Sie können z. B. die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators und des starren Rotators als einfachste Modelle molekularer Schwingungen und Rotationen lösen. Weiterhin lernen sie, das elektronische Strukturproblem schrittweise zu lösen; so sind sie im Falle des H_2^+ -Molekül-Ions in der Lage, explizit das LCAO-MO-Verfahren durchzuführen und Potentialflächen zu konstruieren. Darauf aufbauend führen sie das Hückel-Verfahren als Näherungsverfahren für π -Elektronensysteme durch. Darüber hinaus gewinnen sie einen Einblick in die zentrale Rolle der Elektronenkorrelation, die Grenzen der Hartree-Fock-Methode und die Vielzahl moderner Verfahren zur Lösung des elektronischen Strukturproblems. Insgesamt erlernen die Studierenden das Konzept der chemischen Bindung auf quantenmechanischer Grundlage.								
Angebotszyklus:	einmal pro Jahr (im Wintersemester)							
Dauer des Moduls:	1 Semester							
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:	Modul Mathematische Verfahren I							
Organisatorisches:	Zur Vertiefung des Vorlesungsstoffs findet eine Übung statt. Darin werden vorgegebene Übungsaufgaben besprochen. Es wird erwartet, dass sich die Studierenden daran aktiv beteiligen.							
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):	keine							
Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:	Klausur							
Voraussetzung für die Vergabe der CP:	bestandene Modulabschlussprüfung							
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:	Pflichtmodul für Studierende des Bachelorstudiengangs Biophysik							
Lehrveranstaltungen	Typ	SWS	Semester / CP					
			1	2	3	4	5	6
Theoretische Chemie I	V + Ü	3 + 1			6			