

[W.11] <i>Molecular Computational Chemistry: Main Group and Transition Metal Systems</i>	<b>Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppen- und Übergangsmetallsysteme</b>	<b>Wahlpflichtmodul</b>	<b>10 CP (insg.) = 300 h</b>		<b>9 SWS</b>
			<b>Kontaktstudium</b> 9 SWS / 135 h	<b>Selbststudium</b> 165 h	

### Inhalte

**Vorlesung** „Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie“: Theoretische Grundlagen (Hartree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie, Korrelationsverfahren, Basissätze, Optimierungsverfahren), Arbeitsweise der Computerprogramme, molekulare Bindungssituationen und Spinzustände.

**Seminar** „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“: Architekturprinzipien und Nutzung moderner Großrechner, Dateisysteme und Netzwerkstrukturen, Linux Shell-Befehle und einfache Shell-Programmierung.

**PR1:** Praktikum und Seminar „Computational Main Group Chemistry“: Strukturen und Eigenschaften molekularer Verbindungen, Interpretation von Molekülorbitalen, Berechnung von Reaktionspfaden einfacher Hauptgruppenverbindungen.

**PR2:** Praktikum und Vorlesung „Computational Transition Metal Chemistry“: Elektronische Struktur von Übergangsmetallionen und -komplexen; Spinzustände und Termsymbole, Konfigurationszustandsfunktionen, Anregungsenergien, Berechnung von dynamischen und statischen Korrelationseffekten, Berechnung von Reaktionspfaden einfacher Übergangsmetallverbindungen.

*Es kann entweder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppensysteme oder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppen- und Übergangsmetallsysteme absolviert werden.*

### Lernergebnisse / Kompetenzziele

In diesem Modul erlernen die Studierenden die Bearbeitung aktueller chemischer Fragestellungen mithilfe quantenchemischer Methoden. Die Vorlesung vermittelt anwendungsorientierte theoretische Grundlagen der Methoden, die in den Praktika zum Einsatz kommen. Die Studierenden werden an die Nutzung von Hochleistungsrechnern herangeführt, wie sie im lokalen und überregionalen Umfeld verfügbar sind, und erlernen das selbständige Arbeiten mit dem Unix-Betriebssystem und mit quantenchemischen Programmpaketen. Anhand einfach gewählter Beispiele aus der Hauptgruppen- und Übergangsmetallchemie wird die Durchführung der Berechnungen, sowie die Auswertung und professionelle Dokumentation der Ergebnisse erlernt. Einsatzmöglichkeiten, aber auch Grenzen der jeweiligen Methoden werden erörtert, was eine kritische Bewertung der Aussagekraft von quantenchemischen Ergebnissen ermöglicht.

### Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls

PR1: Seminar „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“  
PR2: PR1

### Empfohlene Voraussetzungen

Vorlesung „Hauptgruppenchemie“  
PR2: Vorlesung „Koordinationschemie“

### Organisatorisches

Wird als Blockveranstaltung in der vorlesungsfreien Zeit des Wintersemesters angeboten.  
PR2: Modulvertiefung in der vorlesungsfreien Zeit des darauffolgenden Wintersemesters

<b>Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)</b>	B.Sc. Chemie / FB14
<b>Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge</b>	Wahlpflichtmodul: B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12
<b>Häufigkeit des Angebots</b>	Einmal im Jahr (im Wintersemester)
<b>Dauer des Moduls</b>	3 Semester
<b>Modulbeauftragte / Modulbeauftragter</b>	Prof. M. Holthausen / Dr. M. Diefenbach
<b>Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen</b>	
<b>Teilnahmenachweise</b>	Seminare: Regelmäßige und aktive Teilnahme PR1: Protokoll
<b>Leistungsnachweise / Studienleistung</b>	
<b>Lehr- / Lernformen</b>	Vorlesung, Seminare, Praktikum
<b>Unterrichts- / Prüfungssprache</b>	Deutsch
<b>Modulprüfung</b>	<b>Form / Dauer / ggf. Inhalt</b>
<b>Modulabschlussprüfung bestehend aus:</b>	Keine
<b>kumulative Modulprüfung bestehend aus:</b>	- Vorlesung, Seminar, PR1: Mündliche Prüfung (30 Min.) - PR2: Protokoll
<b>Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:</b>	Note als CP-gewichtetes Mittel der Modulteilprüfungen

	IV-Form	SWS	Semester CP						
			1	2	3	4	5	6	
Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie	V	1,5			3				
Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern	S	1			1				
PR1: Computational Main Group Chemistry	P + S	3,5			3				
PR2: Computational Transition Metal Chemistry	P + V	2 + 1						3	
<b>SUMME</b>		<b>9</b>						<b>10</b>	