

---

**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, Wolfgang Hieringer, Andreas Görling

---

Startsemester: SS 2020

Dauer: 1 Semester

Turnus: jährlich (SS)

Präsenzzeit: 56 Std.

Eigenstudium: 94 Std.

Sprache: Deutsch

---

#### Lehrveranstaltungen:

Theoretische Chemie III / Computational Molecular Chemistry (SS 2020, Vorlesung, 2 SWS, Andreas Görling)

Theoretische Chemie III / Computatonal Molecular Chemistry (Übungen) (SS 2020, 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.

---

#### Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

[1] **Chemie (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2011 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | alte Prüfungsordnungen | Gesamtkonto | Theoretische Chemie 3)

[2] **Chemie (Bachelor of Science): 4. Semester**

(Po-Vers. 2013 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | weitere Pflichtmodule der Grundstudiumsphase | Theoretische Chemie 3)

[3] **Molecular Science (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2011 | NatFak | Molecular Science (Bachelor of Science) | alte Prüfungsordnungen | Gesamtkonto | Computational Molecular Chemistry)

[4] **Molecular Science (Bachelor of Science): 4. Semester**

(Po-Vers. 2013 | NatFak | Molecular Science (Bachelor of Science) | Grundstudiumsphase | Computational Molecular

Chemistry)

---

**Studien-/Prüfungsleistungen:**

Theoretische Chemie III (Prüfungsnummer: 21211)

(englische Bezeichnung: Theoretical Chemistry III)

(diese Prüfung gilt nur im Kontext der Studienfächer/Vertiefungsrichtungen [1], [2])

Prüfungsleistung, schriftlich oder mündlich

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung!

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2020, 1. Wdh.: SS 2020

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, schriftlich oder mündlich

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2020, 1. Wdh.: SS 2020

1. Prüfer: Andreas Görling

---