

Modulbeschreibung ThC2 Theoretische Chemie 2**Studiengangstitel Bachelor Chemie**

1) Angaben zum Modul	
Modulkennzeichen	02-03-04 ThC2
Titel/Name des Moduls	Theoretische Chemie 2
Englischer Titel	Theoretical Chemistry 2
Zuordnung zum Curriculum/Studienprogramm	VF (Pflicht), PF (Wahl), M.Ed. (Wahl)
Empfohlene inhaltliche Voraussetzungen	Das Modul ThC1.
Lerninhalte	<p>Das Modul vermittelt die Anwendungen der Quantenmechanik in der Beschreibung chemischer Bindungen sowie in der statistischen Theorie zur Vorhersage thermodynamischer Eigenschaften von chemischen Systemen.</p> <p><u>Vorlesung „Theorie der chemischen Bindung“:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der quantenmechanischen Beschreibung von Atomen und Molekülen (Kurze Wiederholung zu ThC1 und Übergang zu Molekülen: Schrödinger-Gleichung, Lösungsansätze und grundlegende Näherungen, Born-Oppenheimer-Näherung, LCAO-Näherung, Variationsrechnung, VB-Theorie, Konfigurationenwechselwirkung) • Matrixdarstellung der Quantenmechanik (Schrödinger-Gleichung in Matrix-Darstellung, Eigenwertproblem, mathematisches Verfahren zur Lösung, Hückel-Rechnungen) • Qualitative MO-Theorie (Qualitative Konstruktion von MO-Schemata, Walsh-Diagramme, Vorhersage von molekularen Eigenschaften und Reaktionsverläufen anhand ausgewählter Beispiele) • Symmetrie (Beschreibung von Symmetrie, Symmetrie-Argumente in der MO-Theorie) • Grundideen quantitativer Rechenverfahren (Hartree-Fock, Moleküldynamik und Link zur Statistischen Thermodynamik, Kopplungsphänomene in der Beschreibung von Molekülen) <p><u>Übungen zur Vorlesung „Theorie der chemischen Bindung“:</u></p> <p>In den Übungen werden zu den Themen der Vorlesungen Rechen- und Verständnisaufgaben behandelt. Zum Teil werden diese von den Teilnehmern zu Hause vorbereitet. Die Übungen dienen der Vertiefung und Anwendung aber auch der Nachbereitung des Vorlesungsstoffes.</p> <p><u>Vorlesung „Statistische Thermodynamik“:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundbegriffe: Philosophie der statistischen Thermodynamik, Grundpostulat, Boltzmann's Definition der Entropie, Elemente der Wahrscheinlichkeitsrechnung und Kombinatorik, Binomial Verteilung, Berechnung der Thermodynamik für ein System von Elementen mit zwei Energiezuständen • Systeme unabhängiger Teilchen: Polynominalverteilung, Lagrange Variation, Boltzmann-Verteilung,

molekulare Zustandssumme des Elektrons im Kasten, das ideale Gas, Zustandssumme des harmonischen Oszillators, Einsteins Modell des Festkörpers, die halbklassische Näherung, Zustandsintegrale der Translation, der Rotation und der Schwingung, der Gleichverteilungssatz

- Systeme wechselwirkender Teilchen: Die Gibbs-Ensemble (mikrokanonisch, kanonisch, großkanonisch), Zusammenhang mit den thermodynamischen Potentialen, das kanonische Zustandsintegral, das ideale Gas, das van der Waals-Modell, Clusterentwicklung der kanonischen Zustandssumme, Mehrstoffsysteme: die Mischungsentropie, das Gibbs-Paradox, Zustandssummen für Mischungen, die Van der Waals-Theorie für Mischungen, das Bragg-Williams Gittermodell, Phasenübergänge, Landau-Theorie
- Systeme reagierender Teilchen: Bestimmung der Gleichgewichtszusammensetzung durch Variationsrechnung, statistische Formulierung der Gleichgewichtskonstanten, Berechnung von Gleichgewichtskonstanten, die Theorie des Übergangszustandes
- Quantenstatistik: Auswertung der großkanonischen Zustandssumme für Fermi- und Boseteilchen, das ideale Bosegas, Bosekondensation, das ideale Fermigas und die Theorie der Metalle

Übungen zur Vorlesung „Statistische Thermodynamik“:

In den Übungen werden zu den Themen der Vorlesungen Rechen- und Verständnisaufgaben behandelt. Zum Teil werden diese von den Teilnehmern zu Hause vorbereitet. Die Übungen dienen der Vertiefung und Anwendung aber auch der Nachbereitung des Vorlesungsstoffes.

The module treats the application of quantummechanics to the theory of chemical bonding and in the statistical theory for predicting thermodynamic properties of chemical systems.

Lecture „Theory of chemical bonding“:

- *Fundamentals of the quantum mechanical description of atoms and molecules (Brief review of results from module ThC1 and transfer to molecules: Schrödinger equation, general approach to its solution and fundamental approximations, Born-Oppenheimer approximation, LCAO approximation, variation principle variation method, VB theory, configuration interaction)*
- *Matrix representation of quantum mechanics (Schrödinger equation in matrix representation, Eigenwert problems, mathematical approach to their solution, Hückel theory)*
- *Qualitative MO theorie (Qualitative construction of MO diagrams, Walsh diagrams, prediction of molecular properties and reactions using selected examples)*
- *Symmetry (Description of symmetry, use of symmetry arguments in MO theory)*
- *Basic ideas of quantitative computational methods (Hartree-Fock, molecular dynamics and link to statistical thermodynamics, coupling phenomena in the description of molecules)*

Exercises „Theory of chemical bonding“:

The exercises treat numerical tasks and comprehension questions concerning the subjects covered by the lectures. Participants are expected to solve these tasks at home and present them during the course. The exercises apply and strengthen the understanding of the contents of the lecture through selected examples.

Lecture „Statistical thermodynamics“:

	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Fundamental concepts: Philosophy of statistical thermodynamics, fundamental postulate, Boltzmann's definition of entropy, elements of probability calculus and combinatorics, binomial distribution, derivation of thermodynamical properties of a system of elements with two energy states</i> • <i>Systems of independent particles: Polynomial distribution, Lagrange variation, Boltzmann distribution, molecular partition function of an electron in a box, ideal gas, partition function of the harmonic oscillator, Einstein model of solids, the semiclassical approximation, partition integrals of translational, rotational and vibrational motion, equipartition of energy</i> • <i>Systems of interacting particles: Gibbs ensembles (microcanonical, canonical, grand canonical), relation with thermodynamic potentials, the canonical partition integral, ideal gas, Van der Waals model, cluster expansion of the canonical partition function, multicomponent systems: entropy of mixing, Gibbs paradoxon, partition function for mixtures, Van der Waals theory of mixtures, Bragg-Williams lattice model, phase transitions, Landau theory</i> • <i>Systems of reacting particles: derivation of equilibrium composition by variational calculation, statistical representation and calculation of equilibrium constants, transition state theory</i> • <i>Quantum statistics: Evaluation of the grand canonical partition function for Fermi- and Bose particles, the ideal Bose gas, Bose condensation, the ideal Fermi gas and the theory of metals</i> <p><u><i>Exercises „Statistical thermodynamics“:</i></u> <i>The exercises treat numerical tasks and comprehension questions concerning the subjects covered by the lectures. Participants are expected to solve these tasks at home and present them during the course. The exercises apply and strengthen the understanding of the contents of the lecture through selected examples.</i></p>
<p>Lernergebnisse/Kompetenzen</p>	<p>Ziel des Moduls ist, den Studierenden ein grundlegendes Verständnis der quantenmechanischen Methoden zur Beschreibung der Bindung von Molekülen und der thermodynamischen Eigenschaften von chemischen Systemen zu vermitteln. Es beschäftigt sich mit den grundlegenden mathematischen Methoden und Ergebnissen der Quantenmechanik sowie deren Interpretation in Bezug auf die Eigenschaften chemischer Systeme.</p> <p>Die Veranstaltung „Theorie der chemischen Bindung“ strebt folgende Ziele an:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Verständnis der mathematischen Formulierung der Schrödingergleichung für Moleküle und der Probleme bei deren Lösung • Verständnis der grundlegenden Näherungen zur Lösung der Schrödinger-Gleichung • Fähigkeit zur Anwendung der qualitativen MO-Theorie zur Erklärung der Eigenschaften von Molekül und von Reaktionen • Erste Einblicke in quantitative Rechenmethoden zur theoretischen Vorhersage der Eigenschaften chemischer Systeme <p><i>The module aims at teaching the students applications of quantum mechanics to the theory of chemical bonding and in the statistical theory of thermodynamics. It focuses at an understanding of the fundamental mathematical tools and the results of quantum mechanics as well as their interpretation regarding the</i></p>

	<p><i>properties of chemical systems.</i></p> <p><i>The particular aims of the lecture and exercises "Theory of chemical bonding" are:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>General understanding of the mathematical formulation of the Schrödinger equation for molecules and of the problems arising during its solution</i> • <i>Understanding of the fundamental approximations required to solve the Schrödinger equation for molecules</i> • <i>Competence in applying qualitative MO theory to predict the properties of molecules and the outcome of chemical reactions</i> • <i>Basic knowledge of quantitative computational methods used to predict the properties of chemical systems</i>
Workloadberechnung	<p><u>Vorlesung Theorie der chemischen Bindung (2 SWS):</u> Präsenzzeit 28h, Selbststudium 32h</p> <p><u>Übungen Theorie der chemischen Bindung (1 SWS):</u> Präsenzzeit 14h, Selbststudium 16h</p> <p><u>Vorlesung Statistische Thermodynamik (2 SWS):</u> Präsenzzeit 28h, Selbststudium 32h</p> <p><u>Übungen Statistische Thermodynamik (1 SWS):</u> Präsenzzeit 14h, Selbststudium 16h</p>
Unterrichtssprache(n)	Deutsch
Modulverantwortliche(r)	Prof. Dr. Petra Swiderek
Häufigkeit	SoSe, regelmäßig
Dauer	1 Semester
ECTS-Punkte	6
SWS	6
2) Angaben zur Modulprüfung	
Prüfungsart <i>Modulprüfung (MP)</i> <i>Kombinationsprüfung (KP)</i> <i>Teilprüfung (TP)</i>	MP
Leistungen PL = <i>Prüfungsleistung (Bestandteil der MP/KP/TP)</i> SL = <i>Studienleistung</i>	1 PL

PVL = Prüfungsvorleistung (Freiwillig zu Übungszwecken als Selbstkontrolle, siehe AT 2010)	
Prüfungsform.	Klausur
Prüfungsdauer	120 min
Bearbeitungsfrist	
Anteil Note	100%
3) Angaben zu den Lehrveranstaltungen des Moduls	
Name/Titel der Lehrveranstaltung VAK 02-03-3-ThC2-1	Theorie der chemischen Bindung (2 SWS) <i>Theory of chemical bonds</i>
Häufigkeit	SoSe, regelmäßig
Gibt es parallele Veranstaltung	Nein
Sprache(n)	Deutsch
Dozent(en)	Prof. Dr. Simon Grabowsky
Lehrform(en)	Vorlesung
Literatur	Empfehlungen werden in der Veranstaltung gegeben
Name/Titel der Lehrveranstaltung VAK 02-03-3-ThC2-2	Übungen zur Theorie der chemischen Bindung (1 SWS) <i>Exercises in Theory of chemical bonds</i>
Häufigkeit	SoSe, regelmäßig
Gibt es parallele Veranstaltung	Nein
Sprache(n)	Deutsch
Dozent(en)	Prof. Dr. Simon Grabowsky, Dr. Tobias Borrmann
Lehrform(en)	Übung
Literatur	Empfehlungen werden in der Veranstaltung gegeben
Name/Titel der Lehrveranstaltung VAK 02-03-3-ThC2-3	Statistische Thermodynamik (2 SWS) <i>Statistical thermodynamics</i>
Häufigkeit	SoSe, regelmäßig

Gibt es parallele Veranstaltung	nein
Sprache(n)	Deutsch
Dozent(en)	Prof. Dr. Marcus Bäumer
Lehrform(en)	Vorlesung
Literatur	Empfehlungen werden in der Veranstaltung gegeben
Name/Titel der Lehrveranstaltung VAK 02-03-3-ThC2-4	Übungen zur Statistischen Thermodynamik (1 SWS) <i>Exercises in Statistical thermodynamics</i>
Häufigkeit	SoSe, regelmäßig
Gibt es parallele Veranstaltung	nein
Sprache(n)	Deutsch
Dozent(en)	Prof. Dr. Marcus Bäumer
Lehrform(en)	Übung
Literatur	Empfehlungen werden in der Veranstaltung gegeben