



## Genereller Ablauf

---

### Leitfaden

Das Wahlpflichtmodul Theoretische Chemie vertieft die erworbenen Kenntnisse, welche im Modul Struktur der Materie, hier im besonderen in der Vorlesung Theoretische Chemie, als Grundlage vermittelt wurden. Es soll weitgehend selbständig die Kompetenz erarbeitet werden, grundlegende ab initio Elektronenstrukturrechnungen durchzuführen zu können und auf chemische Fragestellungen anzuwenden. Für die Computerübungen wird das weit verbreitete Programmpaket MOLPRO verwendet, an dessen Entwicklung auch der Standort Regensburg maßgeblich beteiligt ist. Die Computerübungen werden durch begleitende Seminare unterstützt, die auch die in der Theorievorlesung nicht behandelten Korrelationsverfahren rein qualitativ kurz erläutern.

Das Praktikum findet als dreiwöchiges Blockpraktikum in der Regel zwischen dem fünften und sechsten Fachsemester statt. Es gliedert sich in insgesamt neun Übungsaufgaben, die in drei thematische Blöcke geteilt sind. Jeder Block wird durch eine Projektarbeit mit der letzten Übungsaufgabe abgeschlossen, für die ein Protokoll zu erstellen ist, welches abschließend mündlich verteidigt werden soll. Sobald alle Themenblöcke abschließend verteidigt wurden, findet nach Vereinbarung eine 30 minütige mündliche Prüfung über alle besprochenen Sachverhalte statt. Diese Note bildet dann die Modulnote.

Im Allgemeinen findet von Montag bis Mittwoch Vormittag ein Seminar begleitend zu den in den Übungsaufgaben relevanten Fragestellungen statt. Nachmittags sollen die Übungsaufgaben möglichst eigenständig gelöst werden. Zur Bearbeitung der Projektarbeit, die in der Regel am Mittwoch ausgegeben wird, ist dann bis Ende der Woche Zeit. Diese Zeit sollte auch ausreichen, um das benötigte Protokoll bis dahin zu erstellen und auch abzugeben. Ab Freitag bietet sich dann zudem die Möglichkeit, dieses direkt zu verteidigen. Protokolle und Verteidigung des Themenblockes bzw. der Projektarbeit sind bis spätestens eine Woche nach Ausgabe des betreffenden Themenblockes zu erbringen. Die mündliche Prüfung ist generell bis spätestens eine Woche nach Ende des Blockpraktikums abzulegen.

### Kurzübersicht über die Inhalte des Moduls

#### 1. Themenblock - Die Grundlagen

- Kennenlernen der Linuxbenutzeroberfläche bzw. der Konsole
- Einführung in das MOLPRO Programmpaket
- Hartree Fock (Basissätze, Dipolmomente, etc.)
- Die Z-Matrix als Darstellungsmöglichkeit der Molekülgeometrie
- Geometrieoptimierungen und einfache 2-dimensionale Potentialenergieflächen
- Visuelle Darstellung der Ergebnisse durch geeignete Programme z.B. MOLDEN oder Jmol

#### 2. Themenblock - Moleküleigenschaften und Reaktionen

- IR-Frequenzen und Zuordnung und Visualisierung der Schwingungsmoden
- Thermodynamische Größen wie Enthalpie
- Chemische Verschiebungen in der NMR-Spektroskopie
- Übergangszustände und chemische Reaktionen

#### 3. Themenblock - Jenseits von Hartree Fock

- Post Hartree Fock Methoden und Korrelationsenergie
- Angeregte Zustände
- Statische und dynamische Korrelation
- Van-der-Waals Wechselwirkungen
- Basissatzfehler (BSSE)

# Protokolle

Die Protokolle sollen Aufschluss über den gesamten Prozess der Lösungsfindung zu den einzelnen Projektarbeiten geben. Dabei soll in erster Linie klar erkennbar sein, wie das Vorgehen zur Ermittlung der Lösung gewesen ist. Die Protokolle sollen einen klar strukturierten Aufbau aufweisen und müssen jede Aufgabe des Projekts hinlänglich erschöpfend behandeln. Sollte einmal der Fall auftreten, dass keine korrekte oder vollständige Lösung einer Teil-Aufgabe erfolgen konnte, ist verständlich zu dokumentieren, wo mögliche Fehlerursachen liegen. Verwendete oder optimierte Molekülgeometrien sind als Z-Matrix oder xyz-Datensatz anzugeben. Die erhaltenen Ergebnisse sollen anschließend eingeordnet und diskutiert werden.

Des Weiteren ist ein Anhang zu erstellen, in dem die ermittelten Energien, Werte für Eigenschaften, dazugehörige Geometrien (Z-Matrix oder xyz-Geometrie) und visuellen Darstellungen der vorhergehenden zwei einleitenden Übungsaufgaben des Themenblockes enthalten sind. Hierbei sind keine Angaben zur Lösungsfindung notwendig und es genügen "nackte" Zahlen.

Zusammenfassung:

- Klare Gliederung
- Enthält jede Aufgabe der Projektarbeit
- Kurze Einführung mit Problemstellung für jede einzelne Aufgabe
- Klar nachvollziehbarer Lösungsweg (Basissatz, verwendete Methode, Energien, etc.)
- Einordnung und Diskussion der erhaltenen Ergebnisse
- Molekülgeometrien der einzelnen Aufgaben als Z-Matrix oder xyz-Geometrie
- Falls notwendig, verwendete Literaturstellen
- Anhang, wie oben beschrieben

## Vorraussichtliche Abgabefristen und spätesten Termin für die mündliche Modulprüfung im WS 2012/13

1. Themenblock - Die Grundlagen : Mittwoch 06.03.2013
2. Themenblock - Moleküleigenschaften und Reaktionen : Mittwoch 13.03.2013
3. Themenblock - Jenseits von Hartree Fock : Dienstag 19.03.2013

Mögliche Termine für die mündliche Modulprüfung : Montag 18.03. oder Dienstag 19.03.2013