

BCh 20 6.1.6 Computational Chemistry

Prof. Dr. Barbara Kirchner / Tom Frömbgen



Mulliken Center for Theoretical Chemistry

08.12.2023



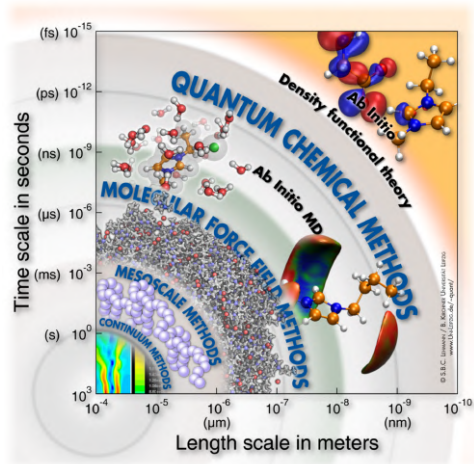
Computerchemie – Was ist das?

Wir studieren chemische Fragestellungen am Computer.

- Vorhersage von Reaktionen
- Berechnung von Moleküleigenschaften, z.B. Spektren
- Visualisierung auf atomarer Ebene

Dazu müsst ihr **nicht**:

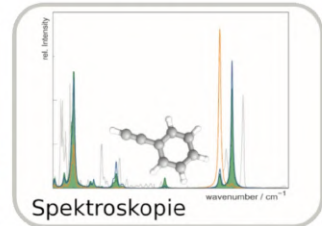
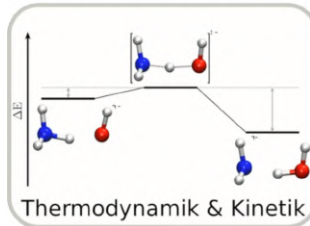
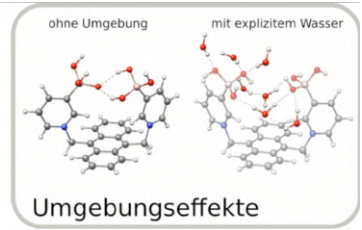
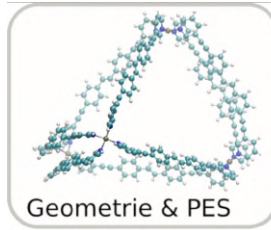
- Euch mit Computern auskennen
- Programmieren können
- TC I/II mit 1,0 bestanden haben



Block I: Hückelmethode und Quantenchemie (AG Grimme)

Hier lernt ihr:

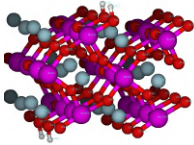
- Hückel MO-Theorie
- Dichtefunktionaltheorie und semiempirische Methoden
- Geometrieoptimierung
- MO-Diagramme berechnen
- Ladung, Elektronendichte und Bindungsanalyse
- Thermodynamik und Kinetik
- Umgebung- und Lösungsmittelleffekte
- Theoretische Spektroskopie



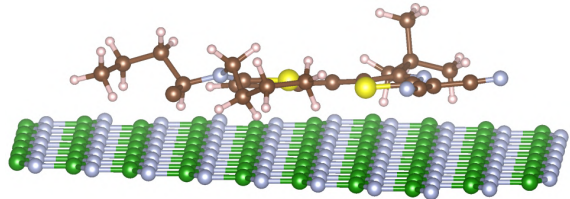
Einführung in den aktuellen Stand der Technik in der computergestützten Quantenchemie!

Block II: Festkörperquantenchemie (AG Bredow)

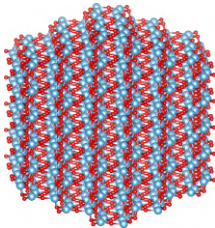
Hier untersucht ihr:



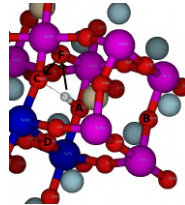
H₂ Adsorption auf Oberflächen



Oberflächenadsorption größerer Moleküle

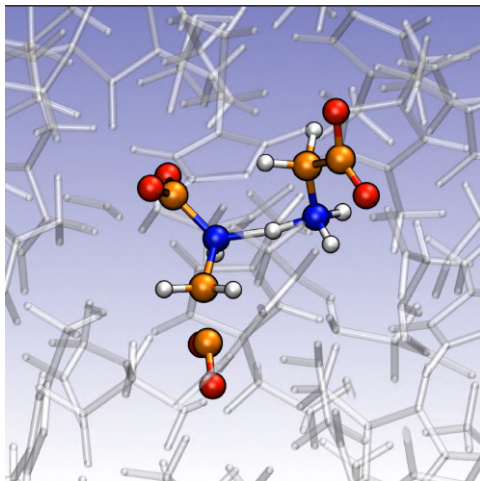


Eigenschaften von Nanopartikeln



H⁺ Diffusion in Perovskiten

Block III.1: Molekulardynamik (AG Kirchner)



Wie bewegen sich viele Moleküle gemeinsam in einem Ensemble?

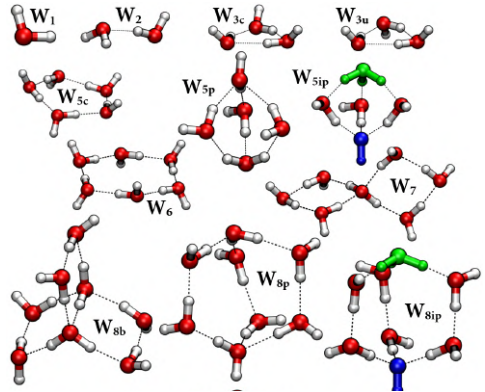
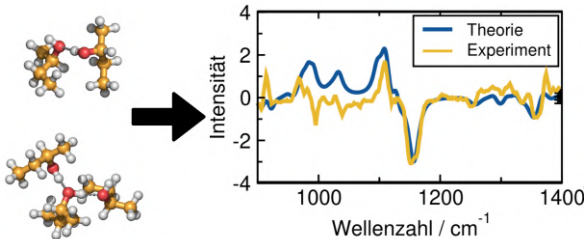
Hier lernt ihr:

- Grundlagen von moderner Molekulardynamik
- Beschreibung dynamischer Probleme
- Simulation von Gasen und Flüssigkeiten
- State-of-the-art Analysemethoden
- Berechnung von
 - Diffusionskonstanten
 - Verteilungsfunktionen
 - Schwingungsspektren

Block III.2: Quanten-Cluster-Equilibrium Theorie (AG Kirchner)

Flüssigkeiten durch Cluster beschreiben

- Quantenchemische Optimierung
- Reine Flüssigkeiten / Gemische
- Berechnung von Thermochemie und Spektren



Organisatorisches I

Praktikum

- 09.04. - vsl. 31.05.2024
 - I. Grimme
 - II. Bredow
 - III. Kirchner
 - IV. Individualversuch
- Im MCTC Computerraum, (teilweise) Homeoffice möglich
- Begleitende Vorlesung

Prüfungsleistungen

1. Kurzprotokolle zu Blöcken I-IV (70 %)
2. Seminarvortrag, Themenvergabe während Praktikum (30 %)



Foto: Volker Lannert

Organisatorisches II

Anmeldung

- Bis einschl. 01.03.2024
- Online unter: <https://www.chemie.uni-bonn.de/mctc/de/bch-praktikum>
- Weitere Fragen an: Dr. Werner Reckien (wreckien@uni-bonn.de)

Teilnahmevoraussetzungen

- BCh 20 3.4 Theoretische Chemie I
- BCh 20 4.4 Theoretische Chemie II

Vorbesprechung

- Mo, 08.04.2024, 15:15 Uhr, 0.005 (MCTC Seminarraum)