

# BCh 20 6.1.6 Computational Chemistry

Prof. Dr. Barbara Kirchner / Tom Frömbgen



Mulliken Center for Theoretical Chemistry

08.12.2023

---

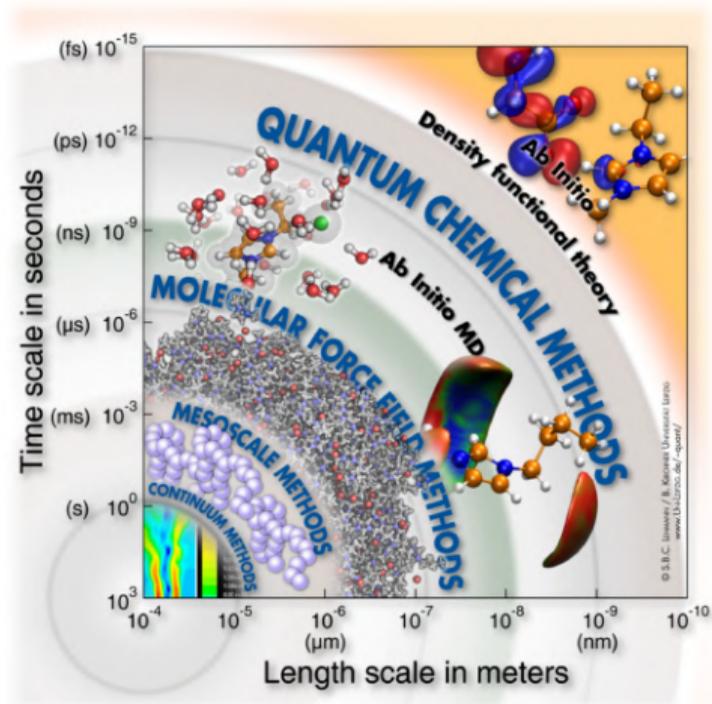
# Computerchemie – Was ist das?

Wir studieren chemische Fragestellungen am Computer.

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

Dazu müsst ihr **nicht**:

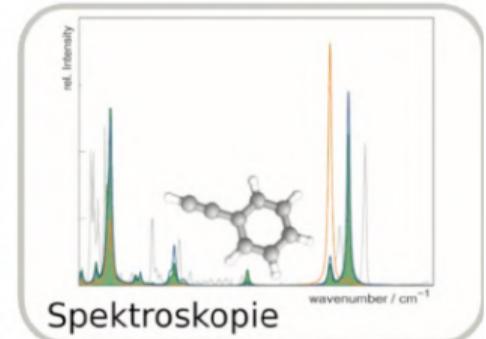
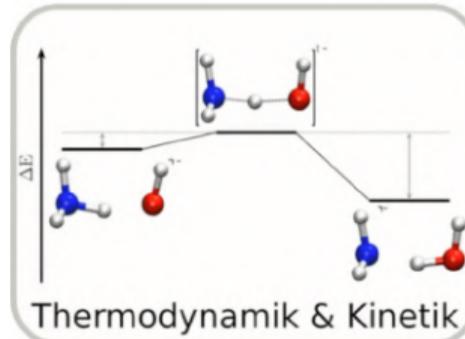
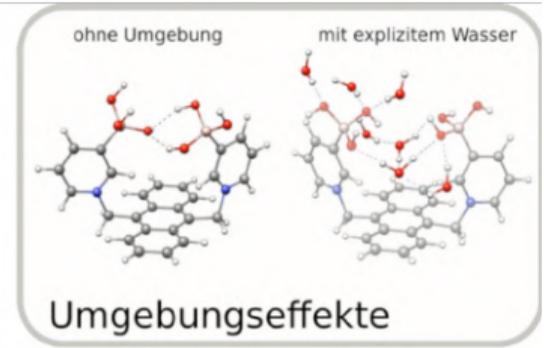
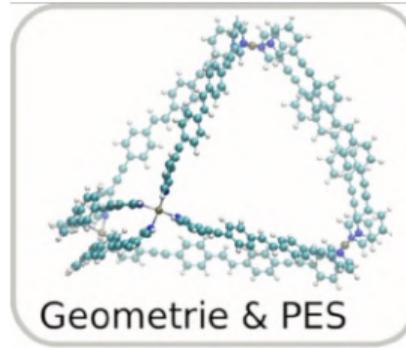
- Euch mit Computern auskennen
- Programmieren können
- TC I/II mit 1,0 bestanden haben



# Block I: Hückelmethode und Quantenchemie (AG Grimme)

Hier lernt ihr:

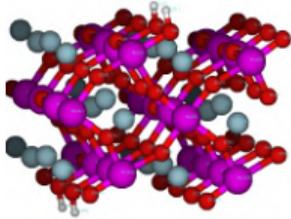
- Hückel MO-Theorie
- Dichtefunktionaltheorie und semiempirische Methoden
- Geometrieoptimierung
- MO-Diagramme berechnen
- Ladung, Elektronendichte und Bindungsanalyse
- Thermodynamik und Kinetik
- Umgebung- und Lösungsmittelleffekte
- Theoretische Spektroskopie



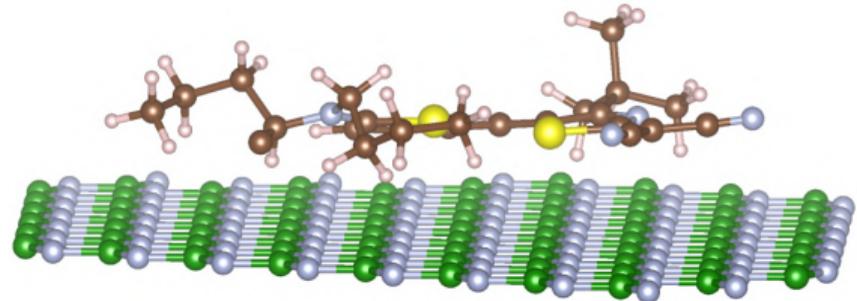
**Einführung in den aktuellen Stand der Technik in der computergestützten Quantenchemie!**

# Block II: Festkörperquantenchemie (AG Bredow)

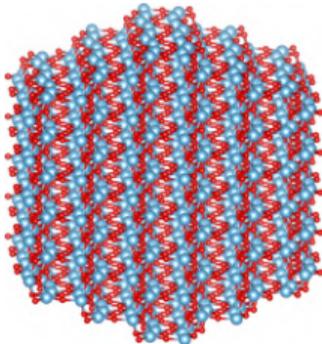
Hier untersucht ihr:



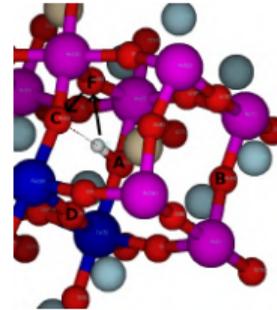
H<sub>2</sub> Adsorption auf Oberflächen



Oberflächenadsorption größerer Moleküle

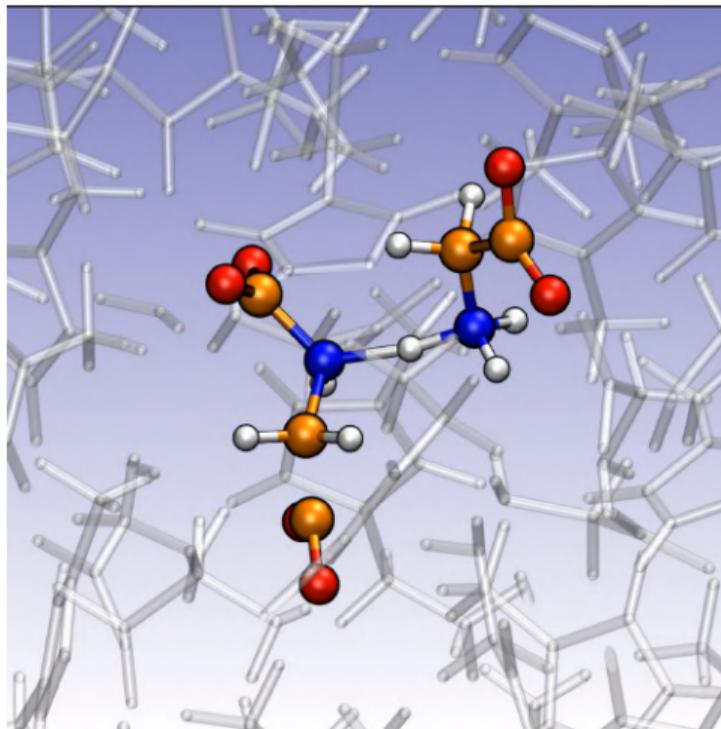


Eigenschaften von Nanopartikeln



H<sup>+</sup> Diffusion in Perovskiten

# Block III.1: Molekulardynamik (AG Kirchner)



**Wie bewegen sich viele Moleküle gemeinsam in einem Ensemble?**

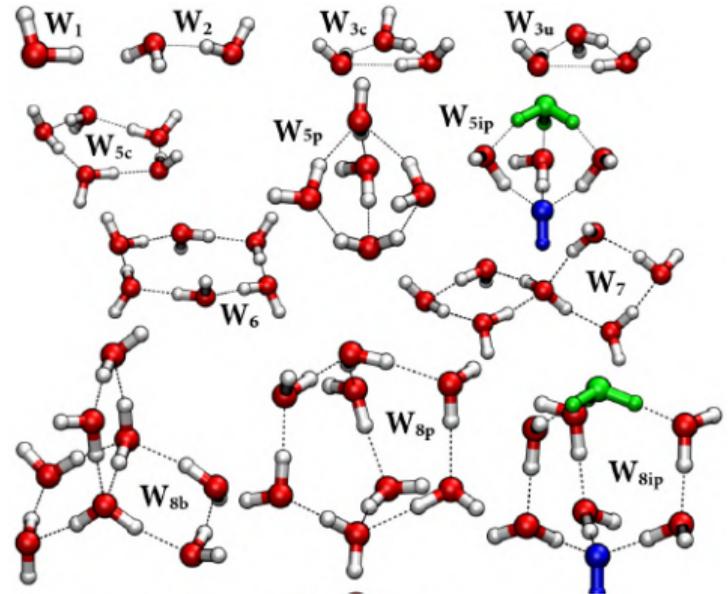
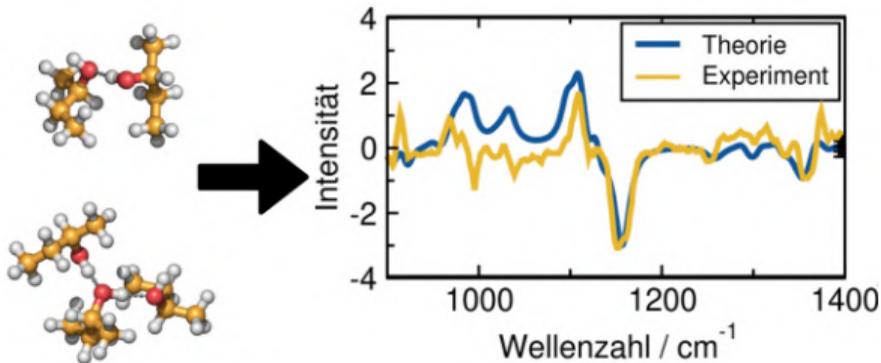
Hier lernt ihr:

- 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](mailto: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)