

Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen					TC0
Studiensem. 5	Regelstudiensem. 5	Turnus jährlich	Dauer 1 Semester	SWS 2/4	ECTS-Punkte 3 oder 6

Modulverantwortlicher	Stopkowicz	
Dozenten	Stopkowicz, Hub	
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflicht	
Zulassungsvoraussetzungen	PC4 (Quantenmechanik)	
Prüfungen	Klausur oder mündliche Prüfung Wenn beide Vorlesungsteile belegt werden (6CP statt 3CP) ist Prüfung mit Schwerpunkt auf Vorlesungsteil 1 oder 2 möglich.	
Lehrveranstaltungen / SWS	Vorlesungsteil 1 mit Übung/Practical: 2V Vorlesungsteil 2 mit Übung/Practical: 2V	
Arbeitsaufwand	Vorlesungen + Übungen inkl. Klausur: 15 Wochen (4 SWS): 60 h Vor- Nachbereitung, Prüfung 120 h Summe: 180 h (6 CP)	
Modulnote	Note aus Klausur bzw. mündlicher Prüfung	

Lernziele / Kompetenzen

Die Studierenden erwerben Kenntnisse der Grundlagen der Quantenchemie bzw. Theoretischen Chemie sowie in molekularmechanische Methoden zur Simulation von Makromolekülen. Sie kennen wichtige quantenchemische und molekularmechanische Methoden und können deren Unterschiede in Bezug auf Qualität und Anwendbarkeit gegeneinander abgrenzen und diskutieren. Sie können die Grundzüge der Methoden erklären. Die Studierenden können sich spezielle Themen in der Quantenchemie/Theoretischen Chemie/Molekularmechanik selbstständig erarbeiten. Zusätzlich erlernen sie am Computer die Anwendung von Programmpaketen mit den Berechnungen und Simulationen in der Theoretischen Chemie/Molekularmechanik durchgeführt werden.

Inhalt

Vorlesungsteil 1 (Quantenchemische Methoden)

- Quantenmechanische Beschreibung von Molekülen, Schrödinger-Gleichung, Born-Oppenheimer-Näherung
- Näherungen für die Wellenfunktion, Hartree-Fock-Theorie, Dichtefunktionaltheorie, LCAO-Ansatz, Roothaan-Hall-Gleichungen
- Wellenfunktionsbasierte Beschreibung der Elektronenkorrelation, Configuration-Interaction-Methoden, Möller-Plesset-Störungstheorie, Coupled-Cluster-Theorie
- Beschreibung statischer Elektronenkorrelation: multiconfigurational SCF bzw complete active space (CAS-SCF) Methoden
- QM/MM-Methoden

Vorlesungsteil 2 (Molekularmechanische Methoden)

- Struktur, Funktion und intramolekulare Wechselwirkungen von biologischen Makromolekülen
- Molekulardynamik-Simulationen: physikalische Grundlagen und Algorithmen
- Bestimmung von Proteinstrukturen, Struktur-Refinement gegen experimentelle Daten
- Elektrostatik in Proteinen, Poisson-Boltzmann-Theorie, Lösemittel- und Protonierungseffekte
- Kollektive Dynamik: Normalmoden und Hauptkomponentenanalyse
- Berechnung freier Energien

Übungen

- Übungen zu den o.g. Themen
- Computerpraktika zur Anwendung quantenchemischer und molekularmechanischer Methoden

Weitere Informationen

Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch