



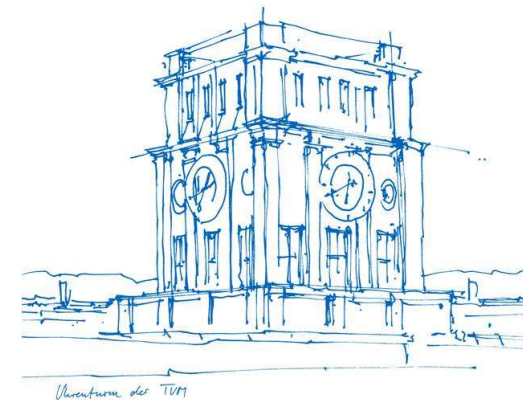
SP2: Theoretische Chemie

Koordination:

Prof. Frank Ortmann

Technische Universität München

2024

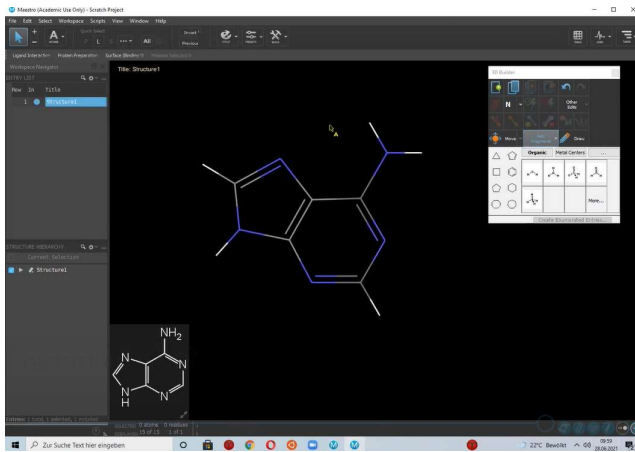


Bei Fragen:

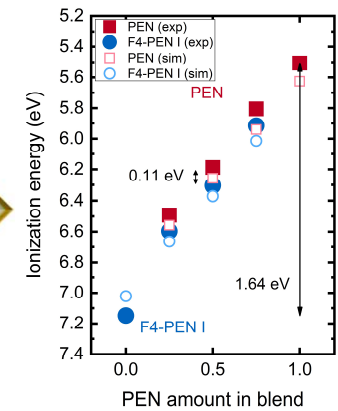
frank.ortmann@tum.de

Was machen wir?

- Molekül- & Materialsimulationen (Eigenschaften vorhersagen)



```
Terminal -- sh -- 80x40
lrwx-xr-x 1 root wheel 11 1 Jan 2001 var -> private/var
sh-3.25 dir
sh: dir: command not found
sh-3.25 dir
sh: dir: command not found
sh-3.25 ls -la
total 36765
drwxr-xr-x 33 root admin 1190 15 Mai 13:30 .
drwxr-xr-x 33 root admin 1190 15 Mai 13:30 ..
-rw-rw-r-- 1 root admin 6148 21 Mai 11:33 .DS_Store
drwx----- 3 root admin 102 1 Jan 2001 .Spotlight-V100
d-wx-wx-wt 3 root staff 102 1 Jun 17:13 .Trashes
----- 1 root admin 0 23 Jun 2009 .file
drwx----- 18 root admin 612 11 Jun 03:01 .fseventsd
-rw----- 1 root wheel 131072 17 Mai 02:14 .hotfiles.btree
drwxrwxr-x 2 root wheel 68 18 Mai 2009 .vol
lrwx-xr-x 1 root wheel 11 1 Jan
dr-xr-xr-x 2 root wheel 1 9 Jun 0
-rw-r--r-- 1 root wheel 18659362 4 Feb 0
dr-xr-xr-x 2 root wheel 1 9 Jun 0
drwxr-xr-x 3 root admin 102 1 Jan 1
drwxr-xr-x 6 root wheel 204 1 Jan 1
drwxr-xr-x 64 root wheel 2176 31 Mär 0
lrwx-xr-x 1 root wheel 11 1 Jan
drwxr-xr-x 15 root wheel 510 23 Apr 0
lrwxr-xr-x 1 root wheel 11 1 Jan
sh-3.25
```



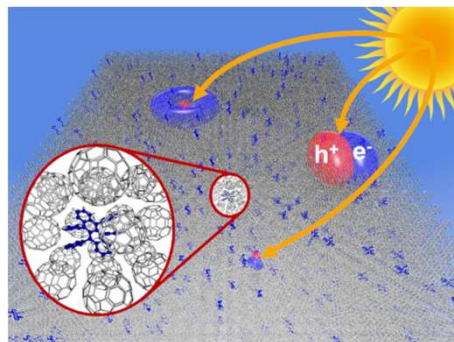
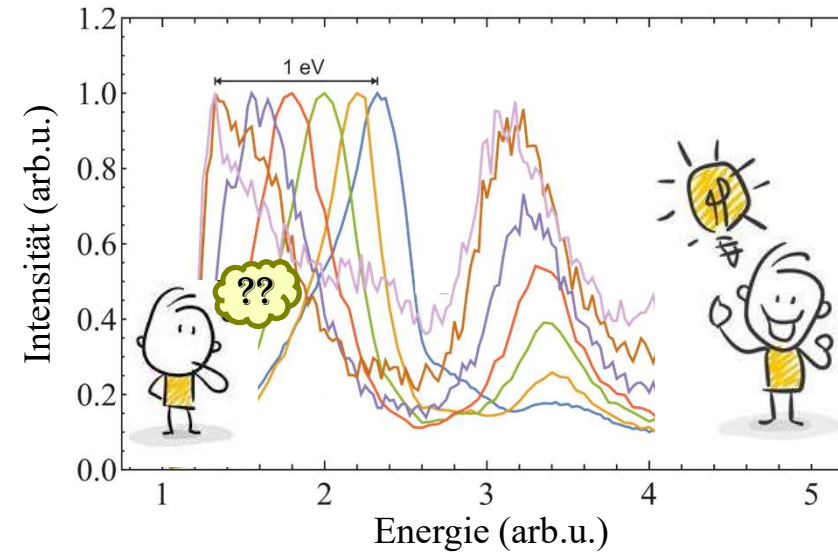
- Methodenentwicklung (Simulationen verbessern)

Inefficient: ~~$$\sigma_{xy}(t) \propto \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Re Tr} \left[\delta(E - H) j_y U^\dagger(t') \frac{1}{E - H + i\eta} j_x U(t') \right]$$~~

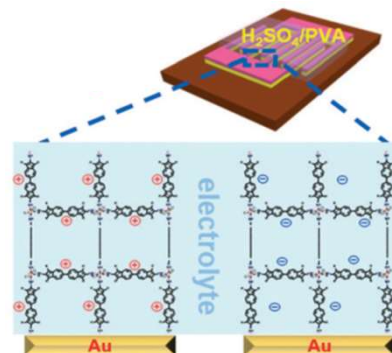
NEW Method:
$$\sigma_{xy}(t) = \frac{\beta e^2}{4V} \left[\frac{d}{dt} \mathcal{D}_{xy}^+(t) + \frac{1}{2\hbar} \mathcal{D}_{xy}^-(t) \right]$$

Wozu Simulationen?

- Experimente verstehen
- Materialien verbessern
- Anwendungen ermöglichen

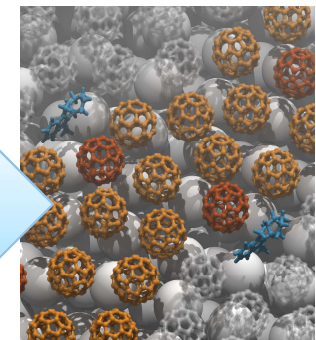
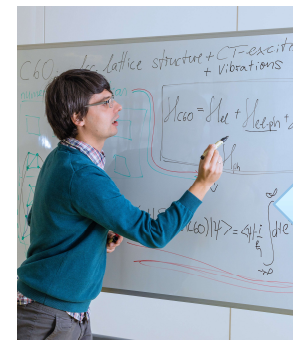


Solarzelle



Superkondensator

...oder einfach weil man Spaß daran hat



Einbettung in Exzellenzcluster:



Angebot Lehrveranstaltungen



- Advanced Programming and Numerical Methods (5 ECTS) (CH3331)
- Lab Rotation Theoretical Chemistry (4 Wo., 5 ECTS) (CH3332)
- Forschungspraktikum PC (8 Wo., 10 ECTS) (CH3062)

=> *Masterarbeit*



Wahlbereich (V+Ü mit je 4 SWS, 5 ECTS):

WiSe: Advanced Electronic Structure (CH3333)

WiSe: Symmetry and Group Theory (CH3337)

SoSe: Methods of Molecular Simulation (CH3334)

SoSe: Quantum Dynamics and Spectroscopy (CH3335)

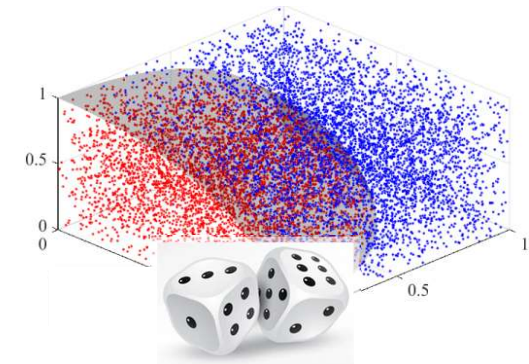
SoSe: Solid State Theory (CH3336)

Advanced Programming and Numerical Methods (P)

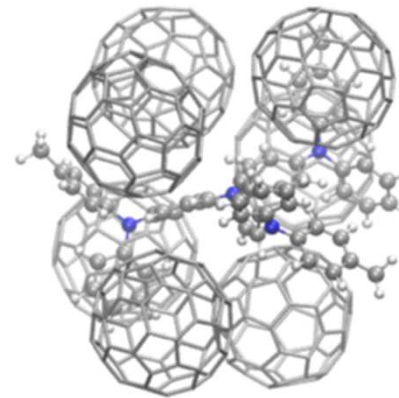
- Time: 3 weeks in March 2023
- Organized in small tutor groups

Content:

- Introduction into *python* and basic programming
- Solving ordinary differential equations
- Monte-Carlo methods
- Molecular dynamics simulations
- Linear algebra tasks
- Fourier transformation
- Minimization
- Time-dependent Schrödinger equation
- Neural networks



<https://de.mathworks.com/>



$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Lab Rotation in Theoretical Chemistry (Forschungspraktikum 4 Wo. oder 8 Wo.)

- Work on an individual research project
- Individual supervision by us

Topic 1

ANTI **SYN** **STEP**

→ 2D charge transport

Topic 2

Building blocks

2D COF structure

chromophore

vertex

Abs

λ / nm

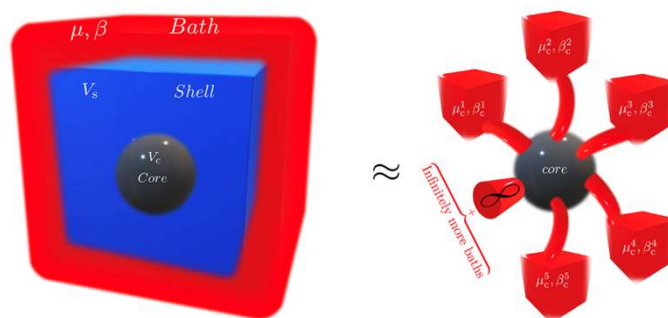
→ Tuning optical properties

- Presentation of results

Lab Rotation in Theoretical Chemistry (Forschungspraktikum 4 Wo. oder 8 Wo.)

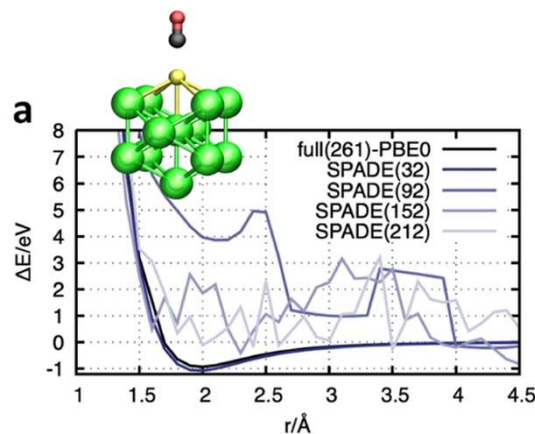
- Kleine individuelle Forschungsprojekte
- Anleitung durch Gruppenleiter oder Mitarbeiter

Thema 1



➔ Vergleich und Optimierung von neuartigen Lösungsmittelmodellen

Thema 2



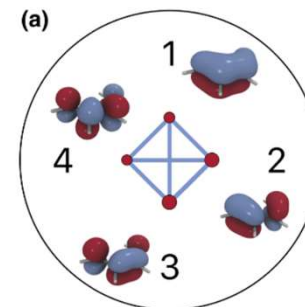
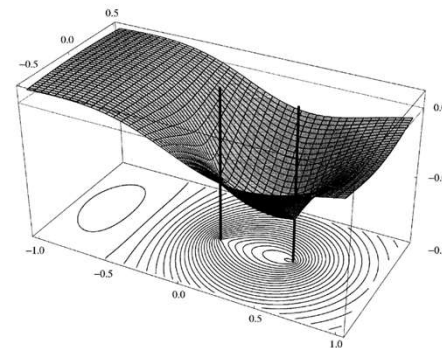
➔ Analyse eingebetteter Clustermodelle für die Elektrokatalyse

- Vorstellung der Resultate

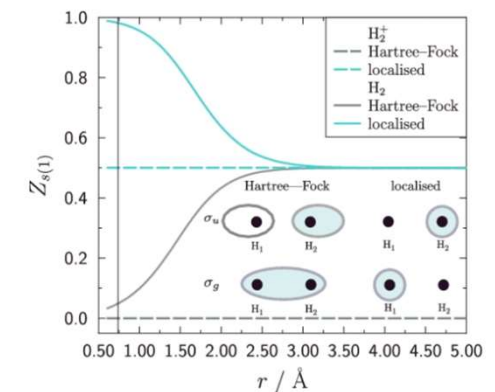
- Fortgeschrittene Elektronenstrukturmethoden mit der zentralen Frage:
Wie können wir die Potentialhyperfläche eines chemischen Systems berechnen?

Themen (Auszug):

1. Kraftfelder
2. Hartree–Fock Theorie
3. Wellenfunktionsbasierte Methoden
4. Dichtefunktionaltheorie (DFT)
5. Elektronisch angeregte Zustände



Hartree–Fock orbitals



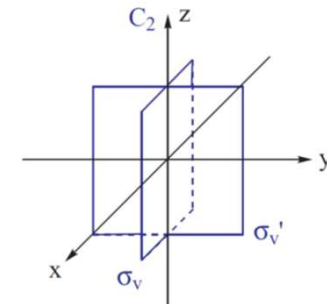
- Vorlesung mit begleitenden Übungen in kleinen Tutorgruppen

Symmetry and Group Theory (V+Ü)

- allgemeine Symmetriebetrachtungen
- mathematische Grundlagen und Tools der Gruppentheorie

Themen (Auszug):

1. Grundlagen der Gruppentheorie
 2. Molekulare Symmetrie und Symmetriegruppen
 3. Darstellungen von Gruppen
 4. Symmetrien in der Quantenmechanik
 5. Symmetrien in der Spektroskopie (IR, Raman, NMR, etc)
 6. Festkörper- und Kristallsymmetrie, Ligandenfeldtheorie
 7. Auswahlregeln, Parität, Multipolentwicklung
- Vorlesung mit begleitenden Übungen in kleinen Tutorgruppen



$$\Gamma(A)\Gamma(B) = \Gamma(AB)$$

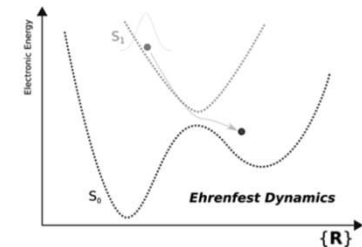
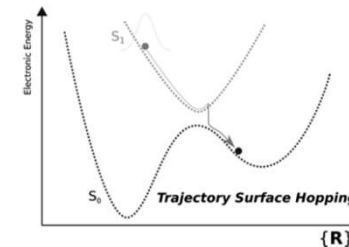
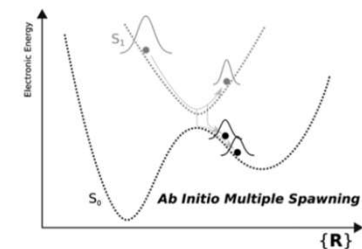
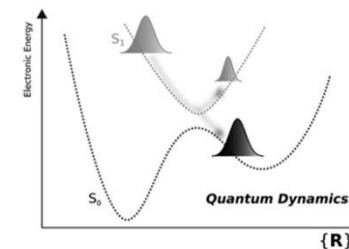
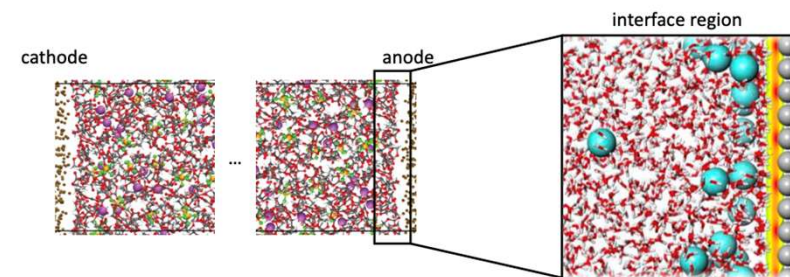
	E	C_2	σ_v	σ'_v
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	-1	1
Γ_3	1	-1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	-1

- grundlegende Methoden und Algorithmen der molekularen Simulation

Wie können wir aus der Potentialhyperfläche Information über das chemische System gewinnen?

Themen (Auszug):

1. Lokale und globale Strukturoptimierung
2. *Ab Initio* Thermodynamik
3. Molekulardynamik
4. Monte Carlo Verfahren
5. Freie Energie Simulationsmethoden
6. Dynamik angeregter Zustände

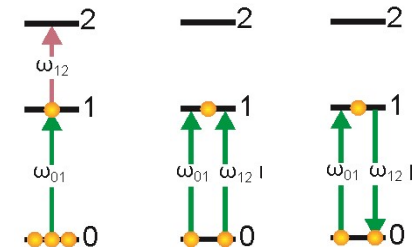
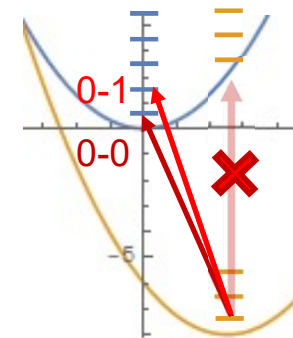


- Vorlesung mit begleitenden Computerübungen in kleinen Tutorgruppen¹⁰

- Beschreibung der Dynamik von Quantensystemen
- Einfache Anregungen und Fortgeschrittene Spektroskopie

Themen (Auszug):

1. Zeitabhängige Quantenmechanik
2. Fermi's Goldene Regel
3. Dichtematrixformalismus
4. Quantenmechanik und Temperatur
5. Licht-Materie Wechselwirkung
6. Response-Theorie



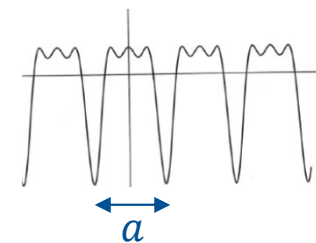
- Vorlesung mit begleitenden Übungen in kleinen Tutorgruppen

- Modelle, Phänomene und Beschreibungen für Festkörper und deren Oberflächen

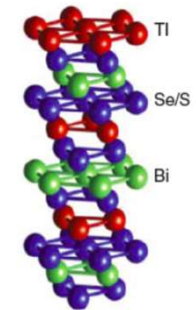
Themen (Auszug):

1. Periodische Festkörper
2. Kristallstruktur
3. Phononen
4. Elektronstruktur in Festkörpern
5. Oberflächenphänomene und heterogene Katalyse

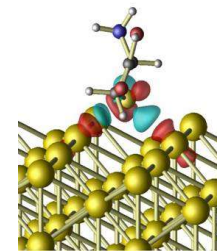
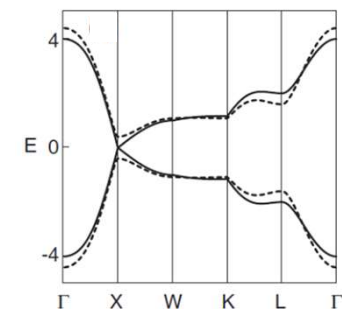
Periodisches Potential



Struktur



Anregungsenergie



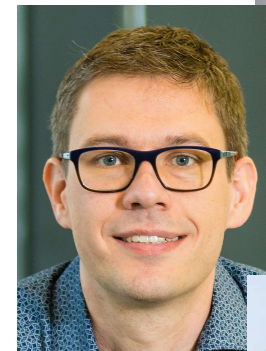
- Vorlesung mit begleitenden Übungen in kleinen Tutorgruppen

Dozenten

Bokarev, Sergey, Dr. rer. nat.



Ortmann, Frank, Prof. Dr. rer. nat.



Schulte-Herbrüggen, Thomas, Dr. rer. nat.



Stein, Christopher, Prof. Dr.

