

Computational Chemistry		Wahlpflichtmodul			
Inhalte:					
<u>Vorlesung:</u> Gruppen und Körper; Vektorräume; Hilbertraum; Erzeugendensysteme; Basen von Vektorräumen; Skalarprodukt; Orthonormierung; lineare Abbildungen und der Zusammenhang mit Matrizen; Darstellung und Eigensysteme von linearen Abbildungen; komplexe Zahlen und Funktionen; Ableitung von komplexen Funktionen; Vektoranalysis; Fourierreihen und Fourierintegrale; Fourierttransformation; Variationsrechnung; Lagrangeformalismus; Euler-Lagrange-Gleichungen; Lagrange-multiplikatoren					
<u>Computerpraktikum Quantum Chemistry:</u> Einführung in die Grundlagen und die Praxis von ab-initio-Rechnungen an chemischen Systemen; Aufstellung der Z-Matrix; Energieminimierung; Geometrieoptimierung; Berechnung von molekularen Größen; Visualisierung der Ergebnisse; Diskussion der Zuverlässigkeit von Kraftfeld-, Hartree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie-Methoden					
<u>Computerpraktikum Molecular Dynamics Simulations:</u> Einführung in die Grundlagen und die Praxis von Moleküldynamik-Simulationen an Biomolekülen; Diskussion von empirischen Kraftfeldern und Samplingmethoden; Grundlagen der Statistik; Definition der Simulationsbox; Analyse und Visualisierung der MD-Trajektorien					
Qualifikationsziele und Kompetenzen:					
Durch die Vorlesung werden die Studierenden in die Lage versetzt, den mathematischen Formalismus, der sich hinter der Schrödingergleichung verbirgt, zu verstehen. Damit wird ihnen ermöglicht, sich auf die physikalischen und chemischen Aspekte der Quantentheorie zu konzentrieren, um so tieferen Einblick in diese Aspekte zu erwerben. In den Computerpraktika arbeiten sich die Studierenden eigenständig in ein Gebiet der theoretischen Chemie ein und führen anschließend ab-initio-Rechnungen an chemischen Systemen oder Moleküldynamik-Simulationen an Biomolekülen durch. Die Einarbeitung erfolgt in Form eines Selbststudiums; hierzu wird den Studierenden Literatur an die Hand gegeben, mit Hilfe derer sie sich auf den praktischen Teil (Konzeption und Durchführung einer ab-initio-Rechnung oder einer MD-Simulation an großen Molekülen) vorbereiten.					
Angebotszyklus:	einmal pro Jahr				
Dauer des Moduls:	2 – 3 Semester				
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:	Der Leistungsnachweis zur Vorlesung ist Voraussetzung für die Teilnahme an den Computerpraktika.				
Organisatorisches:	empfohlene Vorkenntnisse: solide Grundlagen in Mathematik und Quantenmechanik Zur Vertiefung des Vorlesungsstoffs findet eine Übung statt. Es wird erwartet, dass sich die Studierenden daran aktiv beteiligen. Die Computerpraktika finden in Englisch statt. Dafür ist eine Anmeldung erforderlich. Die Praktikumsregularien werden zu Beginn des jeweiligen Praktikums bekannt gegeben.				
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):	Die Einarbeitung in das Themengebiet der Computerpraktika erfolgt in Form eines Selbststudiums. Der Erfolg wird in einem Fachgespräch festgestellt. Danach kann der praktische Teil begonnen werden.				
kumulative Modulprüfung / Prüfungsform:	Vorlesung: Abschlussklausur Computerpraktika: jeweils ein Referat über das bearbeitete Projekt				
Voraussetzung für die Vergabe der CP:	bestandene Modulteilprüfungen				
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:	Wahlpflichtmodul für Studierende des Bachelorstudiengangs Biophysik				
Lehrveranstaltungen	Typ	SWS	Semester / CP		
			1	2	3 – 6
Mathematische Verfahren zur Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme III	V + Ü	2 + 1			5
Quantum Chemistry (Computerpraktikum)	P	4			5
Molecular Dynamics Simulations (Computerpraktikum)	P	4			5