

Moderne Methoden der Theoretischen Chemie		7 CP				
Wahlpflichtmodul im Pflichtbereich Physikalische und Theoretische Chemie						
Inhalte: Vertiefung Hartree-Fock (HF)-Theorie: Self-Consistent-Field (SCF)-Verfahren, Restricted vs. Unrestricted HF-Theorie; Behandlung der Elektronenkorrelation: Konfigurationswechselwirkung, Møller-Plesset-Störungstheorie; Dichtefunktionaltheorie (DFT): Hohenberg-Kohn-Theoreme, Dichtefunktionale, Kohn-Sham-Ansatz; Überblick über quantenchemische Rechenverfahren: Basissätze, semiempirische Verfahren, DFT, ab-initio-Verfahren; Kerndynamik auf Born-Oppenheimer-Potentialflächen: Quantendynamik vs. klassische Dynamik; gemischt quanten-klassische Verfahren; Grundlagen der Molekulardynamik (MD): Kraftfelder, Integration der klassischen Bewegungsgleichungen, Ensembles (NVT, NPT); Grundlagen der Quantendynamik: Wellenpaketpropagation, Gaußsche Wellenpakete, Gitterverfahren; angeregte elektronische Zustände und Zusammenbruch der Born-Oppenheimer-Näherung: nichtadiabatische Effekte, Implikationen für die Photochemie und Ultrakurzzeitspektroskopie						
Qualifikationsziele und Kompetenzen: Die Studierenden lernen die aktuellen Methoden der Theoretischen Chemie kennen, sowohl im Bereich der elektronischen Strukturberechnung (zum Beispiel „Post-Hartree-Fock“-Methoden, Dichtefunktionalmethoden) als auch im Bereich der Kerndynamik (klassische Molekulardynamik / MD, Wellenpaketdynamik). Sie lernen zu beurteilen, welche Methode am besten an eine gegebene Fragestellung angepasst ist und wo die Grenzen der jeweiligen Verfahren liegen. Die Behandlung elektronisch angeregter Zustände schafft eine Verbindung zur modernen Photochemie und Ultrakurzzeitspektroskopie. Neben den theoretischen Grundlagen werden die Studierenden an den konkreten Einsatz der verschiedenen Methoden herangeführt.						
Angebotszyklus:	einmal pro Jahr					
Dauer des Moduls:	1 Semester					
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:	keine					
Organisatorisches:	empfohlene Vorkenntnisse: gute mathematische und theoretische Kenntnisse Zur Vertiefung und Anwendung des Vorlesungsstoffs findet eine Übung statt. Darin werden vorgegebene Übungsaufgaben besprochen sowie quantenchemische und MD-Rechnungen am Computer durchgeführt. Es wird erwartet, dass sich die Studierenden daran aktiv beteiligen.					
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):	keine					
Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:	Klausur					
Voraussetzung für die Vergabe der CP:	bestandene Modulabschlussprüfung					
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:	Wahlpflichtmodul für Studierende der Masterstudiengänge Biophysik und Physik					
Lehrveranstaltungen	Typ	SWS	Semester / CP			
			1	2	3	4
Theoretische Chemie II	V + Ü	3 + 1	7			