

[W.10] Molecular Computational Chemistry: Main Group Systems	Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppensysteme	Wahlpflicht- modul	7 CP (insg.) = 210 h						6 SWS
			Kontaktstudium 6 SWS / 90 h			Selbststudium 120 h			
Inhalte									
<p><u>Vorlesung</u> „Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie“: Theoretische Grundlagen (Hartree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie, Korrelationsverfahren, Basissätze, Optimierungsverfahren), Arbeitsweise der Computerprogramme, molekulare Bindungssituationen und Spinzustände.</p> <p><u>Seminar</u> „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“: Architekturprinzipien und Nutzung moderner Großrechner, Dateisysteme und Netzwerkstrukturen, Linux Shell-Befehle und einfache Shell-Programmierung.</p> <p><u>PR1</u>: Praktikum und Seminar „Computational Main Group Chemistry“: Strukturen und Eigenschaften molekularer Verbindungen, Interpretation von Molekülorbitalen, Berechnung von Reaktionspfaden einfacher Hauptgruppenverbindungen.</p> <p><i>Es kann entweder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppensysteme oder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppen- und Übergangsmetallsysteme absolviert werden.</i></p>									
Lernergebnisse / Kompetenzziele									
<p>In diesem Modul erlernen die Studierenden die Bearbeitung aktueller chemischer Fragestellungen mithilfe quantenchemischer Methoden. Die Vorlesung vermittelt anwendungsorientierte theoretische Grundlagen der Methoden, die in den Praktika zum Einsatz kommen. Die Studierenden werden an die Nutzung von Hochleistungsrechnern heran-geführt, wie sie im lokalen und überregionalen Umfeld verfügbar sind, und erlernen das selbständige Arbeiten mit dem Unix-Betriebssystem und mit quantenchemischen Programmpaketten. Anhand einfach gewählter Beispiele aus der Hauptgruppen-chemie wird die Durchführung der Berechnungen, sowie die Auswertung und professionelle Dokumentation der Ergebnisse erlernt. Einsatzmöglichkeiten, aber auch Grenzen der jeweiligen Methoden werden erörtert, was eine kritische Bewertung der Aussagekraft von quantenchemischen Ergebnissen ermöglicht.</p>									
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls									
Praktikum: Seminar „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“									
Empfohlene Voraussetzungen									
Vorlesung „Hauptgruppenchemie“									
Organisatorisches									
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		B.Sc. Chemie / FB14							
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		Wahlpflichtmodul: B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12							
Häufigkeit des Angebots		Einmal im Jahr (Block im Wintersemester in der vorlesungsfreien Zeit)							
Dauer des Moduls		1 Semester							
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Prof. M. Holthausen / Dr. M. Diefenbach							
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen									
Teilnahmenachweise		Seminare: Regelmäßige und aktive Teilnahme							
Leistungsnachweise / Studienleistung		PR1: Protokoll							
Lehr- / Lernformen		Vorlesung, Seminar, Praktikum							
Unterrichts- / Prüfungssprache		Deutsch							
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt							
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Mündliche Abschlussprüfung (30 Min.)							
kumulative Modulprüfung bestehend aus:									
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:									
		IV- Form	SWS	Semester CP					
				1	2	3	4	5	6
	Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie	V	1,5					3	
	Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern	S	1					1	
	PR1: Computational Main Group Chemistry	P + S	3,5					3	
	SUMME		6					7	