

[K3.2] <i>Modern Methods of Theoretical Chemistry</i>	<b>Moderne Methoden der Theoretischen Chemie</b>	<b>Wahlpflichtmodul im Kernbereich K3</b>	<b>7 CP (insg.) = 210 h</b>				<b>4 SWS</b>
			<b>Kontaktstudium</b> 4 SWS / 60 h	<b>Selbststudium</b> 150 h			
<b>Inhalte</b>							
<p>Quantenchemische Behandlung molekularer Systeme: Hartree-Fock (HF)-Theorie und 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: nicht-adiabatische Effekte, Implikationen für die Photochemie und Ultrakurzzeitspektroskopie.</p> <p>Zur Vertiefung und Anwendung des Vorlesungsstoffs finden eine Theorieübung und ein Computerpraktikum statt. In der Theorieübung werden einschlägige Übungsaufgaben besprochen, während im Computerpraktikum quantenchemische und MD-Rechnungen durchgeführt werden.</p>							
<b>Lernergebnisse / Kompetenzziele</b>							
Die Studierenden lernen die aktuellen Methoden der Theoretischen Chemie kennen, sowohl im Bereich der elektronischen Strukturrechnung (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.							
<b>Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls</b>							
Keine							
<b>Empfohlene Voraussetzungen</b>							
Grundlegende Kenntnisse der Mathematik und der Theoretischen Chemie							
<b>Organisatorisches</b>							
Die Bearbeitung der Übungsaufgaben, sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen wird dringend empfohlen.							
<b>Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)</b>			M.Sc. Chemie / FB 14				
<b>Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge</b>			Pflicht: B.Sc. Biophysik / FB13 WPF: B.Sc. Meteorologie, M.Sc. Meteorologie / FB11; B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12; M.Sc. Physik / FB13				
<b>Häufigkeit des Angebots</b>			Einmal im Jahr (im Sommersemester)				
<b>Dauer des Moduls</b>			1 Semester				
<b>Modulbeauftragte / Modulbeauftragter</b>			Prof. I. Burghardt				
<b>Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen</b>							
<b>Teilnahmenachweise</b>			Keine				
<b>Leistungsnachweise</b>			Keine				
<b>Lehr- / Lernformen</b>			Vorlesung, Übung, Praktikum				
<b>Unterrichts- / Prüfungssprache</b>			Deutsch				
<b>Modulprüfung</b>			<b>Form / Dauer / ggf. Inhalt</b>				
<b>Modulabschlussprüfung bestehend aus:</b>			Schriftliche Abschlussprüfung (Klausur 120 Min.)				
<b>kumulative Modulprüfung bestehend aus:</b>							
<b>Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:</b>							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Moderne Methoden der Theoretischen Chemie	V	3		5		
	Moderne Methoden der Theoretischen Chemie	Ü + P	1		2		
	Summe		4		7		