

**Importmodul:**

[CW-PTC.1] <i>Molecular Computational Chemistry: Theoretical Foundations</i>	<b>Molecular Computational Chemistry: Theoretische Grundlagen</b>	<b>Wahlpflichtmodul</b>	<b>5 CP (insg.) = 150 h</b>				<b>3 SWS</b>
			<b>Kontaktstudium</b> 3 SWS / 45 h		<b>Selbststudium</b> 105 h		
<b>Inhalte</b>							
<p>Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry: Behandlung von Ein- und Mehrelektronensystemen (Hilberträume, Operatoren, Atom- und Molekülorbitale, Mehrelektronenwellenfunktionen, Variationsrechnung); Grundlagen der variationellen Mean-Field-Behandlung (Hartree- und Hartree-Fock-Theorie); Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie; Behandlung molekularer Systeme: Born-Oppenheimer-Näherung; Potentialflächen; klassische Molekulardynamik auf Potentialflächen; Grundlagen der Quantendynamik (Wellenpakete) auf Potentialflächen.</p> <p><i>Es kann entweder das Modul „Molecular Computational Chemistry: Theoretische Grundlagen“ oder das Modul „Molecular Computational Chemistry: Struktur und Dynamik“ absolviert werden.</i></p>							
<b>Lernergebnisse / Kompetenzziele</b>							
<p>Die Veranstaltung führt in die computergestützte Behandlung molekularer Systeme ein. Dabei werden die grundlegenden Methoden der angewandten Theoretischen Chemie vermittelt, sowohl im Bereich der elektronischen Strukturberechnungen als auch im Bereich der Kerndynamik. Durch selbstständiges Erarbeiten von Übungsaufgaben und deren Diskussion in Übungsgruppen wird der Stoff vertieft. Qualifikationsziel ist es, dass die Studierenden den Übergang von den mathematisch begründeten Konzepten der Quantentheorie zu konkreten Anwendungen der Quantenchemie, Quantendynamik und Molekulardynamik nachvollziehen und die Grundlagen der gängigsten Anwendungsverfahren kennenlernen.</p>							
<b>Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls</b>							
Modul „Grundlagen der Theoretischen Chemie“ oder vergleichbare Module der Physik							
<b>Empfohlene Voraussetzungen</b>							
Keine							
<b>Organisatorisches</b>							
<p>Modul kann entweder im Bachelor- oder Masterstudiengang gewählt werden.</p> <p>Die Bearbeitung der Übungsaufgaben, sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen wird dringend empfohlen.</p>							
<b>Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)</b>		B.Sc. Chemie / FB14					
<b>Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge</b>		Wahlpflichtmodul: B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12; B.Sc. Biophysik, M.Sc. Biophysik, M.Sc. Physik / FB13; M.Sc. Chemie / FB14					
<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					
<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
	Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry	V	2		3		
	Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry	Ü	1		2		
	SUMME		3		5		