

[W.13] <i>Molecular Computational Chemistry: Structure and Dynamics</i>	Molecular Computational Chemistry: Struktur und Dynamik	Wahlpflichtmodul	10 CP (insg.) = 300 h		7 SWS				
			Kontaktstudium 7 SWS / 105 h	Selbststudium 195 h					
Inhalte									
<p><u>Vorlesung und Übung „Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry“:</u> Theoretische Grundlagen der 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><u>Praktikum „Molecular Computational Chemistry“:</u> Praktische Übungen zur molekularen Computational Chemistry: Einführung in numerische Programmpakete zur elektronischen Strukturberechnung (Hartree-Fock-Verfahren, Dichtefunktionaltheorie) sowie zur klassischen Molekulardynamik (MD) und Quantendynamik (Wellenpaketpropagation); Umgang mit Software-Dokumentation; Anwendungen auf kleine molekulare Systeme und Biomoleküle: Optimierung von Molekülstrukturen, Bestimmung von Normalmoden, Vorhersage von Infrarotspektren, Reaktionspfade, Konformationsdynamik von Biomolekülen, quantenmechanische Tunneldynamik.</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>									
Lernergebnisse / Kompetenzziele									
<p><u>Vorlesung und Übung:</u> Die Veranstaltung führt in die computergestützte Behandlung molekularer Systeme ein. Die Studierenden lernen moderne Konzepte des wissenschaftlichen Rechnens am Beispiel der Computational Chemistry kennen. 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 An-wendungsverfahren kennenlernen.</p> <p><u>Praktikum:</u> Qualifikationsziel des Praktikums ist es, die relevanten rechnergestützten Verfahren eigenständig auf chemisch relevante Probleme anzuwenden und die Resultate in aussagekräftigen Protokollen festzuhalten. Darüber hinaus stellen die Studierenden im Rahmen eines Kurzvortrags die Ergebnisse eines eigenen Projekts in kompakter, informativer und visuell ansprechender Form vor.</p>									
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls									
Modul „Grundlagen der Theoretischen Chemie“									
Empfohlene Voraussetzungen									
keine									
Organisatorisches									
Modul kann entweder im Bachelor- oder Masterstudiengang gewählt werden. Die Bearbeitung der Übungsaufgaben, sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen wird dringend empfohlen.									
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)			B.Sc. Chemie / FB14						
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge			Wahlpflichtmodul: B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12; B.Sc. Biophysik, M.Sc. Biophysik, M.Sc. Physik / FB13; M.Sc. Chemie / FB14						
Häufigkeit des Angebots			Einmal im Jahr (im Sommersemester)						
Dauer des Moduls			1 Semester						
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter			Prof. I. Burghardt						
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen									
Teilnahmenachweise			Praktikum: Bearbeitung und Protokolle der Praktikumsaufgaben						
Leistungsnachweise / Studienleistung			Praktikum: Erarbeitung eines eigenen Projektes aus dem Gebiet des Praktikums und dessen Präsentation (30 Min.)						
Lehr- / Lernformen			Vorlesung, Übung, Praktikum						
Unterrichts- / Prüfungssprache			Deutsch						
Modulprüfung			Form / Dauer / ggf. Inhalt						
Modulabschlussprüfung bestehend aus:			Schriftliche Abschlussprüfung (Klausur, 180 Min.)						
kumulative Modulprüfung bestehend aus:									
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:									
		LV-Form	SWS	Semester CP					
				1	2	3	4	5	6
Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry		V	2			3			
Theoretische Grundlagen der molekularen Computational Chemistry		Ü	1			2			
Molecular Computational Chemistry		P	4			5			
SUMME			7			10			