

MNF-chem1004D	Theoretische Chemie / Computerchemie		
<b>Semesterlage / Dauer</b>	Beginn im Sommer- oder Wintersemester Dauer: 2 Semester		
<b>Modulverantwortliche(r)</b>	Prof. Dr. Bernd Hartke , Telefon 0431-880-2753, Email: <a href="mailto:hartke@pctc.uni-kiel.de">hartke@pctc.uni-kiel.de</a> Prof. Dr. Dassia Egorova, Telefon 0431-880-7741, Email: <a href="mailto:egorova@phc.uni-kiel.de">egorova@phc.uni-kiel.de</a>		
<b>Studiengang / -gänge</b>	M.Sc. Chemie: 1. – 3. Fachsemester		Wahlpflicht
	M.Sc. Wirtschaftschemie: 1. – 2. Fachsemester		Wahlpflicht
	M.Sc. Physik: 1. – 3. Fachsemester		Wahlpflicht
	M.Sc. Biochemie und Molekularbiologie : 1. – 3. Fachsemester		Wahlpflicht
<b>Beratung zum Modul</b>	Prof. Dr. Bernd Hartke , Telefon 0431-880-2753, Email: <a href="mailto:hartke@pctc.uni-kiel.de">hartke@pctc.uni-kiel.de</a> Prof. Dr. Dassia Egorova, Telefon 0431-880-7741, Email: <a href="mailto:egorova@phc.uni-kiel.de">egorova@phc.uni-kiel.de</a>		
<b>Lehrveranstaltungen</b>	<b>Bezeichnung der Lehrveranstaltung / Lehrende(r)</b>	<b>SWS</b>	<b>Status</b>
	Vorlesung Theoretische Chemie, Prof. Hartke, Dauer 1 Semester (Sommer)	2 SWS	Pflicht
	Quantenmechanik und Quantendynamik in der Theoretischen Chemie, Prof. Egorova, Vorlesung + Übung, Dauer 2 Semester	2 SWS	Pflicht
	Vorlesung Molecular Modelling, Prof. Herges, Dauer 1 Semester (Winter)	2 SWS	Pflicht
	Praktikum Prof. Hartke	3 SWS	Pflicht
	Praktikum Quantendynamik mit MCTDH, Prof. Egorova	3 SWS	Pflicht
	Praktikum Prof. Herges	2 SWS	Pflicht
<b>Zahl der Plätze</b>	15		
<b>Lehrsprache</b>	Deutsch und/oder Englisch		
<b>Arbeitsaufwand</b>	Präsenzstudium: 196 h Selbststudium: 254 h, Vorlesung nachbereiten + Seminarvortragsvorbereitung (Hartke) + Hausaufgaben Übungen (Egorova) + Praktikumsbericht (Egorova)		
<b>Leistungspunkte</b>	15		
<b>Voraussetzungen</b>	B.Sc. Chemie oder B.Sc. Wirtschaftschemie oder B.Sc. in Biochemie und Molekularbiologie oder B.Sc. in Physik		
<b>Erwünschte Vorkenntnisse</b>	Grundlagen der klassischen und Quantenmechanik MNF-chem0304 und MNF-chem0503 oder gleichwertige Module		
<b>Lernziele</b>	Aufbauend auf den in MNF-chem0304 und MNF-chem0503 gelegten Grundlagen haben die Studierenden ihre Kenntnisse erweitert und die wesentlichen mathematischen Methoden der Molekülmechanik, Quantenchemie und Quantendynamik kennen gelernt. Sie verfügen über ein solides Verständnis der theoretischen Grundlagen der Kraftfeld-, ab-initio- und Quantendynamikmethoden. Sie besitzen die Kompetenz zur systematischen Herangehensweise bei der Anwendung dieser Methoden auf konkrete Probleme, vor allem bei der Auswahl der Methoden und der kritischen Interpretation der Ergebnisse. Sie sind in der Lage, in der Masterarbeit sowie im Promotionsstudium die vorhandenen modernen Rechenmethoden selbstständig anzuwenden.		
<b>Lehrinhalte</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• klassische Methoden der Molekülmechanik und Moleküldynamik (Kraftfelder, MD und Thermodynamik, Monte Carlo);</li> <li>• Quantenmechanik: Formalismus und exakt lösbare Probleme; Näherungsverfahren (Störungstheorie, Variationsprinzip); Mehrelektronensysteme; einfachste zweiatomige Systeme; Grundlagen der Quantenchemie (Hartree-Fock);</li> </ul>		

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantenchemie: SCF, DFT, Elektronenkorrelation (CI, CC, MP2, MCSCF/CASSCF);</li> <li>• Quantendynamik: Born-Oppenheimer, Potentialflächen, Wellenpakete, Dichtematrix-Methoden, MCTDH;</li> <li>• Praktikum: selbständiger Umgang mit Kraftfeldsimulationen, Entwicklung eigener Programme zur MD-Simulation und zur Berechnung stationärer Zustände, eigene Rechnungen mit fertigen Programmen zur Wellenpaketdynamik, MCTDH,</li> <li>• Vorträge der Studenten zu ausgewählten aktuellen und erweiternden Themen.</li> </ul>
<b>Prüfung(en)</b>	Prüfungsleistungen: <ul style="list-style-type: none"> <li>• schriftliche oder mündliche Prüfung zur Vorlesung (Egorova),</li> <li>• selbständige Bearbeitung der Aufgaben des Praktikums (Hartke, Herges),</li> <li>• schriftlicher Bericht zum Praktikum (Egorova),</li> <li>• Seminarvortrag (Hartke).</li> </ul>
	Prüfungstermin: Zu Ende der Vorlesungszeit des Semesters, 1. Wiederholungstermin: Vor Beginn der Vorlesungszeit des folgenden Semesters, 2. Wiederholungstermin: Nach Ende der Vorlesungszeit des folgenden Semesters.
	Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden).
	Benotung, Relevanz für M.Sc. Endnote: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Modulnote ergibt sich aus <math>1/3</math> Prüfungsnote + <math>1/3</math> Praktikumsnote + <math>1/3</math> Vortragsnote,</li> <li>• Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die M.Sc. Endnote ein.</li> </ul>
<b>Literaturangaben</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Szabo/Ostlund, Modern Quantum Chemistry, McGraw-Hill;</li> <li>• Simons/Nichols, Quantum Mechanics in Chemistry, Oxford;</li> <li>• F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley ;</li> <li>• D. J. Tannor, An Introduction to Quantum Mechanics – a Time-dependent Perspective, University Science Books;</li> <li>• A. R. Leach, Molecular Modelling, Prentice Hall;</li> <li>• P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics;</li> <li>• I.N. Levine, Quantum Chemistry;</li> <li>• A.S. Davydov, Quantum Mechanics (Quantenmechanik);</li> <li>• G.C. Schatz, M.A. Rantner, Quantum Mechanics in Chemistry;</li> <li>• H.-D. Meyer, F. Gatti, and G. A. Worth (ed.), Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH Theory and Applications;</li> <li>• Review-Artikel und Einzelpublikationen nach Angabe der Dozenten;</li> <li>• Vorlesungs- und Praktikumskripte der Dozenten.</li> </ul>
<b>weitere Angaben</b>	Das Praktikum setzt sich aus 3 Teilen zusammen, die den beteiligten Dozenten zugeordnet sind. Es kann im Sommer- oder Wintersemester oder als Ferien-Blockkurs stattfinden. Der Praktikumsteil Hartke ist vom Vorlesungsteil Hartke weitestgehend unabhängig, daher können diese beiden Teile in beliebiger Reihenfolge gehört werden. In den anderen Fällen sollte der jeweilige Vorlesungsteil zeitlich vor dem jeweiligen Praktikumsteil liegen. Die einzelnen Praktikumsteile können im zeitlichen Zusammenhang oder aber auch isoliert voneinander liegen.