

<b>Modultitel</b>		<b>Modulcode</b>	
Theoretische Chemie / Computerchemie		chem1004D-01a	
<b>Modulverantwortliche(r)</b>			
Prof. Dr. Bernd Hartke			
<b>Veranstalter</b>			
Sektion Chemie			
<b>Fakultät</b>			
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät			
<b>Prüfungsamt</b>			
Prüfungsamt Chemie			
<b>Leistungspunkte</b>	15		
<b>Bewertung</b>	Benotet		
<b>Dauer</b>	Zwei Semester		
<b>Angebotshäufigkeit</b>	Findet in jedem Semester statt		
<b>Arbeitsaufwand pro Leistungspunkt</b>	30 Stunden		
<b>Arbeitsaufwand insgesamt</b>	450 Stunden		
<b>Präsenzstudium</b>	196 Stunden		
<b>Selbststudium</b>	254 Stunden		
<b>Lehrsprache</b>	Deutsch und/oder Englisch		
<b>Empfohlene Voraussetzung</b>			
Mathematik für Studierende der Chemie (chem0102, chem0202) und Grundlagen der klassischen und Quantenmechanik (chem0304 und chem0407) oder gleichwertige Module			
<b>Modulveranstaltung(en)</b>			
<b>Veranstaltungsart</b>	<b>Lehrveranstaltungstitel</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>SWS</b>
Vorlesung	Theoretische Chemie (Prof. Hartke, Wintersemester)	Pflicht	2
Vorlesung	Einführung in numerische Mathematik und Computersimulation (Prof. Hartke, Sommersemester)	Pflicht	2
Vorlesung	Molecular Modelling (Prof. Herges, (Wintersemester)	Pflicht	2

Praktische Übung	Praktikum Prof. Hartke	Pflicht	3	
Praktische Übung	Praktikum Prof. Hartke	Pflicht	3	
Praktische Übung	Praktikum Prof. Herges	Pflicht	2	
<b>Prüfung(en)</b>				
<b>Prüfungstitel</b>	<b>Prüfungsform</b>	<b>Bewertung</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>Gewicht</b>
Praktikumsaufgaben: Theoretische Chemie / Computerchemie	Praktikumsaufgaben	Benotet	Pflicht	50
Vortrag: Theoretische Chemie / Computerchemie	Vortrag	Benotet	Pflicht	25
Vortrag: Theoretische Chemie / Computerchemie	Vortrag	Benotet	Pflicht	25
<b>Weitere Bemerkungen zu der/den Prüfung(en)</b>				
<p>Prüfungsleistungen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• selbständige Durchführung von Rechnungen und selbstständiges Programmieren (zusammen 50% der Modulnote),</li> <li>• 2 eigene Vorträge (je 25% der Modulnote).</li> </ul> <p>Prüfungstermin: Zum Ende der Vorlesungszeit des Semesters,  1. Wiederholungstermin: Vor Beginn der Vorlesungszeit des folgenden Semesters,  2. Wiederholungstermin: Nach Ende der Vorlesungszeit des folgenden Semesters.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden),</li> </ul> <p>Benotung, Relevanz für M.Sc. Endnote:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die M.Sc. Endnote ein.</li> </ul>				
<b>Lehrinhalte</b>				
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlegende numerische Methoden für Differentiation und Integration, Differentialgleichungen, Nullstellensuche, lineare Gleichungssysteme, Interpolation und Ausgleichsrechnung, Matrixeigenwerte/-vektoren</li> <li>• Methoden der Molekülmechanik und Moleküldynamik (Kraftfelder, MD und Thermodynamik, Monte Carlo),</li> <li>• Quantenchemie: SCF, DFT, Elektronenkorrelation (CI, CC, MP2, MCSCF/CASSCF), QM/MM- und embedding-Methoden</li> <li>• Quantendynamik: Born-Oppenheimer, Potentialflächen, Wellenpakete,</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 und zur Quantenchemie,</li> <li>• Vorträge der Studenten zu ausgewählten aktuellen und erweiternden Themen.</li> </ul>				
<b>Lernziele</b>				
<p>Ergänzend zur analytischen Mathematik haben die Studierenden erste Einblicke in numerische Mathematik, Programmierung und wissenschaftliches Rechnen erhalten. Aufbauend auf den in MNF-chem0304 und MNF-chem0407 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</p>				

Masterarbeit sowie im Promotionsstudium die vorhandenen modernen Rechenmethoden selbstständig anzuwenden.

### Literatur

- Press/Flannery/Teukolsky/Vetterling: Numerical Recipes, Cambridge,
- Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1,2, Springer
- Szabo/Ostlund, Modern Quantum Chemistry, McGraw-Hill,
- Simons/Nichols, Quantum Mechanics in Chemistry, Oxford,
- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley,
- D. J. Tannor, An Introduction to Quantum Mechanics – a Time-dependent Perspective, University Science Books,
- A. R. Leach, Molecular Modelling, Prentice Hall,
- P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics,
- I.N. Levine, Quantum Chemistry,
- G.C. Schatz, M.A. Rantner, Quantum Mechanics in Chemistry,
- Parr/Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules,
- Reviewartikel und Einzelpublikationen nach Angabe der Dozenten,
- Vorlesungs- und Praktikumsskripte der Dozenten.

### Weitere Angaben

Das Praktikum setzt sich aus 2-3 Teilen zusammen, die den beteiligten Dozenten zugeordnet sind. Sie finden im Sommer- oder Wintersemester oder (bevorzugt) als Ferien-Blockkurs statt. Für die konkrete zeitliche Abfolge der einzelnen Teile wird eine Abstimmung mit den Dozenten und dem Modulverantwortlichen empfohlen.

Verwendung	Pflicht/Wahl	Fachsemester
Master, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2007)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2016)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Chemie, (Version 2007)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Chemie, (Version 2016)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2008)	Wahl	1 - 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2014)	Wahl	1 - 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2017)	Wahl	1 - 2