

<b>Moderne Methoden der Theoretischen Chemie</b>		<b>7 CP</b>				
<b>Wahlpflichtmodul im Pflichtbereich Physikalische und Theoretische Chemie</b>						
<b>Inhalte:</b> Vertiefung Hartree-Fock (HF)-Theorie: 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: nichtadiabatische Effekte, Implikationen für die Photochemie und Ultrakurzzeitspektroskopie						
<b>Qualifikationsziele und Kompetenzen:</b> Die Studierenden lernen die aktuellen Methoden der Theoretischen Chemie kennen, sowohl im Bereich der elektronischen Strukturberechnung (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>Angebotszyklus:</b>	einmal pro Jahr					
<b>Dauer des Moduls:</b>	1 Semester					
<b>Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:</b>	keine					
<b>Organisatorisches:</b>	empfohlene Vorkenntnisse: gute mathematische und theoretische Kenntnisse Zur Vertiefung und Anwendung des Vorlesungsstoffs findet eine Übung statt. Darin werden vorgegebene Übungsaufgaben besprochen sowie quantenchemische und MD-Rechnungen am Computer durchgeführt. Es wird erwartet, dass sich die Studierenden daran aktiv beteiligen.					
<b>Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):</b>	keine					
<b>Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:</b>	Klausur					
<b>Voraussetzung für die Vergabe der CP:</b>	bestandene Modulabschlussprüfung					
<b>Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:</b>	Wahlpflichtmodul für Studierende der Masterstudiengänge Biophysik und Physik					
<b>Lehrveranstaltungen</b>	<b>Typ</b>	<b>SWS</b>	<b>Semester / CP</b>			
			<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
Theoretische Chemie II	V + Ü	3 + 1	7			