
Modulbezeichnung: **Theorie für Fortgeschrittene (CBV-6)** **5 ECTS**
 (Theory for Advanced Students)

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling

Lehrende: Christian Neiß, Bernd Meyer, Dirk Zahn, Nico van Eikema Hommes, Andreas Görling

Startsemester: WS 2021/2022 Dauer: 2 Semester Turnus: jährlich (WS)

Präsenzzeit: 90 Std. Eigenstudium: 60 Std. Sprache: Deutsch

Lehrveranstaltungen:

Bitte Anwesenheitspflicht im Praktikum beachten!

Theorie periodischer Systeme (WS 2021/2022, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer)

Theorie periodischer Systeme - Übungen (WS 2021/2022, optional, Übung, Bernd Meyer)

Moderne Softwareapplikationen (WS 2021/2022, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes et al.)

Computational Chemistry (SS 2022, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes et al.)

Inhalt:

TPS:

Bravaisgitter, Kristallsysteme, Raumgruppen, reziprokes Gitter, Fourier-Transformationen, homogenes Elektronengas, Bloch-Theorem, LCAO-Methoden für periodische Systeme, Tight-Binding-Methode, Anwendungsbeispiele (einfache Metalle, pi-Elektronen-systeme wie Benzol, Polyacetylen oder Graphen).

MSA:

Einführung in Modeling-Techniken, Strukturdefinition, -optimierung und -charakterisierung, Kraftfelder, Moleküldynamik, qualitative MO-Theorie. Einführung in die praktische Durchführung von Hartree-Fock-Rechnungen und die Anwendung von semiempirischen Methoden (Parametrisierung, Interpretation, Übergangszustände, Lösungsmittelmethoden).

CC:

Einführung in quantenchemische Rechenmethoden, Basissätze, Elektronenkorrelation (Dichtefunktionaltheorie, Konfigurationswechselwirkung, Störungstheorie), Einführung Unix, Eingabeformate quantenchemischer Programme, Durchführung von Rechnungen, Populationsanalyse, Interpretation.

Lernziele und Kompetenzen:

Die Studierenden

- können die elektronischen Eigenschaften periodischer Systeme verstehen und insbesondere elektronische Bandstrukturen interpretieren
 - können quantenmechanische ein-, zwei- und dreidimensionale periodische Systeme beschreiben und miteinander vergleichen
 - sind in der Lage Molecular Modeling (Kraftfeld und Semiempirik) Programme selbstständig anzuwenden
 - sind fähig Dichtefunktional- und ab-initio Berechnungen für molekulare Systeme selbstständig durchzuführen.
-

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

[1] **Chemie (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2009 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | alte Prüfungsordnungen | 5.-6. Semester | Theorie für Fortgeschrittene)

[2] **Chemie (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2010 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | alte Prüfungsordnungen | 5.-6. Semester | Theorie für Fortgeschrittene)

[3] **Chemie (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2011 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | alte Prüfungsordnungen | Gesamtkonto | Theorie für Fortgeschrittene)

[4] Chemie (Bachelor of Science): 5. Semester

(Po-Vers. 2013 | NatFak | Chemie (Bachelor of Science) | Vertiefungsphase | Theorie für Fortgeschrittene)

Studien-/Prüfungsleistungen:

Modulabschlussprüfung zu Theorie für Fortgeschrittene (Prüfungsnummer: 21511)

(englische Bezeichnung: Final Module Examination on Advanced Theoretical Chemistry)

Prüfungsleistung, mehrteilige Prüfung

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

W90(PL)* + EX(PL) + LAB(PL)

*W90 (PL)= Schriftliche Prüfung (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung!

Berechnung der Modulnote:

50% Note der schriftlichen Prüfung (TPS) + je 25% Protokollnoten (MSA, CC)

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablesung: WS 2021/2022, 1. Wdh.: SS 2022

1. Prüfer: Bernd Meyer

Organisatorisches:

Turnus jährlich: TPS und MSA im Wintersemester, CC im Sommersemester

Bitte beachten: die Vorlesung im SoSe findet voraussichtlich **online** statt. Bitte melden Sie sich auf

StudOn an, um weitere Informationen zu erhalten: <https://www.studon.fau.de/crs2484725.html>

Bemerkungen:

Ein umfassendes Skript für die Vor- und Nachbereitung des Stoffes sowie die Übungsblätter werden zur Verfügung gestellt.