Modulbezeichnung:	**Theorie - Profilbildung: Nanoscience (MSV-11N)** (Theory - specification: nanoscience)	**5 ECTS**
Modulverantwortliche/r:	Andreas Görling	
Lehrende:	Bernd Meyer, Christian Neiß	

Startsemester: WS 2019/2020	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 90 Std.	Eigenstudium: 60 Std.	Sprache: Deutsch

Lehrveranstaltungen:

Anwesenheitspflicht im Praktikum!

Software-Applikationen in NanoScience (WS 2019/2020, Vorlesung mit Übung, Anwesenheitspflicht, Christian Neiß et al.)

Theorie periodischer Systeme (WS 2019/2020, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer et al.)

Computational Chemistry / Computational Nanoscience (SS 2020, Praktikum, Christian Neiß et al.)

Es wird empfohlen, folgende Module zu absolvieren, bevor dieses Modul belegt wird:

Biochemie und Molekularbiologie, Einführung in die Nanowissenschaften

Inhalt:

Theorie periodischer Systeme: Bravaisgitter, Kristallsysteme, Raumgruppen, reziprokes Gitter, Fourier-Transformationen, homogenes Elektronengas, Bloch-Theorem, LCAO-Methoden für periodische Systeme, Tight-Binding-Methode, Anwendungsbeispiele (einfache Metalle, -Elektronensysteme wie Benzol, Polyacethylen oder Graphen).

Softwareapplikationen in Nanoscience: Einführung in quantenchemische Rechenmethoden und ihren Einsatz in der Chemie und den Materialwissenschaften (Basissätze, Dichtefunktionale, Eingabeformate, Durchführung von Rechnungen, Interpretation). Computational Nanoscience: Einführung in elektronische Strukturrechnungen für periodische Systeme insbesondere Oberflächen (Geometrieoptimierung, Bandstrukturrechnungen, Analyse der Elektronendichte, Berechnung und Interpretation von „Scanning-Tunneling-Microscopy"-Daten.

Lernziele und Kompetenzen:

Die Studierenden

- verfügen über grundlegende Fachkompetenzen in der Theorie periodischer Systeme
- können quantenmechanische ein-, zwei- und dreidimensionale periodische Systeme beschreiben und miteinander vergleichen
- sind fähig Dichtefunktional- und ab initio Berechnungen für molekulare wie periodische Systeme selbstständig durchzuführen
- können materialwissenschaftliche Fragestellungen mit quanten-mechanisch-basierten Methoden der Theorie untersuchen.

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

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

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

(Po-Vers. 2013 | NatFak | Molecular Science (Bachelor of Science) | Vertiefungsrichtung Nano Science / Life Science | Vertiefungsrichtung Nano Science | Computational Nanoscience)

Studien-/Prüfungsleistungen:

Computational Nanoscience (Prüfungsnummer: 30612)
(englische Bezeichnung: Computational Nanoscience)

Prüfungsleistung, mehrteilige Prüfung

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

Theorie periodischer Systeme: W90 (PL)= Schriftliche Prüfung (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung der FAU!

Softwareapplikationen in Nanoscience: EX (PL)

Praktikum Computational Nanoscience: LAB (PL)
Berechnung der Modulnote: W90(PL) 50% + EX(PL) 25% + LAB(PL) 25%
Prüfungssprache: Deutsch

Erstablegung: WS 2019/2020, 1. Wdh.: SS 2020
1. Prüfer: Bernd Meyer

Organisatorisches:

Einpassung in Musterstudienplan:
Theorie periodischer Systeme im 5. Fachsemester, Softwareapplikationen in Nanoscience im 5. Fachsemester, Praktikum Computational Nanoscience im 6. Fachsemester

Bemerkungen:

Verwendbarkeit des Moduls: B.Sc. Molecular Science (Vertiefungsrichtung Nanoscience)