

Modulbezeichnung: Theorie - Profilbildung: Nanoscience (MSV-11N) 5 ECTS
(Theory - specification: nanoscience)

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling
Lehrende: Christian Neiß, Bernd Meyer

Startsemester: WS 2018/2019 Dauer: 2 Semester Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 90 Std. Eigenstudium: 60 Std. Sprache: Deutsch

Lehrveranstaltungen:

Anwesenheitspflicht im Praktikum!
Software-Applikationen in NanoScience (WS 2018/2019, Vorlesung mit Übung, Anwesenheitspflicht, Christian Neiß et al.)
Theorie periodischer Systeme (WS 2018/2019, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer et al.)
Computational Chemistry / Computational Nanoscience (SS 2019, Praktikum, Christian Neiß et al.)

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, Polyacetylen 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.

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)

Softwareapplikationen in Nanoscience: EX (PL)

Praktikum Computational Nanoscience: LAB (PL)

Berechnung der Modulnote: W90(PL) 50% + EX(PL) 25% + LAB(PL) 25%

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablesung: WS 2018/2019, 1. Wdh.: SS 2019

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)