

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

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling

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

Startsemester: WS 2018/2019

Dauer: 2 Semester

Turnus: jährlich (WS)

Präsenzzeit: 90 Std.

Eigenstudium: 60 Std.

Sprache: Deutsch

### Lehrveranstaltungen:

Bitte Anwesenheitspflicht im Praktikum beachten!

Theorie periodischer Systeme (WS 2018/2019, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer et al.)

Moderne Softwareapplikationen (WS 2018/2019, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes)

Computational Chemistry (SS 2019, 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

- verfügen über grundlegende Fachkompetenzen in der Theorie periodischer Systeme
- 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. 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)

Berechnung der Modulnote:

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

Prüfungssprache: Deutsch

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

1. Prüfer: Bernd Meyer

---

**Organisatorisches:**

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

**Bemerkungen:**

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