

---

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

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling

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

---

Startsemester: WS 2017/2018      Dauer: 2 semester      Turnus: jährlich (WS)

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

---

**Lehrveranstaltungen:**

Bitte Anwesenheitspflicht im Praktikum beachten!

Theorie periodischer Systeme (WS 2017/2018, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer et al.)

Moderne Softwareapplikationen (WS 2017/2018, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes)

Computational Chemistry (SS 2018, 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.
- 

**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 Prüfung (TPS) + je 25% Protokollnoten (MSA, CC)

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2018, 1. Wdh.: keine Angabe

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.