

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

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

Startsemester: WS 2022/2023      Dauer: 2 Semester      Turnus: jährlich (WS)  
Präsenzzeit: 90 Std.      Eigenstudium: 60 Std.      Sprache: Deutsch

**Lehrveranstaltungen:**

Anwesenheitspflicht im Praktikum!  
Software-Applikationen in NanoScience (WS 2022/2023, Vorlesung mit Übung, Anwesenheitspflicht, Christian Neiß et al.)  
Theorie periodischer Systeme - VL (WS 2022/2023, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer)  
Theorie periodischer Systeme -SEM (WS 2022/2023, optional, Seminar, 2 SWS, Bernd Meyer)  
Computational Nanoscience (SS 2023, Vorlesung mit Übung, 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, 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)= Klausur (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

Erstablesung: WS 2022/2023, 1. Wdh.: SS 2023

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)