

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

Modulverantwortliche/r: Andreas Göring

Lehrende: Bernd Meyer, Christian Neiß

Startsemester: WS 2021/2022

Dauer: 2 Semester

Turnus: jährlich (WS)

Präsenzzeit: 90 Std.

Eigenstudium: 60 Std.

Sprache: Deutsch

### Lehrveranstaltungen:

Anwesenheitspflicht im Praktikum!

Software-Applikationen in NanoScience (WS 2021/2022, Vorlesung mit Übung, Anwesenheitspflicht, Christian Neiß et al.)

Theorie periodischer Systeme (WS 2021/2022, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer)

Theorie periodischer Systeme - Übungen (WS 2021/2022, optional, Übung, Bernd Meyer)

Computational Nanoscience (SS 2022, 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.

### 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)= 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 2021/2022, 1. Wdh.: SS 2022  
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)