

[W.10] Molecular Computational Chemistry: Main Group Systems	Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppensysteme	Wahlpflicht- modul	7 CP (insg.) = 210 h						6 SWS
			Kontaktstudium 6 SWS / 90 h			Selbststudium 120 h			
<b>Inhalte</b>									
<p><u>Vorlesung</u> „Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie“: Theoretische Grundlagen (Hartree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie, Korrelationsverfahren, Basissätze, Optimierungsverfahren), Arbeitsweise der Computerprogramme, molekulare Bindungssituationen und Spinzustände.</p> <p><u>Seminar</u> „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“: Architekturprinzipien und Nutzung moderner Großrechner, Dateisysteme und Netzwerkstrukturen, Linux Shell-Befehle und einfache Shell-Programmierung.</p> <p><u>PR1</u>: Praktikum und Seminar „Computational Main Group Chemistry“: Strukturen und Eigenschaften molekularer Verbindungen, Interpretation von Molekülorbitalen, Berechnung von Reaktionspfaden einfacher Hauptgruppenverbindungen.</p> <p><i>Es kann entweder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppensysteme oder das Modul Molecular Computational Chemistry: Hauptgruppen- und Übergangsmetallsysteme absolviert werden.</i></p>									
<b>Lernergebnisse / Kompetenzziele</b>									
<p>In diesem Modul erlernen die Studierenden die Bearbeitung aktueller chemischer Fragestellungen mithilfe quantenchemischer Methoden. Die Vorlesung vermittelt anwendungsorientierte theoretische Grundlagen der Methoden, die in den Praktika zum Einsatz kommen. Die Studierenden werden an die Nutzung von Hochleistungsrechnern heran-geführt, wie sie im lokalen und überregionalen Umfeld verfügbar sind, und erlernen das selbständige Arbeiten mit dem Unix-Betriebssystem und mit quantenchemischen Programmpaketten. Anhand einfach gewählter Beispiele aus der Hauptgruppen-chemie wird die Durchführung der Berechnungen, sowie die Auswertung und professionelle Dokumentation der Ergebnisse erlernt. Einsatzmöglichkeiten, aber auch Grenzen der jeweiligen Methoden werden erörtert, was eine kritische Bewertung der Aussagekraft von quantenchemischen Ergebnissen ermöglicht.</p>									
<b>Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls</b>									
Praktikum: Seminar „Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern“									
<b>Empfohlene Voraussetzungen</b>									
Vorlesung „Hauptgruppenchemie“									
<b>Organisatorisches</b>									
<b>Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)</b>		B.Sc. Chemie / FB14							
<b>Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge</b>		Wahlpflichtmodul: B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik / FB12							
<b>Häufigkeit des Angebots</b>		Einmal im Jahr (Block im Wintersemester in der vorlesungsfreien Zeit)							
<b>Dauer des Moduls</b>		1 Semester							
<b>Modulbeauftragte / Modulbeauftragter</b>		Prof. M. Holthausen / Dr. M. Diefenbach							
<b>Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen</b>									
<b>Teilnahmenachweise</b>		Seminare: Regelmäßige und aktive Teilnahme							
<b>Leistungsnachweise / Studienleistung</b>		PR1: Protokoll							
<b>Lehr- / Lernformen</b>		Vorlesung, Seminar, Praktikum							
<b>Unterrichts- / Prüfungssprache</b>		Deutsch							
<b>Modulprüfung</b>		<b>Form / Dauer / ggf. Inhalt</b>							
<b>Modulabschlussprüfung bestehend aus:</b>		Mündliche Abschlussprüfung (30 Min.)							
<b>kumulative Modulprüfung bestehend aus:</b>									
<b>Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:</b>									
		IV- Form	SWS	Semester CP					
				1	2	3	4	5	6
	Moderne quantenchemische Methoden in der Anorganischen Chemie	V	1,5					3	
	Einführung in Unix und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern	S	1					1	
	PR1: Computational Main Group Chemistry	P + S	3,5					3	
	SUMME		6					7	