

**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 2020/2021      Dauer: 2 Semester      Turnus: jährlich (WS)

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

### Lehrveranstaltungen:

Bitte Anwesenheitspflicht im Praktikum beachten!

Theorie periodischer Systeme (WS 2020/2021, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer)

Moderne Softwareapplikationen (WS 2020/2021, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes et al.)

Computational Chemistry (SS 2021, 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

- können die elektronischen Eigenschaften periodischer Systeme verstehen und insbesondere elektronische Bandstrukturen interpretieren
- 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)

\*W90 (PL)= Schriftliche Prüfung (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung!

Berechnung der Modulnote:

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

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablesung: WS 2020/2021, 1. Wdh.: SS 2021

1. Prüfer: Bernd Meyer

**Organisatorisches:**

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

Bitte beachten: die Vorlesung im SoSe findet voraussichtlich **online** statt. Bitte melden Sie sich auf **StudOn** an, um weitere Informationen zu erhalten: <https://www.studon.fau.de/crs2484725.html>

**Bemerkungen:**

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