Modulbeschreibung Computerchemie

Studiengangstitel: M.Sc. Chemie

1)	1) Angaben zum Modul	
1a)	Modulkennziffer *Modulkennziffer des Fachbereichs - Dieses wird dem Modultitel voran gestellt und ist eine Kombination aus Buchstaben und/oder Zahlen (dabei handelt es sich nicht um die VAK).* module code *The Faculty's reference code is a combination of letters and/or numbers. The module code precedes the module title (not the EC).*	WTHC
1b)	Modultitel (deutscher Titel) module title (German title) *German module title can be omitted in an English study program.*	Computerchemie
1c)	Englischer Modultitel Angabe wird für alle Studiengänge benötigt module title in English	Computational Chemistry
1d)	Modultyp (Pflichtmodul, Wahlpflichtmodul, Wahlmodul) type of module (compulsory module, compulsory elective module, elective module)	Wahlpflichtmodul
1e)	Modulnutzung *In welchen Studiengängen wird das Modul eingesetzt? Bitte vollständig, d.h. alle Studiengänge nennen inkl. Angabe Bachelor, Master, Weiterbildung.* programs using the module *In which study programs is the module offered? Please give the full title of all programs, including details whether Bachelor, Master or Continuing Education.*	Masterstudiengang Chemie (M.Sc.)
1f)	Anbietende Organisationseinheit *Angabe ist nur erforderlich, wenn das Modul aus einer anderen Organisationseinheit/Lehreinheit entnommen wird.* Organizational unit offering the module *Only to be completed if the module is taken from another organizational unit/ teaching unit.*	
1g)	Empfohlene inhaltliche Voraussetzungen content-related prior knowledge or skills	Gute Kenntnisse der Quantenmechanik und der MO-Theorie, wie sie in den Vorlesungen Quantenmechanik (ThC1) und Theorie der chemischen Bindung (ThC2) vermittelt werden, werden empfohlen.

		Knowledge of quantum mechanics and MO theory, as tought in the modules quantum mechanics (ThC1) and theory oft he chemical bond (ThC2), is recommended.
1h)	Lerninhalte *Nennung fachlicher, methodischer, fachpraktischer und ggfs. fachübergreifender Inhalte, die im Modul vermittelt werden.* Learning contents *Specify the subject-specific, methodological, subject-related practice and, where applicable, interdisciplinary contents taught in the module.*	In dem Modul sollen folgende Themen abgedeckt werden: **Einführung in die Computerchemie** (Born-Oppenheimer-Näherung, Schrödinger-Gleichung, Potenzialflächen, Charakterisierung von stationären Punkten) **Basissätze** **Das Hartree-Fock-Verfahren** (Slater-Condon-Regeln, Self-Consistent-Field Verfahren, Roothaan-Hall-Gleichungen, Elektronenkorrelation) **Geometrieoptimierung** (Theoretische und praktische Aspekte) **Post-Hartree-Fock-Methoden** (Configuration Interaction, Coupled Cluster) **Dichtefunktionaltheorie** **Einführung in die dynamische Beschreibung chemischer Prozesse** ((*ab initio*) Molekulardynamik) **Praktische Durchführung quantenchemischer Rechnungen** **Schreiben eines wissenschaftlichen Manuskripts** *In this module, the following topics are covered:* ***Introduction to computational chemistry*** *(Born-Oppenheimer approximation, Schrödinger equation, potential energy surfaces, characterization of stationary points)* ***Basis sets*** ***The Hartree-Fock procedure*** *(Slater-Condon rules, the self-consistent-field procedure, the Roothaan-Hall equations, electron correlation)* ***Geometry optimization*** *(Theoretical and practical aspects)* ***Post-Hartree-Fock methods*** *(Configuration Interaction, Couple Cluster)* ***Density functional theory*** ***Introduction ot the dynamical description of chemical processes*** *((ab initio) Molecular Dynamics)* ***Running quantum chemical calculations*** ***Writing a scientific manuscript***
1i)	Lernergebnisse/Kompetenzen learning outcomes/competencies/targeted competencies	Die Studierenden sollen durch dieses Modul die wichtigsten quantenchemischen Rechenmethoden, die in der heutigen Literatur verwendet werden, kennenlernen. Am Ende des Moduls werden die Studierenden in der Lage sein

		• die Vor- und Nachteile der verschiedenen Rechenmethoden einzuschätzen und gegeneinander abzuwägen • die Verlässlichkeit verschiedener berechneter Größen in der Literatur einzuschätzen • selbst quantenchemische Rechnungen zu planen, durchzuführen und auszuwerten • ein wissenschaftliches Manuskript zur Publikation in einer Fachzeitschrift zu schreiben *The students will learn about the most important quantum chemical calculation methods that are used today. At the end of the module, the students will be able to* • *assess the advantages and disadvantages of various calculation methods* • *judge the reliability of calculated values presented in the literature* • *plan, run and evaluate their own quantum chemical calculations* • *write a scientific manuscript for publication in a peer-reviewed journal*
1j)	Workloadberechnung (1 CP = 30 Stunden, siehe § 5 Absatz 6 AT BPO und MPO 2010) calculation of student workload (1 CP = 30 hours, see Art. 5 Section 6 AT BPO resp. MPO 2010)	56 Std. (4 SWS x 14 Wochen) Anwesenheit 20 Std. Vor-und Nachbereitung 20 Std. Durchführung und Auswertung quantenchemischer Rechnungen 40 Std. Schreiben des Praktikumsberichts 44 Std. Prüfungsvorbereitung Insgesamt 180 Arbeitsstunden. (= 6 CP)
1k)	Unterrichtssprache(n) Verschiedene Angaben sind möglich. language(s) of instruction *Different answers possible: German and/or English and/or another language*	☒ Deutsch/German ☐ Spanisch/Spanish ☐ Englisch/English ☐ Sonstige, und zwar/Other, namely this: ☐ Französisch/French
1l)	Modulverantwortliche(r) Responsible for the module	Tim Stauch
1m)	Häufigkeit (Turnus für Lehrangebot des Moduls) *z.B.: WS, jährl. oder SoSe, jährl. oder WS und SoSe etc.* frequency (regular cycle module is offered) *e.g.: winter semester, yearly or summer semester, yearly or each semester*	☐ WS, jährlich/yearly ☐ halbjährlich/half-yearly ☒ SoSe, jährlich/yearly ☐ jährlich/yearly ☐ jedes Semester/each semester ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this:
1n)	Dauer *1 Semester oder 2 Semester*	☒ Einsemestriges Modul/Module for one semester

	duration	☐ Zweisemestriges Modul/Module for two semesters ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this:
1o)	Credit Punkte credit points	6 CP
1p)	Dazugehörige Lehrveranstaltungen, Lehrveranstaltungsarten und SWS (= Semesterwochenstunden; Summe aller SWS im Modul) Appertaining courses, course formats and total weekly hours per semester (SWS = weekly hours per semester) *Zum Beispiel: 2 Vorlesung: 4 SWS* *For example: 2 lecture: 4 SWS*	Sum of SWS in this module: Type and number of courses in this module + SWS (total weekly hours per semester): ☒ 2 Vorlesung/lecture: 2 SWS ☒ 2 Übung/exercise: 2 SWS ☐ Seminar/seminar: SWS ☐ Praktikum/laboratory: SWS ☐ Exkursion/excursion: SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this with SWS Kann eine Studentin/ein Student im Modul aus verschiedenen Lehrveranstaltungen auswählen?/Can a student choose between different courses in the module? ☐ Ja/Yes ☒ Nein/No
2)	**Angaben zur Modulprüfung (information on the module examination) (siehe dazu auch AT § 5 Abs. 8)**	
2a)	Prüfungstyp type of examination *Modulprüfung (MP)* *exam with only one component* *Kombinationsprüfung (KP)* *exam with several components (administered by instructors)* *Teilprüfung (TP)* *exam with several components (administered by registrar)*	☐ Modulprüfung/Module examination (MP) ☒ Kombinationsprüfung/Combination examination (KP) ☐ Teilprüfung/Sub-examination (TP)
2b)	Leistungen (Benennung nach Art und Anzahl) exam components or prerequisites (type, number)	☒ PL, Anzahl/number: 2

	PL = *Prüfungsleistung (benoteter Bestandteil einer MP/KP/TP)* *graded component of the examination* SL = *Studienleistung (unbenotete Leistung in einer Lehrveranstaltung bzw. einem Modul)* *ungraded component of the examination, coursework* PVL = *Prüfungsvorleistung (Studienleistung vor einer Modulprüfung, nach § 5 Abs. 10 AT BPO bzw. MPO 2010)* *prerequisite of the examination (see AT Art. 5 Section 10)*	☐ SL, Anzahl/number: ☐ PVL, Begründung/reason:
2c)	Nur bei Kombinationsprüfungen auszufüllen: Prozentualer Anteil der einzelnen Prüfungsleistungen an der Berechnung der Modulnote. Complete for combination examinations only: Weights (in percentage) of component grades	Mündliche Prüfung (50%) Praktikumsbericht (50%)
2d)	Prüfungsform(en) (s. § 8, 9 und 10 AT BPO bzw. AT MPO 2010) form of examination (see AT Art. 8, 9 and 10)	☐ Hausarbeit/Assignment ☐ Klausur/Written examination ☒ Mündliche Prüfung (Einzelprüfung) Oral examination (single) ☐ Gruppenprüfung, mündlich/ Group examination, oral ☐ Referat, mündlich/Presentation, oral ☐ Referat, schriftliche Ausarbeit/Presentation, written assignment ☐ Portfolio/Portfolio ☒ Praktikumsbericht/Internship report ☐ Projektbericht/Project report ☐ Bachelorarbeit/Bachelor thesis ☐ Kolloquium/Colloquium ☐ Masterarbeit/Master Thesis ☐ Sonstiges (Definition erfolgt in der Prüfungsordnung/Other (concrete definition is given in the examination regulations):
2e)	Prüfungssprache(n) language(s) of examination	☒ Deutsch/German ☐ Spanisch/Spanish ☐ Englisch/English ☐ Sonstige, und zwar/Other, namely this: ☐ Französisch/French
2f)	Literatur *Fakultativ*	Cramer: Essentials of Computational Chemistry Jensen: Introduction to Computational Chemistry

	literature *optional*	Szabo/Ostlund: Modern Quantum Chemistry