

Einführung in die Dichtefunktionaltheorie		7 oder 10 CP				
Wahlpflichtmodul im Pflichtbereich Anorganische und Analytische Chemie						
Inhalte:						
<u>Vorlesung:</u> Hartree-Fock-Theorie; Elektronenkorrelation im post-Hartree-Fock-Bild; Elektronenkorrelation in Dichte-basierten Ansätzen; Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie; Kohn-Sham-Theorie; moderne Implementierungen; Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie für Moleküle: Erfolge und Grenzen						
<u>Praktikum:</u> Benutzung moderner Computersysteme; quantenchemische Rechnungen zu ausgewählten chemischen Problemstellungen						
Qualifikationsziele und Kompetenzen:						
<u>Vorlesung:</u> Die Funktionsweise der Dichtefunktionaltheorie wird durch Vergleich mit klassischen Wellenfunktions-basierten Methoden eingeführt. Die Studierenden erhalten einen detaillierten Einblick in die Maschinerie moderner Dichtefunktionalimplementierungen und lernen über detailliert analysierte Anwendungsbeispiele Vorteile und Grenzen aktuell verfügbarer Funktionale kennen. Sie werden in die Lage versetzt, die in allen Bereichen der aktuellen chemischen Literatur beschriebenen Methoden einzuordnen und zu bewerten.						
<u>Praktikum:</u> Nach einer Einführung in die Benutzung der Computerprogramme bearbeiten die Studierenden ausgewählte chemische Problemstellungen mit Hilfe moderner Quantenchemie-Programmpakete. Sie werden damit in die Lage versetzt, in ihren zukünftigen Forschungsgebieten moderat anspruchsvolle theoretische Untersuchungen eigenständig durchführen zu können.						
Angebotszyklus:	einmal pro Jahr					
Dauer des Moduls:	1 Semester					
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:	keine					
Organisatorisches:	Das Praktikum ist optional. Dafür ist eine Anmeldung erforderlich. Die Praktikumsregularien werden zu Beginn des Praktikums bekannt gegeben.					
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):	Leistungsnachweis zum Praktikum (siehe Praktikumsregularien)					
Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:	Klausur oder mündliche Prüfung					
Voraussetzung für die Vergabe der CP:	bestandene Modulabschlussprüfung					
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:						
Lehrveranstaltungen	Typ	SW S	Semester / CP			
			1	2	3	4
Einführung in die Dichtefunktionaltheorie	V	4	7			
Advanced Computational Chemistry	P	3	3			