

---

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

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling  
 Lehrende: Christian Neiß, Bernd Meyer

---

Startsemester: WS 2018/2019	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 90 Std.	Eigenstudium: 60 Std.	Sprache: Deutsch

---

**Lehrveranstaltungen:**

Anwesenheitspflicht im Praktikum!  
 Software-Applikationen in NanoScience (WS 2018/2019, Vorlesung mit Übung, Anwesenheitspflicht, Christian Neiß et al.)  
 Theorie periodischer Systeme (WS 2018/2019, Vorlesung, 2 SWS, Bernd Meyer et al.)  
 Computational Chemistry / Computational Nanoscience (SS 2019, Praktikum, Christian Neiß et al.)

---

**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)

Softwareapplikationen in Nanoscience: EX (PL)

Praktikum Computational Nanoscience: LAB (PL)

Berechnung der Modulnote: W90(PL) 50% + EX(PL) 25% + LAB(PL) 25%

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: WS 2018/2019, 1. Wdh.: SS 2019

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)