

[K3.1] <i>Introduction to Density Functional Theory</i>	Einführung in die Dichtefunktionaltheorie	Wahlpflichtmodul im Kernbereich K3	7 CP (insg.) = 210 h				4 SWS
			Kontaktstudium 4 SWS / 60 h	Selbststudium 150 h			
Inhalte							
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							
Lernergebnisse / Kompetenzziele							
Die Funktionsweise der Dichtefunktionaltheorie wird durch Vergleich mit klassischen Wellenfunktions-basierten Methoden eingeführt. Die Studierenden erhalten einen detaillierten Einblick in die Maschinerie moderner Dichtefunktional-Implementierungen 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.							
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls							
Keine							
Empfohlene Voraussetzungen							
Keine							
Organisatorisches							
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		M.Sc. Chemie / FB14					
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		M.Sc. Biophysik / FB13					
Häufigkeit des Angebots		Einmal im Jahr (im Sommersemester)					
Dauer des Moduls		1 Semester					
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Prof. M. Holthausen					
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen		Keine					
Teilnahmenachweise		Keine					
Leistungsnachweise		Keine					
Lehr- / Lernformen		Vorlesung					
Unterrichts- / Prüfungssprache		Deutsch oder Englisch (nach Vereinbarung)					
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt					
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Mündliche Abschlussprüfung (60 Min.)					
kumulative Modulprüfung bestehend aus:							
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Einführung in die Dichtefunktionaltheorie	V	4		7		
	SUMME				7		