

<b>Modul:</b> Dichtefunktionaltheorie			
<b>Hochschule/Fachbereich/Institut:</b> Freie Universität Berlin/Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie/Institut für Chemie und Biochemie			
<b>Modulverantwortliche/r:</b> Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben detaillierte Kenntnisse der theoretischen Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie für Grundzustand und angeregte Zustände. Sie kennen quantenchemische Programmpakete und können Dichtefunktionalmethoden sicher anwenden und Strukturoptimierungen und Frequenzanalysen durchführen.			
<b>Inhalte:</b> Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie, Entwicklung von Austausch-Korrelationsfunktionalen, Anwendungsgebiete und Genauigkeit verschiedener Dichtefunktionalmethoden, Molekulare Eigenschaften und angeregte Zustände mit zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie. Algorithmen zur Optimierung der Molekülstruktur und der Frequenzanalyse. Einführung in quantenchemische Programmpakete mit Schwerpunkt auf Dichtefunktionalmethoden und computergestützte Interpretation der berechneten Daten.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> Semesterwochen- stunden = SWS	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> Stunden
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit SPC 30
Seminar am PC mit Anwendung von Spezialsoftware	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben und Computersimulationen	Vor- und Nachbereitung SPC 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Veranstaltungssprache</b>		Deutsch oder Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme</b>		Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen, Seminar: ja	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls</b>		ein Semester	
<b>Modulprüfung</b>		praktische Prüfung (Simulation am Computer)	
<b>Häufigkeit des Angebots</b>		jedes dritte Semester	
<b>Verwendbarkeit</b>		Masterstudiengang Chemie	