

Modul: Moleküldynamik			
Hochschule/Fachbereich/Institut: Freie Universität Berlin/Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie/Institut für Chemie und Biochemie			
Modulverantwortliche/r: Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
Zugangsvoraussetzungen: keine			
Qualifikationsziele: Die Studentinnen und Studenten kennen die grundlegenden Konzepte der klassischen Moleküldynamik und können diese auf ausgewählte chemische Modellsysteme anwenden. Sie verfügen über die numerischen Fähigkeiten und die nötigen Programmierkenntnisse, entsprechende Computersimulationen durchzuführen.			
Inhalte: Modellierung der Wechselwirkung zwischen Atomen durch empirische Kraftfelder, Simulation von dynamischen Vorgängen in Molekülen mit Methoden der klassischen Mechanik, Einführung in die numerischen Methoden der Moleküldynamik, Grundlagen des Programmierens und Erlernen einer Programmiersprache			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochen- stunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü
Übung	1	Diskussionsbeteiligung, Präsentation ausgewählter Simulationsergebnisse	<i>betreute Computerübung</i> 15 <i>Selbststudium am Rechner</i> 15 Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
Veranstaltungssprache		Deutsch	
Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme		Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen, Übung: ja	
Arbeitszeitaufwand insgesamt		150 Stunden	5 LP
Dauer des Moduls		ein Semester	
Modulprüfung		praktische Prüfung (Simulation am Computer)	
Häufigkeit des Angebots		einmal jährlich	
Verwendbarkeit		Bachelorstudiengang Chemie, Bachelorstudiengang Biochemie, Masterstudiengang Chemie	