

# Modulbeschreibung

Modulnummer	Modulname	Verantwortliche Dozentin bzw. verantwortlicher Dozent
Chem-Ma-B13	Anwendung der Quantenchemie	Prof. Dr. Thomas Straßner (thomas.strassner@tu-dresden.de)
<b>Qualifikationsziele</b>	Die Studierenden sind in der Lage, moderne quantenchemische Programme anzuwenden und beherrschen die Berechnung von Grund- und Übergangszuständen molekularer Systeme mittels DFT-Rechnungen zur „in silico“-Untersuchung von Reaktionen und ihrer Mechanismen. Zudem sind sie in der Lage, mit verschiedenen Softwarepaketen (unter LINUX) zu arbeiten.	
<b>Inhalte</b>	Das Modul umfasst eine Einführung in Molecular Modeling-Techniken und die praktische Durchführung von semiempirischen, ab initio- und DFT-Rechnungen unter besonderer Berücksichtigung organischer/metallorganischer Reaktionen. Basissätze, Elektronenkorrelation, Störungstheorie, Populationsanalysen und die Interpretation der Ergebnisse mittels qualitativer MO-Theorie sind Inhalte des Moduls.	
<b>Lehr- und Lernformen</b>	Das Modul umfasst Vorlesung (2 SWS), Praktikum (4 SWS) und Selbststudium. Die Lehrsprache der Lehrveranstaltungen ist Deutsch.	
<b>Voraussetzungen für die Teilnahme</b>	Es werden grundlegende Kenntnisse in den Bereichen organische, physikalische und theoretische Chemie auf Bachelorniveau vorausgesetzt. Literatur zur Vorbereitung: F. Jensen; Introduction to Computational Chemistry; Wiley-VCH.	