

Modulbeschreibung

| Modulnummer | Modulname | verantwortlicher Dozent |
|--|---|--------------------------------|
| MA-CH-BOC 04 | Anwendung der Quantenchemie | Prof. Straßner |
| Inhalte und Qualifikationsziele | <p>Das Modul umfasst inhaltlich die Anwendungen der Quantenchemie aus dem Bereich der theoretischen Chemie. Schwerpunkt weiterhin ist die Einführung in das Betriebssystem LINUX sowie die Nutzung verschiedener Softwarepakete. Neben ab initio- und DFT Rechnungen werden auch semiempirische Methoden sowie Kraftfeldrechnungen durchgeführt</p> <p>Die Studierenden beherrschen die Berechnung von Grund- und Übergangszuständen mit deren Hilfe sie die „in silico“ Untersuchung von Reaktionen und ihrer Mechanismen. vornehmen können.</p> | |
| Lehrformen | 2 SWS Vorlesung 4 SWS Praktikum | |
| Voraussetzungen für die Teilnahme | <p>Grundlegende Kenntnisse in den Bereichen organische, physikalische und theoretische Chemie.</p> <p>Literatur zur Vorbereitung: A.R. Leach, „Molecular, Modelling“, Addison Wesley Longman; J.B. Foresman, A. Frisch, “Exploring Chemistry ...”, Gaussian Inc.</p> | |