

# NS-M04

Gültig ab WS13/14 bis (leer) / Bitte beachten Sie auch die Bemerkungen unter Punkt 13.

<b>1. Name des Moduls:</b>	<b>Computergestützte Nanowissenschaften / Computational Nanoscience</b>
<b>2. Fachgebiet / Verantwortlich:</b>	Physik / Fakultät, der Studiendekan
<b>3. Inhalte des Moduls:</b>	1) Grundlagen <ul style="list-style-type: none"><li>• Einleitung und Überblick</li><li>• Vielelektronensysteme und Born-Oppenheimer Näherung</li><li>• Periodische und finite Nanostrukturen</li></ul> 2) Dichtefunktionaltheorie (DFT) <ul style="list-style-type: none"><li>• Wechselwirkendes Elektronengas</li><li>• Hartree-Fock Näherung</li><li>• Grundlegende Theoreme der DFT</li><li>• Austausch-Korrelationsfunktionale</li></ul> 3) Numerische Aspekte der DFT <ul style="list-style-type: none"><li>• Basissatzentwicklung</li><li>• Implementierung für periodische und endliche Systeme</li></ul> 4) Anwendungen <ul style="list-style-type: none"><li>• Theoretische Spektroskopie</li><li>• Quantenmolekulardynamik</li></ul>
<b>4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:</b>	Erlernen der Grundlagen moderner Methoden der Elektronenstrukturtheorie, sowie deren rechnerseitigen Implementierung. Erwerb eines Überblicks über mögliche Anwendungsgebiete und Grenzen dieser Methoden im Bereich der nanostrukturierten Materialien.
<b>5. Teilnahmevoraussetzungen:</b>	
<b>a) empfohlene Kenntnisse:</b>	Quantenmechanik II
<b>b) verpflichtende Nachweise:</b>	Keine
<b>6. Verwendbarkeit des Moduls:</b>	MSc. Nanoscience BSc. Physik, BSc. Nanoscience, BSc. Comp. Science, MSc. Physik, MSc. Computational Science
<b>7. Angebotsturnus des Moduls:</b>	jährlich
<b>8. Das Modul kann absolviert werden in:</b>	1 Semester
<b>9. Empfohlenes Fachsemester:</b>	1 bis 3
<b>10. Gesamtaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:</b>	<b>Arbeitsaufwand:</b> <b>Gesamt in Stunden: 240</b> <b>davon:</b> <b>1. Präsenzzeit: 6 SWS</b> <b>2. Selbststudium (inkl. Prüfungsvorbereitung/ Prüfung): 150 Std.</b> <b>Leistungspunkte: 8</b>
<b>Voraussetzung für die Vergabe der in Nr. 10 genannten Leistungspunkte ist das erfolgreiche Absolvieren aller in den Nrn. 11 und 12 aufgeführten Leistungen.</b>	

# NS-M04

gültig ab WS13/14 bis (leer)

<b>11. Modulbestandteile:</b>						
<b>Nr</b>	<b>P/WP</b>	<b>Lehrform</b>	<b>Themenbereich/Thema</b>	<b>SWS/ Std.</b>	<b>Studienleistungen</b>	
NS-M0 4.1	Pflicht	Vorlesung	Computergestützte Nanowissenschaften	4		
NS-M0 4.2	Pflicht	Praktikum	Computergestützte Nanowissenschaften	2		
<b>12. Modulprüfung:</b>						
<b>Nr</b>	<b>Kompetenz / Thema</b>		<b>Art der Prüfung</b>	<b>Dauer</b>	<b>Zeitpunkt / Bemerkungen</b>	<b>Anteil an Modulnote</b>
NS-M0 4.2	Computergestützte Nanowissenschaften		Protokoll		Ende der Vorlesungszeit bis Semesterende	100 %
<b>13. Bemerkungen:</b>						
<p>Im Anschluss an die Vorlesung wird ein Blockpraktikum am Computer durchgeführt, in dem die in der Vorlesung erworbenen Kenntnisse praktisch angewendet werden. Hierüber ist ein aussagekräftiges Protokoll mit Auswertung anzufertigen und nach Vorgaben des Dozenten in einer elektronischen Form einzureichen, die die Ausarbeitung des Protokolls durch den Kandidaten sicherstellt.</p>						