

NS-M07

Gültig ab WS13/14 bis (leer)

1. Name des Moduls:	Molekulardynamiksimulationen in der Chemie, Physik und Biologie / Molecular Dynamics Simulations in Chemistry, Physics, and Biology
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Prof. Dr. Dominik Horinek Fakultät für Chemie
3. Inhalte des Moduls:	1) Grundlagen: Simulationsmethoden, Kräfte in molekularen Systemen, Elektrostatik, Thermostaten, Barostaten 2) Bestimmung struktureller, thermodynamischer und dynamischer Eigenschaften 3) Freie-Energie Simulationen 4) Klassische Kraftfelder 5) Anwendungen: Wasser, Polymere, Proteine 6) Fortgeschrittene Methoden
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Nach erfolgreicher Teilnahme an diesem Modul ist der/die Studierende in der Lage 1) die grundlegenden Methoden der Molekulardynamik zu beschreiben. 2) die Näherungen, die in einer klassischen Molekulardynamiksimulation getroffen werden, zu verstehen und zu erklären. 3) Simulationsergebnisse in Bezug auf experimentelle Daten mit Hilfe der statistischen Mechanik zu interpretieren. 4) zu evaluieren, welche Simulationsansätze zur Beschreibung eines gegebenen experimentellen Problems notwendig sind. 5) selbstständig einfache Simulationsprojekte durchzuführen.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Grundkenntnisse der statistischen Mechanik, Grundkenntnisse in Linux.
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Nanoscience, BSc. Nanoscience, BSc. Comp. Science, MSc. Comp. Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	jährlich
8. Das Modul kann absolviert werden in:	2 Semestern
9. Empfohlenes Fachsemester:	1 bis 3
10. Gesamtaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 240 davon: 1. Präsenzzeit: 6 SWS

NS-M07

gültig ab WS13/14 bis (leer)

					2. Selbststudium (inkl. Prüfungsvorbereitung/ Prüfung): 150 Std. Leistungspunkte: 8	
Voraussetzung für die Vergabe der in Nr. 10 genannten Leistungspunkte ist das erfolgreiche Absolvieren aller in den Nrn. 11 und 12 aufgeführten Leistungen.						
11. Modulbestandteile:						
Nr	P/WP	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS/ Std.	Studienleistungen	
NS-M0 7.1	Pflicht	Vorlesung	Einführung in die Molekulardynamik I	2		
NS-M0 7.2	Pflicht	Vorlesung	Einführung in die Molekulardynamik II	2		
NS-M0 7.3	Pflicht	Übung	Einführung in die Molekulardynamik	2		
12. Modulprüfung:						
Nr	Kompetenz / Thema		Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt / Bemerkungen	Anteil an Modulnote
NS-M0 7.1	Molekulardynamik		Mündlich	20 Minuten	Ende der Vorlesungszeit bis Semesterende	100 %