Modulkatalog M.Sc. Computational Science

CS-M-F

1. Name des Moduls:	**CS-M-F: Fachliche Spezialisierung**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Physik / Fakultät, der Studiendekan
3. Inhalte des Moduls:	Erarbeitung des aktuellen Forschungsstands im gewählten Spezialisierungsbereich. Konkrete Quellen werden vom Betreuer der Forschungsphase angegeben. Genaue Planung der Masterarbeit und Erlernen der benötigten experimentellen bzw. theoretischen Spezialmethoden. Am Ende des Moduls muss die verbindliche Annahme des Themas erfolgen.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Einarbeitung in den Themenkreis der Forschungsphase.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Hängt von Thematik ab
b) verpflichtende Nachweise:	siehe Prüfungsordnung
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	jederzeit
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 3. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 30 LP x 30 = 900 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 50 Std. 2. Selbststudium: 850 Std. Leistungspunkte: 30

11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:

12. Modulbestandteile:

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P		Fachliche Spezialisierung	50	Teilnahme am Seminar
2	P		Fachliche Spezialisierung	850	Seminarvortrag

Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Nr	Kompetenz / Thema	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt / Bemerkungen	Anteil an Modulnote
	F				

14. Bemerkungen:
Der Betreuer bestätigt die wissenschaftlich angemessene Darstellung der Thematik in dem Seminarvortrag.

CS-M-P1

1. Name des Moduls:	**CS-M-P1: Angewandte Mathematik I**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Mathematik / Fakultät für Mathematik
3. Inhalte des Moduls:	Themen der Angewandten Mathematik, die für den Bereich Computational Science relevant sind.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Vertiefte Kenntnisse der Angewandten Mathematik
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Analysis I – III, Lineare Algebra
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jedes Semester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 9 LP x 30 = 270 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium, Prüfungsvorbereitung: 180 Std. Leistungspunkte: 9
11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:	

12. Modulbestandteile:

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl. Übung	s.u. s.u.	4 2	 Übungsaufgaben

Es können wahlweise die Veranstaltungen Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik, Numerik II, Analysis IV, Partielle Differentialgleichungen I, Partielle Differentialgleichungen II, Funktionalanalysis, Optimierung, Optimale Kontrolle, Mathematische Modellierung, Numerik partieller Differentialgleichungen, Lineare Algebra II, Algebra besucht werden. Daneben können alle Veranstaltungen des Moduls Vertiefung im Bachelor (BV) des Studiengangs Bachelor Mathematik und alle Veranstaltungen des Masterstudiengangs Mathematik belegt werden. Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
Thema aus 12)	mündlich oder schriftlich	schriftlich 90-180 min mündlich 20-45 min	Vorlesungszeit bis Semesterende	Benotet, 100 %

14. Bemerkungen: Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P2

1. Name des Moduls:	**CS-M-P2: Angewandte Mathematik II**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Mathematik / Fakultät für Mathematik
3. Inhalte des Moduls:	Themen der Angewandten Mathematik, die für den Bereich Computational Science relevant sind.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Vertiefte Kenntnisse der Angewandten Mathematik
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Analysis I – III, Lineare Algebra
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jedes Semester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 9 LP x 30 = 270 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium, Prüfungsvorbereitung: 180 Std. Leistungspunkte: 9
11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:	

12. Modulbestandteile:

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl. Übung	s.u. s.u.	4 2	 Übungsaufgaben

Es können wahlweise die Veranstaltungen Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik, Numerik II, Analysis IV, Partielle Differentialgleichungen I, Partielle Differentialgleichungen II, Funktionalanalysis, Optimierung, Optimale Kontrolle, Mathematische Modellierung, Numerik partieller Differentialgleichungen, Lineare Algebra II, Algebra besucht werden. Daneben können alle Veranstaltungen des Moduls Vertiefung im Bachelor (BV) des Studiengangs Bachelor Mathematik und alle Veranstaltungen des Masterstudiengangs Mathematik belegt werden. Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
Thema aus 12)	mündlich oder schriftlich	schriftlich 90-180 min mündlich 20-45 min	Vorlesungszeit bis Semesterende	Benotet, 100 %

14. Bemerkungen: Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P3

1. Name des Moduls:	**CS-M-P3: Angewandte Mathematik III**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Mathematik / Fakultät für Mathematik
3. Inhalte des Moduls:	Themen der Angewandten Mathematik, die für den Bereich Computational Science relevant sind.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Erwerb von vertieften Kenntnissen der Angewandten Mathematik
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Analysis I – III, Lineare Algebra
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jedes Semester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 9 LP x 30 = 270 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium, Prüfungsvorbereitung: 180 Std. Leistungspunkte: 9
11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:	
12. Modulbestandteile:	

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl. Übung	s.u. s.u.	4 2	 Übungsaufgaben

Es können wahlweise die Veranstaltungen Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik, Numerik II, Analysis IV, Partielle Differentialgleichungen I, Partielle Differentialgleichungen II, Funktionalanalysis, Optimierung, Optimale Kontrolle, Mathematische Modellierung, Numerik partieller Differentialgleichungen, Lineare Algebra II, Algebra besucht werden. Daneben können alle Veranstaltungen des Moduls Vertiefung im Bachelor (BV) des Studiengangs Bachelor Mathematik und alle Veranstaltungen des Masterstudiengangs Mathematik belegt werden. Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
Thema aus 12)	mündlich oder schriftlich	schriftlich 90-180 min mündlich 20-45 min	Vorlesungszeit bis Semesterende	Benotet, 100 %

14. Bemerkungen: Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P4

1. Name des Moduls:	Biochemie
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Biochemie/ Prof. Dr. R. Sterner
3. Inhalte des Moduls:	• Chromatinstruktur • RNA-Biologie • Ribosom-Biologie • Proteinstruktur • Biophysik
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Fortgeschrittene Kenntnisse in aktuellen Themen der experimentellen Biochemie. Präsentation und Diskussion wissenschaftlicher Ergebnisse.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Kenntnisse aus dem Bachelorstudiengang
b) verpflichtende Nachweise:	keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	M.Sc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jedes Semester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	2 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	1. und. 2. Fachsemester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	300 Std. (60 Std. Präsenzzeit, 210 Std. Eigenstudium, 30 Std. Prüfungsvorbereitung) / 10 Leistungspunkte

11. Modulbestandteile:

Nr.	P / WP / W	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorlesung	Die Studierenden wählen die Vorlesung aus einem vorgegebenen Angebot aus. Im Zweifelsfall ist die Studienberatung in Anspruch zu nehmen.	2 SWS / 30 Std.	
4	P	Vorlesung	Die Studierenden wählen die Vorlesung aus einem vorgegebenen Angebot aus. Im Zweifelsfall ist die Studienberatung in Anspruch zu nehmen.	2 SWS / 30 Std.	

Bemerkungen:

12. Modulprüfung:

A / T*	Inhalt der Prüfung	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Art der Bewertung
T	Biochemie	Mündl. Prüfung	45 min	Am Semesterende	10 LP

13. Bemerkungen:

Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P5

1. Name des Moduls:	Experimentelle Genomik
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Funktionelle Genomik / Dr. Reinders, Dr. Dettmer, Prof. Dr. Oefner
3. Inhalte des Moduls:	Es werden aktuelle experimentelle Techniken aus den Bereichen Sequenz-, Transkriptom-, Proteom- und Metabolomanalyse im Detail besprochen. Themen beinhalten unter anderen Next-Generation Sequencing, Microarrayanalyse, massenspektrometrische Proteomanalyse, und Metabolomanalyse mit gekoppelten massenspektrometrischen Techniken sowie multidimensionaler und multinuklearer NMR-Spektroskopie. Des weitern werden grundsätzliche Aspekte des experimentellen Designs besprochen. Es wird unter anderem auf die benötigte Zahl von Experimenten zur Beantwortung einer bestimmten Fragestellung, die Notwendigkeit von Replikaten, die Vermeidung von Batcheffekten und die zeitliche Planung eingegangen. Die in der Vorlesung besprochenen Aspekte werden in einem Laborpraktikum in kleinen Gruppen vertieft.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Theoretische und praktische Einblicke in aktuelle Analysemethoden in der Genomik
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	B.Sc. Modul Bioanalytik (Modul CS-B-P2b Teil 1), Genomische Datenanalyse (Modul CS-B-P2b Teil 2)
b) verpflichtende Nachweise:	Biochemie (CS-B-Med3 oder inhaltlich verwandte Veranstaltung)
6. Verwendbarkeit des Moduls:	M.Sc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jeweils zum Wintersemester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	2 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	1. und. 2. Fachsemester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	300 Std. (180 Std. Präsenzzeit, 90 Std. Eigenstudium, 30 Std. Prüfungsvorbereitung) / 10 Leistungspunkte

11. Modulbestandteile:

Nr.	P / WP / W	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorlesung	Experimentelle Genomik Teil 1	2 SWS / 30 Std.	
2	P	Seminar	Einführung in das Praktikum Experimentelle Genomik (1. Sem.)	1 SWS / 15 Std.	
3	P	Kurs	Methoden in der Experimentellen Genomik (1. Sem.)	4 SWS / 60 Std.	Versuchsprotokolle
4	P	Vorlesung	Experimentelle Genomik Teil 2	1 SWS / 15 Std.	
5	P	Seminar	Literaturseminar Experimentelle Genomik	1 SWS / 15 Std.	Vortrag
6	P	Seminar	Einführung in das Praktikum Experimentelle Genomik (2. Sem.)	1 SWS / 15 Std.	
7	P	Kurs	Methoden in der Experimentellen Genomik (2. Sem.)	4 SWS / 30 Std.	Versuchsprotokolle

Bemerkungen:

12. Modulprüfung:

A / T*	Inhalt der Prüfung	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Art der Bewertung
T	Experimentelle Genomik Teil 1 & 2	Klausur	120 min	Ende 2. Semester	benotet

Bemerkungen: T=Modulteilprüfung. Die Modulnote setzt sich zu gleichen Anteilen aus den Modulteilprüfungen Experimentelle Genomik Teil 1 (1/2) und Teil 2 (1/2) zusammen.

13. Sonstiges/Bemerkungen:

a) Literatur:

Lottspeich & Engels, Bioanalytik, Spektrum-Verlag
Rehm & Letzel, Proteinbiochemie / Proteomics, Spektrum-Verlag
Brown, Genome und Gene, Spektrum-Verlag
Villas-Boas et al., Metabolome Analysis, WILEY-VCH

b) Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P6

1. Name des Moduls:	Bioinformatik
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Prof. Dr. Spang
3. Inhalte des Moduls:	Spezielle Themen sowohl der algorithmischen als auch der statistischen Bioinformatik
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Verständnis der aktuellen Forschungsthemen der Bioinformatik
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Kenntnisse des Bachelorstudiengangs
b) verpflichtende Nachweise:	Genomik & Bioinformatik, Genomische Datenanalyse, entsprechend Modulen CS-B-P2b (Genomik B) oder CS-P2 (Genomik und Bioinformatik) oder Inhaltlich gleichwerte Module.
6. Verwendbarkeit des Moduls:	M.Sc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jeweils zum Wintersemester
8. Das Modul kann absolviert werden in:	2 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	1. und. 2. Fachsemester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	300 Std. (210 Std. Präsenzzeit, 60 Std. Eigenstudium, 30 Std. Prüfungsvorbereitung) / 10 Leistungspunkte

11. Modulbestandteile:

Nr.	P / WP / W	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Seminar	Algorithmische Bioinformatik	2 SWS / 30 Std.	2
2	P	Seminar	Statistische Bioinformatik	2 SWS / 30 Std.	2
3	P	Praktikum	Blockpraktikum	10 SWS / 150 Std.	6

Bemerkungen:

12. Modulprüfung:

A / T*	Inhalt der Prüfung	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Art der Bewertung
T	Bioinformatik	Mündlich	45 min	Am Semesterende	benotet

13. Bemerkungen:

Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.

CS-M-P7

1. Name des Moduls:	**CS-M-P7: Lattice QCD I**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Physik / Fakultät, der Studiendekan
3. Inhalte des Moduls:	**Lattice QCD I:** • path integral quantization • scalar field theory on the lattice • Monte Carlo methods • Gauge Theories • Strong coupling expansion • continuum limit and phase transition • Fermions on the lattice • Chiral symmetry on the lattice • Numerical methods for fermions • Hadron spectroscopy
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Erwerb der Grundkenntnisse der Gitter QCD Die Fähigkeit zur selbständigen Übertragung, Verallgemeinerung und Abstraktion der erlernten Beschreibungs- und Lösungsmethoden auf andere Problemstellungen.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Grundkenntnisse in mindestens einer der Programmiersprachen Fortran, C oder C++; Grundkenntnisse der Quantenfeldtheorie
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science, MSc. Physik
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jährlich
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semestern
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 8 LP x 30 = 240 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium, Prüfungsvorbereitung: 150 Std. Leistungspunkte: 8
11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:	
12. Modulbestandteile:	

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl. Übung	Lattice QCD I Lattice QCD I	4 2	 Übungsaufgaben
Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.					

13. Modulprüfung				
Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
a) Bereich 1	Klausur oder mündlich	Klausur 105 min oder 135 min oder 210 min (falls aus zwei Teilen bestehend), mündlich 25 – 35 min.	Am Semesterende	Benotet (100%)
14. Bemerkungen: Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.				

CS-M-P8

1. Name des Moduls:	**CS-M-P8: Lattice QCD II**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Physik / Fakultät, der Studiendekan
3. Inhalte des Moduls:	**Lattice QCD II:** • Decay constants • Chiral extrapolation • Perturbative and non-perturbative renormalization • Hadronic structure • Electroweak matrix elements • QCD at non-zero temperature • QCD for finite baryon density • Lattice gauge theories beyond QCD
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Erwerb fortgeschrittener Kenntnisse in der Gitter QCD Die Fähigkeit zur selbständigen Übertragung, Verallgemeinerung und Abstraktion der erlernten Beschreibungs- und Lösungsmethoden auf andere Problemstellungen.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Grundkenntnisse in mindestens einer der Programmiersprachen Fortran, C oder C++; Grundkenntnisse der Quantenfeldtheorie, Lattice-QCD I
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Computational Science, MSc. Physik
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jährlich
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semestern
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 2. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 8 LP x 30 = 240 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium, Prüfungsvorbereitung: 150 Std. Leistungspunkte: 8
11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:	
12. Modulbestandteile:	

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl. Übung	Lattice QCD II Lattice QCD II	4 2	 Übungsaufgaben
Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.					

13. Modulprüfung				
Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
a) Bereich 1	Klausur oder mündlich	Klausur: 105 min oder 135 min oder 210 min (falls aus zwei Teilen bestehend) mündlich 25 -35 min.	Am Semesterende	Benotet (100%)
14. Bemerkungen: Das Modul kann nicht im Rahmen von Bachelorstudiengängen absolviert werden.				

NS-M-4

1. Name des Moduls:	**NS-M-4: Computergestützte Nanowissenschaften / Computational Nanoscience**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Physik / Fakultät, der Studiendekan
3. Inhalte des Moduls:	1) Grundlagen • Einleitung und Überblick • Vielelektronensysteme und Born-Oppenheimer Näherung • Periodische und finite Nanostrukturen 2) Dichtefunktionaltheorie (DFT) • Wechselwirkendes Elektronengas • Hartree-Fock Näherung • Grundlegende Theoreme der DFT • Austausch-Korrelationsfunktionale 3) Numerische Aspekte der DFT • Basissatzentwicklung • Implementierung für periodische und endliche Systeme 4) Anwendungen • Theoretische Spektroskopie • Quantenmolekulardynamik
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	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
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Quantenmechanik II
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Nanoscience BSc. Physik, BSc. Nanoscience, BSc. Comp. Science, MSc. Physik, MSc. Computational Science
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jährlich
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester Master
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 8 LP x 30 = 240 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 1 Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 90 Std. 2. Selbststudium und Prüfungsvorbereitung (inkl. Prüfung) : 150 Std. Leistungspunkte: 08

11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:

12. Modulbestandteile:

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl.	Computergestützte Nanowissenschaften	4	
2	P	Prak.	Computergestützte Nanowissenschaften	2	

Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Kompetenz / Thema	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt / Bemerkungen	Anteil an Modulnote
Computergestützte Nanowissenschaften	Praktikumsprotokoll	---	Ende der Vorlesungszeit bis Semesterende	benotet, 100%

14. Bemerkungen:

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.

NS-M-7

1. Name des Moduls:	**NS-M-7: Molekulardynamiksimulationen in der Chemie, Physik und Biologie / Molecular Dynamics Simulations in Chemistry, Physics, and Biology**
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Prof. 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 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	ab 1. Semester
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 8 LP x 30 = 240 Std. davon: 1. Präsenzzeit: 2 Sem. x 15 Wo x 6 SWS = 180 Std. 2. Selbststudium und Prüfungsvorbereitung: 60 Std. Leistungspunkte: 08

11. Das Modul ist erfolgreich absolviert, wenn die unten näher beschriebenen Leistungen erfüllt sind:

12. Modulbestandteile:

Nr	P / WP	Lehr-form	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen
1	P	Vorl.	Einführung in die Molekulardynamik I	2	
2	P	Vorl.	Einführung in die Molekulardynamik II	2	
3	P	Übung	Einführung in die Molekulardynamik	2	

Weitere Informationen geben die Dozenten zu Veranstaltungsbeginn bekannt.

13. Modulprüfung

Kompetenz / Thema	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt / Bemerkungen	Anteil an Modulnote
Molekulardynamik	mündliche Prüfung	20 Min.	Ende der Vorlesungszeit bis Semesterende	benotet, 100%

14. Bemerkungen: