

Universität Duisburg - Essen

Fachbereich Chemie

Modul	ThC-CS
Verantwortlicher	Prof. Dr. E. Spohr
Internet	http://www.chemie.uni-essen.de/Module

Studienjahr	Dauer	Stellung im Curriculum	Voraussetzungen
1 oder 2	1 Semester	Wahl	keine

Veranstaltung	SWS	Arbeitszeit in h	Credits
Statistische Thermodynamik und Computersimulation	3	150	5
Summe	3	150	5

Leistungsnachweise für das Modul	Klausur bzw. Kolloquium (Prüfungsleistung)
----------------------------------	--

Modul	ThC-CS
Veranstaltung	Statistische Thermodynamik und Computersimulation
Dozent	Prof. Dr. E. Spohr

Semester	Häufigkeit	Studierendenzielgruppe	Voraussetzungen	Credits
2. oder 4. Fachsem.	WS	M.Sc. Chemie	keine	5

Lernziele	Das Lehrmodul bietet den Studierenden vertiefte Kenntnisse zu Anwendungen der Computersimulation in der Chemie.
Lehrform	Vorlesung (2) & Übung (1)
Literatur	A. Leach, Molecular Modeling. Principles and Applications, Longman, B. Smit & D. Frenkel, Understanding Molecular Simulations Allen & Tildesley,

Arbeitsaufwand	Veranstaltung in SWS	Präsenzzeit in h	Vor-/Nachber. in h	Prüfungsvorb. in h	Arbeitszeit in h
	3	39	61	50	150

Lehrinhalte	Klassische Näherung, Einführung in die klassische statistische Thermodynamik, Ensembletheorie, Moleküldynamik-Simulation, Monte Carlo-Simulation, Simulation kondensierter Phasen und Grenzflächen, Paarnäherung, (periodische) Randbedingungen, langreichweitige Wechselwirkungen, empirische Kraftfelder, ab initio-MD, Simulation freier Energien, Analyse von Simulationstrajektorien
-------------	---