

7 Simulationsmethoden in Chemie und Physik

	Module	Modulnr.	ECTS
	3. Semester		
	Computergrundlagen	39320	6
WP	Einführung in die Molekulare Quantenmechanik	46800	6
	4. Semester		
	Physik auf dem Computer	40220	6
	5. Semester		
	Molekularsimulation	26410	6
	Computational Chemistry	102520	6
WP	Computational Biochemistry	35810	6
	6. Semester		
	Theoretische Physik für Lehramt II: Elektrodynamik und Thermodynamik	27700	9
	Molekulare Thermodynamik	28480	3



Prof. Johannes Kästner

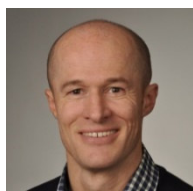
Institut für Theoretische Chemie
Pfaffenwaldring 55

www.uni-stuttgart.de/theochem/kaestner

Telefon: 685-64473

E-Mail: kaestner@theochem.uni-stuttgart.de

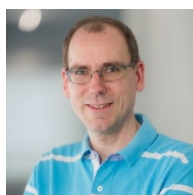
Weitere Ansprechpartner:



Prof. Joachim Groß

Institut für Technische Thermodynamik und Thermische
Verfahrenstechnik

E-Mail: joachim.gross@itt.uni-stuttgart.de



Prof. Niels Hansen

Institut für Technische Thermodynamik und Thermische
Verfahrenstechnik

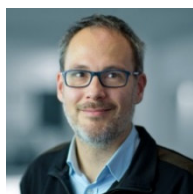
E-Mail: niels.hansen@itt.uni-stuttgart.de



Prof. Christian Holm

Institut für Computerphysik

E-Mail: christian.holm@icp.uni-stuttgart.de



Prof. Andreas Köhn

Institut für Theoretische Chemie

E-Mail: koehn@theochem.uni-stuttgart.de

Simulationsmethoden werden heutzutage standardmäßig in den Naturwissenschaften eingesetzt, um komplexe Probleme zu lösen, die analytisch nicht mehr zugänglich sind. Häufig werden Simulationsmethoden auch benötigt, um moderne Experimente analysieren und interpretieren zu können. Simulationsmethoden spielen daher sowohl in der Chemie, der Biologie, der Physik, wie auch immer mehr in der Verfahrenstechnik eine zunehmend wichtige Rolle.

In der Physik werden mit Hilfe von Simulationen Systeme wie Flüssigkeiten, viskoelastische Materialien wie Gummi, Polymere, Kolloide, biologische Materialien wie Zellmembranen oder DNA-Moleküle, Halbleiter und Metalle untersucht, aber auch die Bewegungen ganzer Galaxien werden simuliert, um die Gültigkeit von astrophysikalischen Modellen zu untersuchen. Eine große Rolle spielen hierbei die Molekulardynamik-Simulationen, bei denen die klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen diskretisiert gelöst werden, oder Monte Carlo Methoden, bei denen ein hochdimensionaler Raum, wie zum Beispiel die Zustandssumme eines physikalischen Systems, approximativ berechnet werden können.

Für SimTech-Studierende, die an der Physik interessiert sind, gibt es jeweils in den Semesterferien ein Treffen mit den anderen Interessierten am Institut für Computerphysik, bei der die zahlreichen, individuellen Möglichkeiten in der Physik besprochen werden. Wer an diesen Treffen teilnehmen möchte, melde sich bitte per E-mail bei Alexander Schlaich (schlaich@icp.uni-stuttgart.de).

Die Theoretische Chemie beschäftigt sich mit den Strukturen, Eigenschaften und Wechselwirkungen von einzelnen Molekülen, die das makroskopische Verhalten chemischer Stoffe beeinflussen. Die Molekülstruktur wird durch die Elektronenstruktur bestimmt. Da Elektronen sehr leichte Teilchen sind, müssen sie quantenmechanisch behandelt werden. Die Molekülorbitaltheorie beschreibt auf der Basis der Quantenmechanik die chemische Bindung und die elektronischen Zustände in Molekülen. Letztlich beruht die gesamte Systematik der Chemie auf der Quantenmechanik. Auch zwischenmolekulare Wechselwirkungen werden sehr stark von quantenmechanischen Effekten bestimmt. Das Wahlpflicht-Modul „Einführung in die molekulare Quantenmechanik“ gibt einen Überblick über die genannten Themen.

In den „Computergrundlagen“ lernen die Studierenden, mit dem grundlegenden Werkzeugen umzugehen, die für Computersimulationen in den Naturwissenschaften benötigt werden, wie beispielsweise Unix-Betriebssysteme, die im Umfeld des Hochleistungsrechnens eine zentrale Rolle spielen, desweiteren Werkzeuge zum Plotten von Daten und Funktionen oder zum wissenschaftlichen Textsatz, sowie auch die Programmiersprache Python.

Darauf aufbauend gibt das Modul „Physik auf dem Computer“ eine Einführung in die Grundlagen der numerischen Mathematik, die das mathematische Fundament für alle Simulationsmethoden in Physik und Chemie bildet.

Im Modul „Computational Chemistry“ werden die wichtigsten Methoden der Quantenchemie vorgestellt. Es werden zunächst wichtige quantenmechanische Methoden zur Berechnung der Elektronenstruktur vorgestellt, z. B. Hartree-Fock-Theorie, Dichtefunktionaltheorie, Møller-Plesset-Störungstheorie und Coupled-Cluster-Theorie. Im Rahmen eines Computer-Praktikums werden diese Methoden exemplarisch zur Berechnung verschiedenster Moleküleigenschaften und intermolekularer Wechselwirkungen eingesetzt. Dabei lernen die Studierenden mit einem umfangreichen Programmpaket umzugehen und makroskopisch messbare Eigenschaften wie z. B. Molekülspektren, thermodynamische Eigenschaften (z. B. Reaktionsenthalpien) oder Reaktionsgeschwindigkeiten zu berechnen. Abschließend werden auch quantenmechanisch-klassische Hybridverfahren für molekulardynamische Simulationen von z. B. Enzymreaktionen vorgestellt.

Die in den Naturwissenschaften am häufigsten verwendeten Simulationsmethoden sind die Molekulardynamik und die Monte-Carlo-Methode. Beide Methoden werden im Modul „Molekularsimulation“ ausgiebig eingeführt. Sie können zur Berechnung thermodynamischer Größen (z. B. Druck, Dichte, chemisches Potential) und zur Simulation von Transporteigenschaften und Phasengleichgewichten dienen.

Auf der Basis des Moduls „Computational Chemistry“ behandelt das Modul „Computational Biochemistry“ die Grundlagen zu Struktur und Eigenschaften von Proteinen sowie Methoden der bioinformatischen Analyse, der Modellierung und der Simulation von Biomolekülen. Außerdem lernen die Studierenden

Anwendungen dieser Methoden im Bereich der industriellen, der pharmazeutischen und der Nano-Biotechnologie kennen.

Das Modul „Theoretische Physik für Lehramt II: Elektrodynamik und Thermodynamik“ behandelt die Grundlagen der Physik, die bei Simulationen eine Rolle spielt. Während sich die Elektrodynamik mit den Eigenschaften und dem Verhalten elektrisch geladener Systeme befasst, ist die Thermodynamik zentral zum Verständnis und zur Interpretation von molekularen und atomaren Simulationen.

Im Modul „Molekulare Thermodynamik“ werden Zustandsgrößen und thermische Zustandsgleichungen vorgestellt. Störungstheorien werden eingeführt und angewandt, um die thermodynamischen Eigenschaften von Reinstoffen und Mischungen zu berechnen. Auch stark nicht-ideale Systeme mit polymeren oder Wasserstoffbrücken-bildenden Komponenten werden abgebildet. Die molekularen Methoden werden illustriert, indem Grenzflächeneigenschaften mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie, sowie Flüssigkristalle modelliert werden.

Weiterführung im Master-Studiengang

Module	Modulnr.	ECTS
1. Semester Master		
Simulation Methods in Physics for SimTech I	40520	6
Computergestützte Materialwissenschaft	11120	6
2. Semester Master		
Simulation Methods in Physics for SimTech II	38240	6
Molekulare Quantenmechanik (Forts. v. „Einführung in die molekulare Quantenmechanik“)	35860	6
Simulation Methods in Physics for SimTech III (Adv. Sim. Meth.)	56070	3
Advanced Theoretical Chemistry I	103060	6
High Performance Computing	42420	6
3. Semester Master		
Simulation Methods in Physics for SimTech III (ESPResSo Summer School)	56070	3
Advanced Theoretical Chemistry II	103080	6
Material design by ab-initio methods	69260	6

In der Chemie wird die Vorlesungsreihe „Advanced Theoretical Chemistry“ angeboten, in der verschiedene vertiefende Themen aus der aktuellen Theoretischen Chemie vorgestellt werden (Elektronenstrukturtheorie, Kernschwingungswellenfunktionen, Ratentheorien). Die Vorlesungsserie startet immer im Sommersemester, kann bei Bedarf aber recht gut auch in umgekehrter Reihenfolge gehört werden. Ein vorheriger Besuch des Moduls „Computational Chemistry“ (im Bachelor-Studium) wird empfohlen. Daneben wird, als Fortsetzung der „Einführung in die Molekulare Quantenmechanik“ die Vorlesung „Molekulare Quantenmechanik“ angeboten, welche vertiefte Aspekte der Quantenmechanik behandelt. Alle diese Vorlesungen sind auch Teil des Profils „Theory and Simulation in Chemistry“ im Masterstudiengang Chemie.

Im Modul „Simulation Methods in Physics for SimTech I“ werden die Grundlagen moderner teilchenbasierter Computersimulationen behandelt welche zum Verständnis moderner State-of-the-Art-Algorithmen zur Behandlung von klassischen und quantenmechanischen Systemen in der Physik benötigt werden. Diese Methoden werden in den beiden Modulen „Simulation Methods in Physics for SimTech II“ sowie „Simulation Methods in Physics for SimTech III“ eingehend vorgestellt. Das Modul „Simulation Methods in Physics for SimTech III“ erstreckt sich dabei über zwei Semester, wobei im Sommersemester die Veranstaltung „Advanced Simulation Methods“ eine gute Möglichkeit bietet, moderne Simulationsansätze auch praktisch einzusetzen. In der „ESPResSo Summer School“, welche den zweiten Teil des Moduls „Simulation Methods in Physics for SimTech III“ darstellt, wird die Simulationssoftware ESPResSo im Detail vorgestellt. Der einwöchige Blockkurs findet in der Regel eine Woche vor Beginn des Wintersemesters statt. Die Entwicklung

effizienter Simulationsmethoden erfordert außerdem aktuelle Programmier Techniken, die im Modul „High Performance Computing“ gelehrt werden.

Ergänzend können z. B. Vorlesungen aus dem Bereich der Materialwissenschaft belegt werden.