Modulbezeichnung			Kurzbezeichnung
Computational Materials Science			11-CMS-131-m01
Modulverantwortung		**anbietende Einrichtung**	
Geschäftsführende Leitung des Instituts für Theoretische Physik und Astrophysik		Fakultät für Physik und Astronomie	
ECTS	**Bewertungsart**	**zuvor bestandene Module**	
8	numerische Notenvergabe	--	
Moduldauer	**Niveau**	**weitere Voraussetzungen**	
1 Semester	weiterführend	Die Teilnahme an der Prüfung setzt das Erbringen von Prüfungsvorleistungen voraus. Details werden vom Dozenten bzw. von der Dozentin zu Veranstaltungsbeginn bekannt gegeben. Die Veranstaltungsanmeldung wird als Willenskundgebung zur Teilnahme an der Prüfung gewertet. Wurden im Semesterverlauf die geforderten Prüfungsvorleistungen erbracht, so vollzieht der Dozent bzw. die Dozentin die Prüfungsanmeldung. Die erbrachten Prüfungsvorleistungen erlauben die Prüfungsteilnahme im aktuellen Semester sowie in den Folgesemestern.	

Inhalte

Dichtefunktionale Theorie/Lokale Dichtenäherung (Übung mit "Wien2k" Bandstruktur-Programm), Greensche Funktionen, Quantenpunkte, Anderson Impurity Model (Übung, Implementierung der Exakten Diagonalisierung/Lanczos), Einführung in continuous-time quantum Monte Carlo (Übung), Kristallfeldsymmetrie, Coulomb Wechselwirkung, Dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT-Übung). Vorlesung + 4-5 Übungen im CIP-Pool. In den Übungen werden die Grundideen verschiedener Algorithmen implementiert entweder mit Hilfe der Template-Programme oder vollständig selbst geschriebenen Programmen. Elektronische Abgabe aller Übungen und ca. 20 min Vortrag über eines der 4-5 Themen der Vorlesung/Übung (vom Studenten freiwillig gewählt) mit kleiner Vertiefung des Themas im Vergleich zur Übung.

Qualifikationsziele / Kompetenzen

Der/Die Studierende verfügt über fortgeschrittene Kenntnisse mathematischer Methoden der Materialwissenschaften. Er/Sie ist in der Lage, Algorithmen zu deren Anwendung zu entwickeln und in Programmen zu implementieren.

Lehrveranstaltungen (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)

V + R (keine Angaben zu SWS und Sprache verfügbar)

Erfolgsüberprüfung (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)

a) Klausur (ca. 90 Min.) oder b) mündliche Einzel- oder Gruppenprüfung (ca. 30 Min. pro Person) oder c) Projektbericht (ca. 8-10 S., Bearbeitungsdauer 1-4 Wochen) oder d) Referat/Seminarvortrag (ca. 30 Min.)
Prüfungsturnus: Der Prüfungsturnus hängt von der Prüfungsart ab und wird in geeigneter Form unter Beachtung des § 32 Abs. 3 ASPO 2009 bekanntgegeben.
Prüfungssprache: Deutsch, Englisch

Platzvergabe

--

weitere Angaben

--

Arbeitsaufwand

--

Lehrturnus

--

Bezug zur LPO I

--

Verwendung des Moduls in Studienfächern
Master (1 Hauptfach) Physik (2010)
Master (1 Hauptfach) Physik (2011)
Master (1 Hauptfach) Nanostrukturtechnik (2011)
Master (1 Hauptfach) Nanostrukturtechnik (2010)
Master (1 Hauptfach) FOKUS Physik (2010)