

Modulbezeichnung		Kurzbezeichnung
Theoretische Modellvorstellungen in der Chemie		o8-TC-092-m01
Modulverantwortung		anbietende Einrichtung
Dozent/-in der Vorlesung "Quantenchemie"		Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
ECTS	Bewertungsart	zuvor bestandene Module
3	numerische Notenvergabe	--
Moduldauer	Niveau	weitere Voraussetzungen
1 Semester	grundständig	Prüfungsvorleistung: Korrekte Lösen von Aufgaben in den jeweiligen Übungen wie zu Veranstaltungsbeginn angekündigt (in der Regel 70% der gestellten Aufgaben) sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen (in der Regel max. zweimaliges unentschuldigtes Fehlen).
Inhalte		
Das Modul vertieft spezifische Inhalte der Quantenchemie. Als Schwerpunkte werden Spin, Pauli-Prinzip, Slater-Determinanten, Hartree-Fock-Verfahren, Korrelationsenergie, Konfigurationswechselwirkung und angeregte Zustände, Born-Oppenheimer-Näherung sowie Bindungsmodelle von H ₂ ⁺ betrachtet.		
Qualifikationsziele / Kompetenzen		
Die Studierenden sind in der Lage, mit Hilfe grundlegender Konzepte und Modelle angeregte Zustände von Molekülen zu beschreiben.		
Lehrveranstaltungen (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)		
V + Ü (keine Angaben zu SWS und Sprache verfügbar)		
Erfolgsüberprüfung (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)		
a) 1-3 Klausuren (1 Klausur: ca. 90 Min., 2 Klausuren: je ca. 60 oder 90 Min., 3 Klausuren: je ca. 60 Min.) oder b) mündliche Einzelprüfung (ca. 20 Min.) oder c) mündliche Gruppenprüfung (zu zweit ca. 30 Min.).		
Platzvergabe		
--		
weitere Angaben		
--		
Arbeitsaufwand		
--		
Lehrturnus		
--		
Bezug zur LPO I		
--		
Verwendung des Moduls in Studienfächern		
Bachelor (1 Hauptfach) Chemie (2010) Bachelor (1 Hauptfach) Chemie (2009) Bachelor (1 Hauptfach) Mathematik (2012) Bachelor (1 Hauptfach) Mathematik (2013) Bachelor (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2009) Bachelor (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2012) Bachelor (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2013) Bachelor (1 Hauptfach) FOKUS Chemie (2011)		