

<b>Modulbezeichnung</b>		<b>Kurzbezeichnung</b>
Theoretische Modellvorstellungen in der Chemie		o8-TC-141-m01
<b>Modulverantwortung</b>		<b>anbietende Einrichtung</b>
Dozent/-in der Vorlesung "Quantenchemie"		Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
<b>ECTS</b>	<b>Bewertungsart</b>	<b>zuvor bestandene Module</b>
3	numerische Notenvergabe	--
<b>Moduldauer</b>	<b>Niveau</b>	<b>weitere Voraussetzungen</b>
1 Semester	grundständig	--
<b>Inhalte</b>		
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 <sub>2</sub> <sup>+</sup> betrachtet.		
<b>Qualifikationsziele / Kompetenzen</b>		
Die Studierenden sind in der Lage, mit Hilfe grundlegender Konzepte und Modelle angeregte Zustände von Molekülen zu beschreiben.		
<b>Lehrveranstaltungen</b> (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)		
V + Ü (keine Angaben zu SWS und Sprache verfügbar)		
<b>Erfolgsüberprüfung</b> (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)		
Klausur (ca. 90-180 Min.) oder mündliche Einzelprüfung (ca. 20-30 Min.) oder mündliche Gruppenprüfung (zu zweit ca. 30 Min.). Prüfungssprache: Deutsch, Englisch		
<b>Platzvergabe</b>		
--		
<b>weitere Angaben</b>		
--		
<b>Arbeitsaufwand</b>		
--		
<b>Lehrturnus</b>		
--		
<b>Bezug zur LPO I</b>		
--		
<b>Verwendung des Moduls in Studienfächern</b>		
Bachelor (1 Hauptfach) Mathematik (2014) Bachelor (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2014)		