

## CHE-BSc-M 15

<b>1. Name des Moduls:</b>	Wahlpflichtmodul Theoretische Chemie
<b>2. Fachgebiet / Verantwortlich:</b>	Chemie / Prof. Dr. Martin Schütz
<b>3. Inhalte des Moduls:</b>	<u>Computerübungen mit dem ab initio Programmpaket MOLPRO: Z-Matrix Spezifizierung, einfache Elektronenstrukturrechnungen mit Hartree-Fock, DFT, und korrelierten Methoden, Geometrieoptimierungen, Normalkoordinatenanalyse, Visualisierung von Molekülorbitalen, Dichten, Normalmoden, Reaktionsenergien und -Enthalpien, MOLPRO Skript Codingand LINUX Commands, Berechnung von Reaktionspfaden, Dissoziation, angeregte Zustände mit einfachen Methoden (CIS, MCSCF), Solvatationseffekte (COSMO), intermolekulare Wechselwirkungen (BSSE, Grössenkonsistenz, etc.)</u>
<b>4. Qualifikationsziele des Moduls:</b>	Die Studenten erarbeiten sich die Kompetenz, grundlegende ab initio Elektronenstrukturrechnungen durchzuführen und auf chemische Fragestellungen anzuwenden. Für die Computerübungen wird das weitverbreitete Programmpaket MOLPRO verwendet, an dessen Entwicklung auch der Standort Regensburg massgeblich beteiligt ist. Die Computerübungen werden durch begleitende Seminare unterstützt, die die in der Theorievorlesung nicht behandelten Korrelationsverfahren qualitativ kurz erläutern.
<b>5. Teilnahmevoraussetzungen:</b>	
<b>a) empfohlene Kenntnisse:</b>	Grundlagen der Quantentheorie der Materie und der Theoretischen Chemie
<b>b) verpflichtende Nachweise:</b> sofort vorzulegen <input checked="" type="checkbox"/> nachzureichen bis <input type="checkbox"/>	CHE-BSc-M 11 „Struktur der Materie“
<b>6. Verwendbarkeit des Moduls:</b>	B. Sc. Chemie
<b>7. Angebotsturnus des Moduls:</b>	Jährlich, Blockveranstaltung in den Semesterferien zwischen WS und SS
<b>8. Dauer des Moduls:</b>	1 Semester
<b>9. Empfohlenes Fachsemester:</b>	5. oder 6. Fachsemester
<b>10. Gesamtarbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:</b>	270 Stunden / 9 Leistungspunkte* (105 h Präsenzzeit, 165 h Eigenstudium einschl. Prüfungsvorbereitung)

\*Die LP für das Modul werden erst nach Bestehen der Modulprüfung bzw. aller Modulteilprüfungen vergeben.

<b>11. Lehrveranstaltungen:</b>					
	<i>P / WP / W *</i>	<i>Lehrform</i>	<i>Themenbereich/Thema</i>	<i>Präsenzzeit in SWS o. Std.</i>	<i>Studienleistungen</i>
1	P	S+Ü	Theoretische Chemie Computerübungen		Protokoll
Bemerkungen					

\* P = Pflichtveranstaltung; WP = Wahlpflichtveranstaltung; W = Wahlveranstaltung

<b>12. Modulprüfung:</b>					
<i>A/T*</i>	<i>Art und Inhalt der Prüfung</i>	<i>Zulassungs- voraussetzung**</i>	<i>Dauer</i>	<i>Zeitpunkt</i>	<i>Art der Bewertung</i>
A	Verteidigung des Protokolls			Nach Abschluss des Seminars	benotet
Bemerkungen:					

\* A = Modulabschlussprüfung; T = Modulteilprüfung

\*\* optional

<b>13. Modulnote:</b>	
<input checked="" type="checkbox"/>	Die Modulnote entspricht der Note der Modulabschlussprüfung.
<input type="checkbox"/>	Die Modulnote setzt sich wie folgt zusammen:
<input type="checkbox"/>	Das Modul wird nicht benotet.

<b>14. Sonstiges:</b>
<p>Werden eine oder mehrere Modulteilprüfungen bzw. die Modulabschlussprüfung im ersten Wiederholungsversuch nicht bestanden, so steht dem Kandidaten ein zweiter Wiederholungsversuch zu. Die zweite Wiederholungsprüfung wird grundsätzlich als mündliche Modulabschlussprüfung (zu allen im Modul enthaltenen Lehrveranstaltungen) vor einem Prüfungsgremium aus mindestens zwei Prüfern abgehalten. Im Fall von einer oder mehreren zweimal nicht bestandenen Teilprüfungen fließt die Note der mündlichen Modulabschlussprüfung (2. Wiederholung) mit dem für die jeweilige Teilprüfung vorgesehenen Gewicht in die Modulnote ein. Wird die mündliche Modulabschlussprüfung nicht bestanden, so führt dies gemäß § 29 Abs. 4 Satz 1 Punkt 2 (PO des Bachelorstudiengangs Chemie vom 14.06.2010) zum endgültigen Nichtbestehen der Bachelorprüfung.</p>