

## CHE-MSc-M 05

<b>1. Name des Moduls:</b>	Grundmodul Theoretische Chemie
<b>2. Fachgebiet / Verantwortlich:</b>	Chemie / Prof. Dr. Martin Schütz
<b>3. Inhalte des Moduls:</b>	<p>Das Modul umfasst zwei Pflichtvorlesungen mit Übungen und ein Kurspraktikum (Computerübungen). Dabei werden die im Bachelor eingeführten Grundkenntnisse der theoretischen Chemie erweitert und vertieft.</p> <p>In den beiden Vorlesungen werden Elektronenstrukturmethoden wie Dichtefunktionaltheorie, Coupled Clusters, Störungstheorie, Multi-Referenzverfahren, sowie zeitabhängige Responsemethoden für elektronisch angeregte Zustände eingehend besprochen. Dazu notwendige theoretische Werkzeuge (zweite Quantisierung, Wick's Theorem, Diagrammverfahren) werden an entsprechender Stelle eingeführt, eingeübt, und dann verwendet. Im Kurspraktikum werden dann diese Methoden anhand des Programmpakets MOLPRO auf diverse exemplarische Problemstellungen angewandt. Des Weiteren implementieren die Studenten ein eigenes Hartree-Fock Programm (jeweils in FORTRAN, und MATLAB).</p>
<b>4. Qualifikationsziele des Moduls:</b>	<p>Ziel des Moduls ist es, den Studenten ein fundiertes Verständnis der diversen relevanten Elektronenstrukturmethoden, sowie deren Computerimplementierung zu vermitteln. Absolventen sind in der Lage, unter Verwendung der erlernten theoretischen Werkzeuge (z.B. Diagrammverfahren), Formalismen der Elektronenstrukturmethoden selber herzuleiten. Des Weiteren lernen sie Stärken, Schwächen, und Grenzen der einzelnen Methoden kennen und sind dementsprechend in der Lage, theoretische Arbeiten in der Literatur kritisch zu bewerten.</p>
<b>5. Teilnahmevoraussetzungen:</b>	
<b>a) empfohlene Kenntnisse:</b>	Kenntnisse der Theoretischen Chemie aus einem vorangegangenen grundständigen Chemiestudium oder einem verwandten Studiengang
<b>b) verpflichtende Nachweise:</b> sofort vorzulegen <input type="checkbox"/> nachzureichen bis <input type="checkbox"/>	keine
<b>6. Verwendbarkeit des Moduls:</b>	M.Sc. Chemie
<b>7. Angebotsturnus des Moduls:</b>	Jedes Semester

<b>8. Dauer des Moduls:</b>	2 Semester
<b>9. Empfohlenes Fachsemester:</b>	1. und 2. Fachsemester
<b>10. Gesamtarbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:</b>	480 Stunden / 16 Leistungspunkte* (180 h Präsenzzeit, 300 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	V + Ü	Vorlesung Theoretische Chemie I	3+1	
2	P	V + Ü	Vorlesung Theoretische Chemie II	3+1	
3	P	P	Kurspraktikum Theoretische Chemie	4	
Bemerkungen:					

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

<b>12. Modulprüfung:</b>					
<i>A/T*</i>	<i>Art und Inhalt der Prüfung</i>	<i>Zulassungsvoraussetzung**</i>	<i>Dauer</i>	<i>Zeitpunkt</i>	<i>Art der Bewertung</i>
A	Mündliche Modulabschlussprüfung über die in 11. angegebenen Lehrveranstaltungen	erfolgreicher Abschluss der in 11. angegebenen Lehrveranstaltungen	30 min		benotet
Bemerkungen: <b>Folgende Prüfungszeiträume werden angeboten:</b> <b>im Wintersemester: 1. September – 15. Dezember und 1. Februar – 31. März</b> <b>im Sommersemester: 1. Mai – 31. Mai und 1. Juli – 31. Juli</b>					

\* 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.	

#### **14. Sonstiges:**

Wird die Modulprüfung im ersten Wiederholungsversuch nicht bestanden, so steht dem Kandidaten ein zweiter Wiederholungsversuch zu. Die zweite Wiederholungsprüfung wird grundsätzlich als mündliche Modulgesamtprüfung vor einem Prüfungsgremium aus mindestens zwei Prüfern abgehalten. Im Falle einer zweiten Wiederholung entspricht die erreichte Note auch der Modulnote.