

[P.3] <i>Introduction to Theoretical Chemistry</i>	Grundlagen der Theoretischen Chemie	Pflichtmodul	6 CP (insg.) = 180 h						4 SWS
			Kontaktstudium: 4 SWS = 60 h	Selbststudium: 120 h					
Inhalte									
<p>Grundlagen der Quantentheorie: Wellenfunktion, Operatoren, zeitunabhängige und zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, Eigenwerte, Erwartungswerte, Superpositionsprinzip; einfache Eigenwertprobleme: Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, starrer Rotator, Wasserstoffatom; Grundlagen der chemischen Bindung: Born-Oppenheimer-Näherung, elektronische Schrödinger-Gleichung, Potentialflächen; einfache Behandlung von Molekülen mittels des LCAO-MO-Verfahrens (Linear Combination of Atomic Orbitals / Molecular Orbitals): H₂⁺-Molekül-Ion, H₂-Molekül, π-Elektronensysteme (Hückel-Verfahren); Mehrelektronensysteme: Pauliprinzip und Slater-Determinanten; elektrische Dipolübergänge: Störungstheorie, Übergangsmomente und -intensitäten.</p>									
Lernergebnisse / Kompetenzziele									
<p>Die Studierenden erlernen anhand einfacher Beispiele die Grundlagen der quantenmechanischen Beschreibung von Atomen und Molekülen. Durch selbstständiges Erarbeiten von Übungsaufgaben und deren Diskussion in Übungsgruppen wird der Stoff vertieft.</p> <p>Qualifikationsziel ist es, dass die Studierenden sowohl die formal-mathematische Vorgehensweise als auch die Konzepte der Quantenmechanik erlernen und diese auf chemisch relevante Probleme anwenden können.</p>									
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls									
Modul „Mathematische Verfahren zur Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme 2“									
Empfohlene Voraussetzungen									
Modul „Mathematische Verfahren zur Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme 1“									
Organisatorisches									
Die Bearbeitung der Übungsaufgaben, sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen wird dringend empfohlen.									
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)			B.Sc. Chemie / FB14						
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge			Wahlpflichtmodul: M.Sc. Bioinformatik, B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik, B.Sc. Mathematik, M.Sc. Mathematik / FB12; B.Sc. Geowissenschaften, M.Sc. Geowissenschaften / FB11						
Häufigkeit des Angebots			Einmal im Jahr (im Wintersemester)						
Dauer des Moduls			1 Semester						
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter			Prof. I. Burghardt						
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen									
Teilnahmenachweise			Keine						
Leistungsnachweise / Studienleistung			Keine						
Lehr- / Lernformen			Vorlesung, Übung						
Unterrichts- / Prüfungssprache			Deutsch						
Modulprüfung			Form / Dauer / ggf. Inhalt						
Modulabschlussprüfung bestehend aus:			Schriftliche Abschlussprüfung (Klausur 180 Min.)						
kumulative Modulprüfung bestehend aus:									
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:									
		LV-Form	SWS	Semester CP					
				1	2	3	4	5	6
	Theoretische Chemie I	V	3			4			
	Theoretische Chemie I	Ü	1			2			
	SUMME		4			6			