

NS-M06

Gültig ab WS13/14 bis (leer) / Bitte beachten Sie auch die Bemerkungen unter Punkt 13.

1. Name des Moduls:	Theoretische Chemie / Theoretical Chemistry
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Prof. Dr. Martin Schütz Chemie/Fakultät
3. Inhalte des Moduls:	In der Vorlesung werden Coupled Cluster Verfahren, Störungstheorie, sowie zeitabhängige Responsemethoden für elektronisch angeregte Zustände besprochen. Dazu notwendige theoretische Werkzeuge (zweite Quantisierung, Wick's Theorem, Diagrammverfahren) werden an entsprechender Stelle eingeführt, eingeübt, und dann verwendet. Im Kurzpraktikum werden dann diese Methoden anhand des Programmpakets MOLPRO auf diverse exemplarische Problemstellungen angewandt. Des Weiteren implementieren die Studenten ein eigenes Hartree-Fock Programm.
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	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.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Kenntnisse der Grundlagen der Theoretischen Chemie oder der Quantenmechanik (auf Bachelor-Niveau).
b) verpflichtende Nachweise:	Keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc. Nanoscience
7. Angebotsturnus des Moduls:	jährlich
8. Das Modul kann absolviert werden in:	1 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	1 bis 3
10. Gesamtaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 240 davon: 1. Präsenzzeit: 6 SWS 2. Selbststudium (inkl. Prüfungsvorbereitung/ Prüfung): 150 Std. Leistungspunkte: 8

NS-M06

gültig ab WS13/14 bis (leer)

Voraussetzung für die Vergabe der in Nr. 10 genannten Leistungspunkte ist das erfolgreiche Absolvieren aller in den Nrn. 11 und 12 aufgeführten Leistungen.

11. Modulbestandteile:

Nr	P/WP	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS/ Std.	Studienleistungen
NS-M0 6.1	Pflicht	Vorlesung Übung	Theoretische Chemie I	4	
NS-M0 6.2	Pflicht	Praktikum	Ausgewählte Versuche aus Kurspraktikum Theoretische Chemie	2	

12. Modulprüfung:

Nr	Kompetenz / Thema	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt / Bemerkungen	Anteil an Modulnote
NS-M0 6.1	Theoretische Chemie	Mündlich	30 Minuten	Im Prüfungszeitraum (frühestens nach Ende der Vorlesungszeit, spätestens in einem der Prüfungszeiträume des Folgesemesters). Prüfungsbestandteile sind alle Thema aus 11, Praktikum eingeschlossen.	100 %

13. Bemerkungen:

Folgende Prüfungszeiträume werden angeboten: im Wintersemester: 1. September – 15. Dezember und 1. Februar – 31. März; im Sommersemester: 1. Mai – 31. Mai und 1. Juli – 31. Juli