

[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						
<b>Inhalte</b>										
<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): H<sub>2</sub><sup>+</sup>-Molekül-Ion, H<sub>2</sub>-Molekül, <math>\pi</math>-Elektronensysteme (Hückel-Verfahren); Mehrelektronensysteme: Pauliprinzip und Slater-Determinanten; elektrische Dipolübergänge: Störungstheorie, Übergangsmomente und -intensitäten.</p>										
<b>Lernergebnisse / Kompetenzziele</b>										
<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>										
<b>Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls</b>										
Modul „Mathematische Verfahren zur Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme 2“										
<b>Empfohlene Voraussetzungen</b>										
Modul „Mathematische Verfahren zur Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme 1“										
<b>Dieses Modul ist Voraussetzung für:</b>										
5. Semester: P.5 Molekulare Spektroskopie										
<b>Organisatorisches</b>										
Die Bearbeitung der Übungsaufgaben, sowie die regelmäßige Teilnahme an den Übungen wird dringend empfohlen.										
<b>Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)</b>			B.Sc. Chemie / FB14							
<b>Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge</b>			Wahlpflichtmodul: M.Sc. Bioinformatik, B.Sc. Informatik, M.Sc. Informatik, B.Sc. Mathematik, M.Sc. Mathematik / FB12; B.Sc. Geowissenschaften, M.Sc. Geowissenschaften / FB11							
<b>Häufigkeit des Angebots</b>			Einmal im Jahr (im Wintersemester)							
<b>Dauer des Moduls</b>			1 Semester							
<b>Modulbeauftragte / Modulbeauftragter</b>			Prof. I. Burghardt							
<b>Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen</b>										
<b>Teilnahmenachweise</b>			Keine							
<b>Leistungsnachweise / Studienleistung</b>			Keine							
<b>Lehr- / Lernformen</b>			Vorlesung, Übung							
<b>Unterrichts- / Prüfungssprache</b>			Deutsch							
<b>Modulprüfung</b>			<b>Form / Dauer / ggf. Inhalt</b>							
<b>Modulabschlussprüfung bestehend aus:</b>			Schriftliche Abschlussprüfung (Klausur 180 Min.)							
<b>kumulative Modulprüfung bestehend aus:</b>										
<b>Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:</b>										
			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			