

Theoretische Chemie II: Moderne Themen der Theoretischen Chemie					TC II
Studiensem. 2-3	Regelstudiensem. 2-3	Turnus jährlich	Dauer 1 Semester	SWS 4	ECTS-Punkte 6

Modulverantwortliche/r	Stopkowicz
Dozent/inn/en	Stopkowicz
Zuordnung zum Curriculum [Pflicht, Wahlpflicht, Wahlbereich]	Masterstudium Chemie, Wahlpflicht
Zugangsvoraussetzungen	Vorlesung Quantenmechanik, empfohlen: Einführung in die Quantenchemie, Theoretische Chemie I
Zulassungsvoraussetzungen zur Modulprüfung	
Leistungskontrollen	mündliche Prüfungen zu den Lehrveranstaltungen
Lehrveranstaltungen / Methoden	Vorlesung + Übung: 2 V
Arbeitsaufwand	Vorlesungen/Übung: (8 Wochen, je 2 SWS) 120 h Zus. Vor- und Nachbereitung 60 h Summe 180 h 6 CP
Modulnote	Mündliche Prüfung zur Vorlesung

Lernziele / Kompetenzen

Aufbauend auf der Vorlesung TC I werden in diesem Modul quantenchemische Methoden behandelt, die über die Hartree-Fock Theorie hinausgehen und die dynamische und statische Elektronenkorrelation beschreiben. Die Studierenden haben detaillierte Kenntnisse zur Theorie moderner Methoden der Theoretischen Chemie und ihrer Einsatzgebiete. Sie sind in der Lage sich selbstständig in Fachliteratur einzuarbeiten. Sie können differenzierte Bewertungen zu Komplexität, Genauigkeit, Rechenaufwand und Durchführbarkeit bei computergestützten Berechnungen im Bereich der TC durchführen.

Inhalt

Vorlesung und Übung Theoretische Chemie 2: Moderne Themen der Theoretischen Chemie

- Fortgeschrittene quantenchemische Methoden
- Theoretische Beschreibung von Vielteilchensystemen: Zweite Quantisierung, Elektronenkorrelation

Weitere Informationen

Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch, nach Absprache mit den teilnehmenden Studierenden