

Modul: Quantenchemie			
Hochschule/Fachbereich/Institut: Freie Universität Berlin/Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie/Institut für Chemie und Biochemie			
Modulverantwortliche/r: Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
Zugangsvoraussetzungen: keine			
Qualifikationsziele: Die Studentinnen und Studenten kennen Grundlagen der quantitativen Beschreibung der Molekülstruktur mittels quantenmechanischer Methoden der Theoretischen Chemie. Sie kennen die physikalischen und mathematischen Prinzipien der entsprechenden Computerprogramme und können ihre Kenntnisse zur Lösung von Übungsaufgaben auch in der Gruppe anwenden.			
Inhalte: <i>Ab initio</i> - und semiempirische Verfahren der Quantenchemie, Hartree-Fock-Methode, Basissätze, Dichtefunktionaltheorie, Einführung in die Korrelationsmethoden, Potentialenergieflächen für chemische Reaktionen, Einführung in die zugrundeliegenden Algorithmen der gängigen Quantenchemieprogramme			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium Semesterwochen- stunden = SWS	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand Stunden
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 30
Übung	2	Lösen von Übungsaufgaben, Diskussionsbeiträge	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
Veranstaltungssprache		Deutsch oder Englisch	
Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme		Teilnahme wird empfohlen	
Arbeitszeitaufwand insgesamt		150 Stunden	5 LP
Dauer des Moduls		ein Semester	
Modulprüfung		Klausur (150 Minuten); die Klausur kann auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durch geführt werden.	
Häufigkeit des Angebots		jedes zweite Semester	
Verwendbarkeit		Masterstudiengang Chemie	