

<b>Modul:</b> Theoretische Chemie			
<b>Hochschule/Fachbereich/Institut:</b> Freie Universität Berlin/Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie/Institut für Chemie und Biochemie			
<b>Modulverantwortliche/r:</b> Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten kennen grundlegende Konzepte und Methoden der Theoretischen Chemie. Sie können zeitunabhängige und zeitabhängige quantenmechanische Methoden für ausgewählte Modellsysteme der Chemie anwenden und verfügen über die numerischen Fähigkeiten entsprechende Computersimulationen durchzuführen. Dadurch erlangen sie ein vertieftes Verständnis für Eigenschaften von Molekülen und chemischen Reaktionen.			
<b>Inhalte:</b> Vertiefende mathematische Darstellung der zeitunabhängige und zeitabhängige Quantenmechanik, Lösen von quantenmechanischen Ein-Teilchen-Problemen (freies Teilchen, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom), Kerndynamik (Schwingung und Rotation), Kernschwingungen mehratomiger Moleküle, zeitabhängige und zeitunabhängige Störungsrechnung, ausgewählte numerische Lösungsverfahren zur Berechnung von zeitabhängigen			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochen- stunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü
Übung	1	Diskussionsbeteiligung, Präsentation ausgewählter Simulationsergebnisse	<i>betreute Computerübung</i> 15 <i>Selbststudium am Rechner</i> 15 Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Veranstaltungssprache</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme</b>		Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen, Übung: ja	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls</b>		ein Semester	
<b>Modulprüfung</b>		praktische Prüfung (Simulation am Computer)	
<b>Häufigkeit des Angebots</b>		einmal jährlich	
<b>Verwendbarkeit</b>		Bachelorstudiengang Chemie	