

Modul: Quantenchemische Korrelationsmethoden			
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 haben detaillierte Kenntnisse der theoretischen Grundlagen der quantenchemischen Korrelationsmethoden. Sie kennen quantenchemische Programmpakete, können quantenchemische Korrelationsrechnungen für einfache Systeme selbständig durchführen und berechnete Daten computerunterstützt visualisieren.			
Inhalte: Molekül-Hamiltonoperator und elektronische Wellenfunktion, Gauß-Basisätze und Pseudopotentiale, die Hartree-Fock Theorie und darauf aufbauenden Korrelationsmethoden. Einführung in quantenchemische Programmpakete und computergestützte Visualisierung der berechneten Daten.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium Semesterwochen- stunden = SWS	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand Stunden
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30
Seminar am PC mit Anwendung von Spezialsoftware	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben und Computersimulationen	Präsenzzeit SPC 30 Vor- und Nachbereitung SPC 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
Veranstaltungssprache		Deutsch oder Englisch	
Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme		Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen, Seminar: ja	
Arbeitszeitaufwand insgesamt		150 Stunden	5 LP
Dauer des Moduls		ein Semester	
Modulprüfung		praktische Prüfung (Simulation am Computer)	
Häufigkeit des Angebots		jedes dritte Semester	
Verwendbarkeit		Masterstudiengang Chemie	