

Modul: Relativistische 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 haben Kenntnisse in der Relativitätstheorie und ihrer Auswirkungen auf die elektronische Struktur von Molekülen. Sie können einfache quantenchemische Rechnungen relativistisch durchführen und kennen verschiedenen Näherungsmethoden der relativistischen Quantenchemie.			
Inhalte: Spezielle Relativitätstheorie, Quantisierung und Spin, Dirac-Gleichung für Ein- und Mehrelektronensystemen, Methoden der relativistischen Quantenchemie, relativistische Pseudopotentiale.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium Semesterwochen- stunden = SWS	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand Stunden
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit SPC 30
Seminar am PC mit Anwendung von Spezialsoftware	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben und Computersimulationen	Vor- und Nachbereitung SPC 30 Prüfungsvorbereitung und -bearbeitung 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		unregelmäßig	
Verwendbarkeit		Masterstudiengang Chemie	