Modulbeschreibung
21-M34 Theoretische Chemie - Vertiefung

Fakultät für Chemie

Version vom 01.11.2026

Dieses Modulhandbuch gibt den derzeitigen Stand wieder und kann Änderungen unterliegen. Aktuelle Informationen und den jeweils letzten Stand dieses Dokuments finden Sie im Internet über die Seite

https://ekvv.uni-bielefeld.de/sinfo/publ/modul/26792713

Die jeweils aktuellen und gültigen Regelungen im Modulhandbuch sind verbindlich und konkretisieren die im Verkündungsblatt der Universität Bielefeld veröffentlichten Fächerspezifischen Bestimmungen.

21-M34 Theoretische Chemie - Vertiefung

Fakultät

Fakultät für Chemie

Modulverantwortliche*r

apl. Prof. Dr. Wolfgang Eisfeld

Prof. Dr. Uwe Manthe

Turnus (Beginn)

Jedes Wintersemester

Leistungspunkte

10 Leistungspunkte

Kompetenzen

Die Veranstaltung vermittelt ein vertieftes Verständnis der Theorie des Molekülbaus und der chemischen Bindung und führt in die Möglichkeiten, die die numerische theoretische Chemie bei der Beschreibung chemischer Probleme bietet, ein. Zudem vermittelt die Veranstaltung wichtige allgemeine Fähigkeiten, die durch die Auseinandersetzung mit theoretischen Fragestellungen geschult werden. Dies sind insbesondere die Abstraktion konkreter Problemstellungen und ihre systematische Zuordnung zu bekannten Problemgruppen sowie die Anwendung abstrakter Konzepte auf konkrete Fragestellungen.

Lehrinhalte

Das Modul behandelt die elektronische Struktur von Atomen und Molekülen und führt in numerische Methoden ein. Das Konzept der theoretischen Beschreibung von Mehrteilchensystemen in der Quantenmechanik wird eingeführt. Approximative Ansätze zur Beschreibung von Mehrteilchensystemen werden besprochen und auf einfache atomare und molekulare Beispielsysteme angewandt. Die Natur der chemischen Bindung wird diskutiert. In die computerbasierte praktische Arbeit mit grundlegenden numerischen Verfahren der theoretischen Chemie wird eingeführt.

Empfohlene Vorkenntnisse

–

Notwendige Voraussetzungen

Vorausgesetzte Module:
21-M23: Theoretische Chemie

Im Masterstudiengang "Naturwissenschaftliche Informatik" gilt diese Voraussetzung mit dem erfolgreichen Masterzugang als erbracht.

Erläuterung zu den Modulelementen

Modulstruktur: 1 SL, 1 bPr [1]

Veranstaltungen

Titel	Art	Turnus	Workload [5]	LP[2]
Computational Chemistry I *Diese Veranstaltung setzt sich aus Vorlesung (15h Präsenzzeit) und Computerübung/Praktikum (45h Präsenzzeit) zusammen.*	Vorlesung mit Übungsanteil	WiSe	150 h (60 + 90)	5 [SL]
Theoretische Chemie II *Diese Veranstaltung setzt sich aus Vorlesung (30h Präsenzzeit) und Übungen (30h Präsenzzeit) zusammen.*	Vorlesung mit Übungsanteil	WiSe	150 h (60 + 90)	5

Studienleistungen

Zuordnung Prüfende	Workload	LP[2]
Lehrende der Veranstaltung **Computational Chemistry I (Vorlesung mit Übungsanteil)** *Bearbeiten von Aufgaben am Computer und einer Ergebnisdokumentation in Form eines Protokolls.*	siehe oben	siehe oben

Prüfungen

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP[2]
Modulverantwortliche*r prüft oder bestimmt Prüfer*in *30 - 45 Minuten* *Die Modulprüfung wird durch eine Lehrende oder einen Lehrenden der Vorlesungen abgenommen.*	mündliche Prüfung	1	-	-

Legende

1 Die Modulstruktur beschreibt die zur Erbringung des Moduls notwendigen Prüfungen und Studienleistungen.

2 LP ist die Abkürzung für Leistungspunkte.

3 Die Zahlen in dieser Spalte sind die Fachsemester, in denen der Beginn des Moduls empfohlen wird. Je nach individueller Studienplanung sind gänzlich andere Studienverläufe möglich und sinnvoll.

4 Erläuterungen zur Bindung: "Pflicht" bedeutet: Dieses Modul muss im Laufe des Studiums verpflichtend absolviert werden; "Wahlpflicht" bedeutet: Dieses Modul gehört einer Anzahl von Modulen an, aus denen unter bestimmten Bedingungen ausgewählt werden kann. Genaueres regeln die "Fächerspezifischen Bestimmungen" (siehe Navigation).

5 Workload (Kontaktzeit + Selbststudium)

SoSe Sommersemester

WiSe Wintersemester

SL Studienleistung

Pr Prüfung

bPr Anzahl benotete Modul(teil)prüfungen

uPr Anzahl unbenotete Modul(teil)prüfungen