Modulbeschreibung
21-M35 Theoretische Chemie - Spezialisierung

Fakultät für Chemie

Version vom 03.11.2026

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/26792714

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

21-M35 Theoretische Chemie - Spezialisierung

Fakultät

Fakultät für Chemie

Modulverantwortliche*r

apl. Prof. Dr. Wolfgang Eisfeld

Prof. Dr. Uwe Manthe

Turnus (Beginn)

Jedes Sommersemester

Leistungspunkte

5 Leistungspunkte

Kompetenzen

In der Veranstaltung wird der Umgang mit quantenchemischen Rechenmethoden erlernt. Sie vermittelt Basiswissen, das die Grundlage für Forschungsarbeiten (z.B. im Rahmen einer Bachelorarbeit), die theoretisch-chemische Aspekte beinhalten, bildet. Zudem werden weitergehende Kenntnisse im Umgang mit computerbasierten Lösungsstrategien erworben.

Lehrinhalte

Das praktische Erlernen quantenchemischer Methoden, ihre Anwendung auf chemische Problemstellungen und der kritische Umgang mit diesen Techniken ist zentraler Inhalt des Moduls.

Empfohlene Vorkenntnisse

Die Kenntnisse aus Modul Theoretische Chemie - Vertiefung (Modul 21-M34) werden erwartet.

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 II *Diese Veranstaltung setzt sich aus Vorlesung (15h Präsenzzeit) und Computerübungen/Praktikum (45h Präsenzzeit) zusammen.*	Vorlesung mit Übungsanteil	SoSe	150 h (60 + 90)	5 [SL] [Pr]

Studienleistungen

Zuordnung Prüfende	Workload	LP[2]
Lehrende der Veranstaltung **Computational Chemistry II (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]
Lehrende der Veranstaltung **Computational Chemistry II (Vorlesung mit Übungsanteil)** *30 - 45 Minuten*	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