

# Modulbeschreibung 21-M-C10 Numerische Methoden in der Chemie

Fakultät für Chemie

*Version vom 31.01.2026*

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/27675908>

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

## 21-M-C10 Numerische Methoden in der Chemie

---

### Fakultät

---

Fakultät für Chemie

### Modulverantwortliche\*r

---

Prof. Dr. Uwe Manthe

### Turnus (Beginn)

---

Jedes Wintersemester

### Leistungspunkte

---

5 Leistungspunkte

### Kompetenzen

---

Die Veranstaltung soll die Teilnehmer in die Lage versetzen, eigenständig Computerprogrammen der Theoretischen Chemie für vielfältige Anwendungen in allen Bereichen der Chemie sinnvoll nutzen zu können. Neben dieser fachspezifischen Fähigkeit schult das Modul auch allgemeine Fähigkeiten im Bereich der Informatik, die eine Grundlage für das Arbeiten im Computerpraktikum sind. Diese Fähigkeiten sind eine wertvolle Qualifikation in vielen Berufsfeldern.

### Lehrinhalte

---

Das Modul führt in die praktische Anwendung theoretisch-chemischer Methoden ein. Numerische Verfahren und ihre praktische Anwendung werden erläutert und die Studierenden mit der Nutzung typischer Programme der Computerchemie vertraut gemacht. Möglichkeiten und Grenzen der verschiedenen Verfahren der theoretischen Chemie werden an Hand konkreter Fallbeispiele untersucht. Die Lehrveranstaltungen dieses Moduls sind Vorlesung und Praktikum. Die Vorlesung begleitet das Praktikum und erläutert die theoretischen Grundlagen der numerischen Verfahren, die im Praktikum Anwendung finden. Die Praktikumsversuche üben die konkrete Anwendung der Methoden ein und zeigen an Beispielen Möglichkeiten und Grenzen der Methoden auf. Ziel ist es, die Teilnehmer in die Lage zu versetzen, eigenständig Computerprogramme der Theoretischen Chemie für vielfältige Anwendungen in allen Bereichen der Chemie sinnvoll nutzen zu können.

### Empfohlene Vorkenntnisse

---

Kenntnisse, die dem Modul "Theoretische Chemie II" im Bachelor-Studiengang Chemie der Universität Bielefeld entsprechen.

### Notwendige Voraussetzungen

---

—

### Erläuterung zu den Modulelementen

---

Modulstruktur: 1 uPr<sup>1</sup>

## Veranstaltungen

Titel	Art	Turnus	Workload <sup>5</sup>	LP <sup>2</sup>
Numerische Methoden	Vorlesung mit Übungsanteil	WiSe	120 h (60 + 60)	4 [Pr]

## Prüfungen

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP <sup>2</sup>
<p>Lehrende der Veranstaltung <b>Numerische Methoden (Vorlesung mit Übungsanteil)</b></p> <p><i>Portfolio aus Übungsaufgaben</i></p> <p><i>Eine Übungsaufgabe besteht aus der Bearbeitung der Aufgabenstellung und einer schriftlichen oder mündlichen Präsentation des Lösungsweges und des Ergebnisses.</i></p>	Portfolio	unbenotet	30h	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. Genauer 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