Modulbeschreibung 21-M-C11 Quantenchemie

Fakultät für Chemie

Version vom 11.11.2026

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/27675909

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

21-M-C11 Quantenchemie

Fakultät

Fakultät für Chemie

Modulverantwortliche*r

Prof. Dr. Uwe Manthe

Turnus (Beginn)

Jedes Sommersemester

Leistungspunkte

5 Leistungspunkte

Kompetenzen

Die Veranstaltung soll die Teilnehmer in die Lage versetzten, 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 Beispiele Möglichkeiten und Grenzen der Methoden auf. Ziel ist es, die Teilnehmer in die Lage zu versetzten, 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" der Bachelor-Varianten Chemie der Universität Bielefeld entsprechen.

Notwendige Voraussetzungen

Vorausgesetzte Module:
21-M-C10: Numerische Methoden in der Chemie

Erläuterung zu den Modulelementen

Modulstruktur: 1 uPr [1]

Veranstaltungen

Titel	Art	Turnus	Workload [5]	LP[2]
Quantenchemie	Vorlesung mit Übungsanteil	SoSe	120 h (60 + 60)	4 [Pr]

Prüfungen

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP[2]
Lehrende der Veranstaltung **Quantenchemie (Vorlesung mit Übungsanteil)** *Portfolio aus Übungaufgaben* *Eine Übungsaufgabe besteht aus der Bearbeitung der Aufgabenstellung und einer schriftlichen oder mündlichen Präsentation des Lösungsweges und des Ergebnisses.*	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. 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