Modulbeschreibung 21-M-C7.1 Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

Fakultät für Chemie

Version vom 22.11.2026

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/27675931

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

21-M-C7.1 Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

Fakultät

Fakultät für Chemie

Modulverantwortliche*r

Prof. Dr. Uwe Manthe

Turnus (Beginn)

Jedes Wintersemester

Leistungspunkte

10 Leistungspunkte

Kompetenzen

Das Modul behandelt die theoretischen Grundlagen der Beschreibung atomarer und molekularer Systeme. Vorhandene Grundkenntnisse der Theoretischen Chemie werden vertieft und erweitert. Dies soll die Studierenden befähigen, Fragenstellungen der Forschung im Bereich der Theoretischen Chemie zu verstehen. Die in diesem Modul erworbenen Kenntnisse bilden die Grundlage für mögliche eigene Forschungsarbeiten in diesem Bereich.
Neben der Vertiefung der Kenntnisse in Theoretischer Chemie schult die Veranstaltungen wichtige allgemeine Fähigkeiten, die durch die Auseinandersetzung mit theoretischen Fragestellungen erworben werden in vertiefter Form. Dies sind insbesondere die Abstraktion konkreter Problemstellungen und die Anwendung abstrakter Konzepte auf konkrete Fragestellungen. Die vertiefte Schulung theoretisch-analytischer Fähigkeiten vermittelt eine, für die spätere berufliche Tätigkeit zentrale, allgemeine Qualifikation.

Lehrinhalte

Die Veranstaltung "Reaktionsdynamik und Spektroskopie" behandelt die Dynamik chemischer Systeme. Themen sind u. a. Translations-, Rotations- und Schwingungszustände realer Moleküle, Licht-Molekül-Wechselwirkung und Spektroskopie, die mikroskopische Beschreibung chemischer Reaktionen sowie nichtadiabatische elektronische Übergänge. Anhand dieser Themen wird einerseits der Bezug der Theorie zu konkreten Experimenten hervor gearbeitet, andererseits werden weiterführende theoretische Konzepte und Begriffe, z.B. Dichtematrizen und Korrelationsfunktionen, eingeführt. Die Lehrveranstaltungen dieses Moduls sind Vorlesung und Übungen. In den Übungen werden die Studierenden in kleinen Arbeitsgruppen individuell betreut. Für den Lernerfolg ist das enge Ineinandergreifen von Vorlesung und Übungen von zentraler Bedeutung. Die Vorlesung vermittelt die theoretischen Grundlagen und stellt die Arbeitstechniken vor. Von entscheidender Bedeutung ist allerdings, dass Studierende diese Kenntnisse nicht nur passiv aufnehmen, sondern auch aktiv auf Problemstellungen anwenden können. Diese Kompetenz bei der Behandlung theoretischer Fragestellungen wird an Hand konkreter Übungsaufgaben in den Übungsgruppen geschult. Zudem erleichtert die konkrete Anwendung der erlernten Techniken und Begriffe das Verständnis des abstrakteren Vorlesungsstoffs.
In den begleitetenden Übungen "Spezielle Fragen der Theoretischen Chemie A" werden weiterführende Fragestellungen behandelt, die den Bezug des behandelten Stoffes zu aktuellen Forschungsprojekten in verschiedenen Bereichen aufzeigen und entsprechende konkrete Fragen der Teilnehmer beantworten.

Empfohlene Vorkenntnisse

Voraussetzung für die Teilnahme sind Kenntnisse, die dem Modul 21-M34 "Theoretische Chemie - Vertiefung" im Bachelor-Studiengang Chemie der Universität Bielefeld entsprechen.

Notwendige Voraussetzungen

–

Erläuterung zu den Modulelementen

Modulstruktur: 1 bPr [1]

Veranstaltungen

Titel	Art	Turnus	Workload [5]	LP[2]
Fortgeschrittene Theoretische Chemie A: Reaktionsdynamik und Spektroskopie	Vorlesung mit Übungsanteil	WiSe	210 h (60 + 150)	7 [Pr]
Spezielle Fragen zur Fortgeschrittenen Theoretischen Chemie A	Übung	WiSe	30 h (15 + 15)	1

Prüfungen

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP[2]
Lehrende der Veranstaltung **Fortgeschrittene Theoretische Chemie A: Reaktionsdynamik und Spektroskopie (Vorlesung mit Übungsanteil)** *30 - 45 Minuten*	mündliche Prüfung	1	60h	2

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