

# Modulbeschreibung 21-M-C7.2 Fortgeschrittene Theoretische Chemie B

Fakultät für Chemie

*Version vom 23.04.2026*

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/27675932>

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

## **21-M-C7.2 Fortgeschrittene Theoretische Chemie B**

---

### **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 Veranstaltung 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 "Spezielle theoretische Methoden" behandelt theoretische Verfahren der Theoretischen Chemie, die zur Beschreibung komplexer Systeme notwendig sind. Numerische Techniken der Theoretischen Chemie werden eingeführt und anhand spezieller Beispiele wird ihre Anwendung illustriert. Ein Schwerpunkt sind dabei spezielle Verfahren zur Behandlung von Korrelationseffekten in Vielteilchensystemen.

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 aktive 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 begleitenden Übungen "Spezielle Fragen der Theoretischen Chemie B" 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<sup>1</sup>

## Veranstaltungen

---

Titel	Art	Turnus	Workload <sup>5</sup>	LP <sup>2</sup>
Fortgeschrittene Theoretische Chemie B: Spezielle theoretische Methoden	Vorlesung mit Übungsanteil	WiSe	210 h (60 + 150)	7 [Pr]
Spezielle Fragen zur Fortgeschrittenen Theoretischen Chemie B: Spezielle theoretische Methoden	Übung	WiSe	30 h (15 + 15)	1

## Prüfungen

---

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP <sup>2</sup>
Lehrende der Veranstaltung <b>Fortgeschrittene Theoretische Chemie B: Spezielle theoretische Methoden (Vorlesung mit Übungsanteil)</b>  <i>30 - 45 Minuten</i>	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