

---

# pb266 - Quantenchemie - Grundlagen und Programmentwicklung

**Modulbezeichnung**

**Modulkürzel**

**Kreditpunkte**

**Workload**

**Verwendbarkeit des Moduls**

Quantenchemie - Grundlagen und Programmentwicklung

pb266

6.0 KP

180 h

()

- Fach-Bachelor Betriebswirtschaftslehre mit juristischem Schwerpunkt (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Biologie (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Chemie (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Comparative and European Law (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Engineering Physics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Informatik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Interkulturelle Bildung und Beratung (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Mathematik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Nachhaltigkeitsökonomik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Pädagogik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Pädagogisches Handeln in der Migrationsgesellschaft (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Physik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Physik, Technik und Medizin (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Sozialwissenschaften (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Umweltwissenschaften (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Wirtschaftsinformatik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Fach-Bachelor Wirtschaftswissenschaften (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Anglistik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Biologie (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Chemie (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Elementarmathematik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Ev. Theologie und Religionspädagogik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Gender Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Germanistik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Geschichte (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Informatik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Interdisziplinäre Sachbildung (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Kunst und Medien (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Materielle Kultur: Textil (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie

- Zwei-Fächer-Bachelor Mathematik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Musik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Niederdeutsch (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Niederlandistik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Ökonomische Bildung (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Pädagogik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Philosophie / Werte u. Normen (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Physik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Politik-Wirtschaft (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Slavistik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Sonderpädagogik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Sozialwissenschaften (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Sportwissenschaft (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Technik (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Zwei-Fächer-Bachelor Wirtschaftswissenschaften (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Klüner, Thorsten (Modulverantwortung)
- Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt)

#### Zuständige Personen

#### Teilnahmevoraussetzungen Kompetenzziele

#### Modulinhalte

Die Studierenden erwerben vertiefte Kenntnisse in der Theoretischen Chemie. Sie beherrschen moderne Algorithmen der Quantenchemie und sind in der Lage, quantenchemische Software zu entwickeln. Es werden moderne Methoden zur Lösung der elektronischen Schrödingergleichung für Atome und Moleküle vorgestellt. Die in der Vorlesung und den Übungen erworbenen Kenntnisse werden im Theoretikum vertieft. Hier wird de novo Fortran-Programm im Rahmen einer wohldefinierten Näherungshierarchie beginnend mit Hartree-Fock entwickelt. Nach einer Performanceoptimierung erfolgt die Anwendung auf einfache Atome und zweiatomige Moleküle.

#### Literaturempfehlungen

Cook: Handbook of Computational Quantum Chemistry

Jensen: Introduction to Computational Chemistry

Szabo, Ostlund: Modern Quantum Chemistry

#### Links

**Unterrichtsprachen**  
**Dauer in Semestern**  
**Angebotsrhythmus Modul**  
**Aufnahmekapazität Modul**  
**Modulart**  
**Lehr-/Lernform**  
**Vorkenntnisse**

1 Semester  
jährlich  
10  
je nach Studiengang Pflicht oder Wahlpflicht  
VL, Ü, PR  
Fortran, Quantenmechanik, Quantenchemie

Prüfung  
**Gesamtmodul**

Prüfungszeiten  
In den Semesterferien entsprechend separater  
Ankündigung

Prüfungsform

1 fachpraktische Übung (Programmieraufgabe mit mündl. Kurzprüfung (max. 30 Min.))

**Lehrveranstaltungsform**

Seminar

---

**SWS**

**Angebotsrhythmus**

--

**Workload Präsenzzeit**

120 h