
pb266 - Quantenchemie - Grundlagen und Programmentwicklung

Module label

Modulkürzel

Credit points

Workload

Verwendbarkeit des Moduls

Quantenchemie - Grundlagen und Programmentwicklung

pb266

6.0 KP

180 h

()

- Bachelor's Programme Biology (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Business Administration and Law (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Business Informatics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Chemistry (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Comparative and European Law (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Computing Science (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Economics and Business Administration (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Engineering Physics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Environmental Science (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Intercultural Education and Counselling (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Mathematics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Physics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Physics, Engineering and Medicine (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Social Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Bachelor's Programme Sustainability Economics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Art and Media (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Biology (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Chemistry (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Computing Science (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Dutch Linguistics and Literary Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Economic Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Economics and Business Administration (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Elementary Mathematics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme English Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme Gender Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme General Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme German Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie
- Dual-Subject Bachelor's Programme History (Bachelor) >

	Fachnahe Angebote Chemie • Dual-subject bachelor's programme Low German (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Material Culture: Textiles (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Mathematics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Music (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Philosophy / Values and Norms (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Physics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Politics-Economics (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Protestant Theology and Religious Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Slavic Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Social Studies (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Special Needs Education (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Sport Science (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Dual-Subject Bachelor's Programme Technology (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Fach-Bachelor Pädagogisches Handeln in der Migrationsgesellschaft (Bachelor) > Fachnahe Angebote Chemie • Klüner, Thorsten (module responsibility) • Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt)	
Zuständige Personen		
Prerequisites		
Skills to be acquired in this module	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 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.	
Module contents		
Literatureempfehlungen	Cook: Handbook of Computational Quantum Chemistry Jensen: Introduction to Computational Chemistry Szabo, Ostlund: Modern Quantum Chemistry	
Links		
Languages of instruction		
Duration (semesters)	1 Semester	
Module frequency	jährlich	
Module capacity	10	
Type of module	je nach Studiengang Pflicht oder Wahlpflicht	
Teaching/Learning method	VL, Ü, PR	
Previous knowledge	Fortran, Quantenmechanik, Quantenchemie	
Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	In den Semesterferien entsprechend separater Ankündigung	1 fachpraktische Übung (Programmieraufgabe mit mündl. Kurzprüfung (max. 30 Min.))
Lehrveranstaltungsform	Seminar	

SWS	
Frequency	--
Workload Präsenzzeit	120 h