

MNF-chem5012	Quantenmechanik in Theoretischer Chemie		
Semesterlage / Dauer	Angebot jährlich, Beginn im Sommersemester Dauer: 1 Semester		
Modulverantwortliche(r)	Prof. Dr. Dassia Egorova Telefon 0431-880-7741, Email: egorova@phc.uni-kiel.de		
Studiengang / -gänge	B.Sc. Chemie: 4. - 6. Fachsemester B.Sc. Physik: 4. - 6. Fachsemester Andere Fachrichtungen nach Absprache	Wahl	
Beratung zum Modul	Prof. Dr. Dassia Egorova Telefon 0431-880-7741, Email: egorova@phc.uni-kiel.de		
Lehrveranstaltungen	Bezeichnung der Lehrveranstaltung / Lehrende(r)	SWS	Status
	Vorlesung/Übung	2 SWS	Pflicht
	Seminar/Praktikum	2 SWS	Pflicht
Zahl der Plätze	20		
Lehrsprache	Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden)		
Arbeitsaufwand	Präsenzstudium: 48 h		
	Selbststudium: 102 h		
Leistungspunkte	5		
Voraussetzungen	keine		
Erwünschte Vorkenntnisse	Grundlagen der Quantenmechanik (z.B. MNF-chem0304); lineare Algebra (z.B. MNF-chem0202)		
Lernziele	Auffassung der quantenmechanische Beschreibung der Materie als Grundlage der Methoden Theoretischer Chemie. Erweiterung des Horizonts im Bereich Theoretische Chemie. Erwerbung praktischer Erfahrung in quantenchemischen Rechnungen.		
Lehrinhalte	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung/Übung: ausführliche Betrachtung der grundlegenden Konzepten der Quantenmechanik, mit dem Fokus auf Grundlagen der Quantenchemie und der Quantendynamik. Insbesondere: stationäre Schrödinger Gleichung und Eigenwertproblem, zeitabhängige Schrödinger Gleichung; Wasserstoffatom und Atomorbitale, LCAO und lineare Variationsrechnung in Hartree-Fock, Elektronenspin und Slater-Determinanten; • Praktikum: einfache quantenchemische Rechnungen, Basissätze • Seminar: Vorträge der Studierenden zu historischen und aktuellen Themen der Theoretischen Chemie 		
Schlüsselqualifikationen	Verständnis der theoretischen Grundlagen der Quantenchemie (Hartree-Fock) und der Quantendynamik. Selbständiger Umgang mit Computerprogrammen der Quantenchemie.		
Prüfung(en)	Prüfungsleistungen: <ul style="list-style-type: none"> • Kurztest zur Vorlesung/Übung • selbständige Bearbeitung der Aufgaben des Praktikums • schriftlicher Bericht zum Praktikum oder Seminarvortrag 		
	Prüfungstermin: Zu Ende der Lehrveranstaltung 1. Wiederholungstermin: Vor Beginn der Vorlesungszeit des folgenden Semesters 2. Wiederholungstermin: Nach Ende der Vorlesungszeit des folgenden Semesters		
	Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden)		
	Benotung: Modulnote ergibt sich aus 1/3 Kurztestnote + 1/3 Praktikumsnote + 1/3 Vortrags-/Praktikumsberichtsnote		
Literaturangaben	<ul style="list-style-type: none"> • P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics • I.N. Levine, Quantum Chemistry • A.S. Davydov, Quantum Mechanics • F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry • Review-Artikel und Einzelpublikationen nach Angabe der Dozenten; 		
weitere Angaben	Anmeldung per Email, spätestens 1 Woche vor dem Vorlesungsbeginn		