

MScMAT-NF-CHE-M5

1. Name des Moduls:	Physikalisch-theoretische Chemie im Master Mathematik
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Fakultät für Chemie und Pharmazie/Studiendekan der Chemie
3. Inhalte des Moduls:	<p>Grundlagen der Quantentheorie der Materie: Schrödingergleichung, lösbare Einteilchenprobleme (Kasten, Oszillator, Rotator, H-Atom), Variationstheorem, Hückelmethode; Einführung in die Symmetrie: Symmetrieelemente und Symmetrioperationen, Gruppentheorie, Irreduzible Darstellungen;</p> <p>Einführung in die optische Molekülspektroskopie: Rotations- und Schwingungsspektroskopie (MW, IR, Raman), UV/Vis- Spektroskopie, Elektronenzustände von Koordinationsverbindungen;</p> <p>Einführung in die Theoretische Chemie: Mehrelektronensysteme, Spinzustände, Hartree-Fock Methode, Dichtefunktionaltheorie.</p>
4. Qualifikationsziele des Moduls / zu erwerbende Kompetenzen:	Die Studierenden besitzen grundlegende Kenntnisse in ausgewählten Bereichen der Chemie. Sie verfügen über Erfahrungen mit wissenschaftlichen Fragestellungen, praktischen Herangehensweisen und Arbeitstechniken der Chemie.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	NF Chemie im BSc Mathematik empfohlen
b) verpflichtende Nachweise:	
6. Verwendbarkeit des Moduls:	MSc Mathematik
7. Angebotsturnus des Moduls:	WS, SS
8. Das Modul kann absolviert werden in:	2
9. Empfohlenes Fachsemester:	1-2
10. Arbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	<p>Arbeitsaufwand: Gesamt in Stunden: 390 davon: 1. Präsenzzeit: 10 SWS 2. Selbststudium: 240 Std. Leistungspunkte: 13 LP</p>
Voraussetzung für die Vergabe der in Nr. 10 genannten Leistungspunkte ist das erfolgreiche Absolvieren aller in den Nrn. 11 und 12 aufgeführten Leistungen.	
11. Modulbestandteile	

Nr.	P / WP	Lehrform	Themenbereich/Thema	SWS / Std.	Studienleistungen	LP
1	P	V	Quantenmechanik	4	gemäß Modulbeschreibung der Chemie	5
2	P	V	Spektroskopie	3	gemäß Modulbeschreibung der Chemie	4
3	P	V	Theoretische Chemie	3	gemäß Modulbeschreibung der Chemie	4

12. Modulprüfung

Kompetenz / Thema/Bereich	Art der Prüfung	Dauer	Zeitpunkt	Anteil an Modulnote
Quantenmechanik	Klausur	2 Stunden	Ende SS	gewichtet nach LP
Spektroskopie und Theoretische Chemie	Klausur	2 Stunden	Ende WS	gewichtet nach LP

13. Bemerkungen:

Alle notwendigen Prüfungsleistungen und Prüfungsmodalitäten werden von der Fakultät für Chemie festgelegt. Das Modul ist erfolgreich abgeschlossen, wenn alle Pflichtveranstaltungen im Umfang von 13 LP erfolgreich absolviert wurden. Die Modulnote ergibt sich als Mittelwert der Noten der Teilprüfungen gewichtet mit den Leistungspunkten.