

CHE-BSc-M 11

1. Name des Moduls:	Struktur der Materie
2. Fachgebiet / Verantwortlich:	Chemie / Prof. Dr. Bernhard Dick
3. Inhalte des Moduls:	<u>Grundlagen der Quantentheorie der Materie:</u> Schrödingergleichung, lösbare Einteilchenprobleme (Kasten, Oszillator, Rotator, H-Atom), Variationstheorem, Hückelmethode; <u>Einführung in die Symmetrie:</u> Symmetrieelemente und Symmetrioperationen, Gruppentheorie, Irreduzible Darstellungen; <u>Einführung in die optische Molekül-spektroskopie:</u> Rotations- und Schwingungsspektroskopie (MW, IR, Raman), UV/Vis-Spektroskopie, Elektronenzustände von Koordinationsverbindungen; <u>Einführung in die Theoretische Chemie:</u> Mehrelektronensysteme, Spinzustände, Hartree-Fock Methode, Dichtefunktionaltheorie.
4. Qualifikationsziele des Moduls:	Studierende, die das Modul erfolgreich absolviert haben, sind mit der Quantennatur der Materie und den daraus folgenden Konsequenzen vertraut. Aus der Kenntnis der Zusammenhänge zwischen quantisierten Eigenschaften der Materie und spektroskopischen Phänomenen können sie für verschiedene Fragestellungen der Strukturbestimmung von chemischen Verbindungen geeignete spektroskopische Verfahren auswählen und experimentelle Ergebnisse in diesem Sinne analysieren. Des Weiteren haben sie die fundamentalen Methoden der modernen Elektronenstrukturtheorie (numerische Quantenchemie) kennengelernt und verstanden.
5. Teilnahmevoraussetzungen:	
a) empfohlene Kenntnisse:	Modul CHE-BSc-M 02 „Mathematik“ Modul CHE-BSc-M 03 „Physik“
b) verpflichtende Nachweise: sofort vorzulegen <input type="checkbox"/> nachzureichen bis <input type="checkbox"/>	keine
6. Verwendbarkeit des Moduls:	B.Sc. Chemie
7. Angebotsturnus des Moduls:	Jährlich, im SS
8. Dauer des Moduls:	2 Semester
9. Empfohlenes Fachsemester:	4. und 5. Fachsemester

10. Gesamtarbeitsaufwand des Moduls (Workload) / Anzahl Leistungspunkte:	390 Stunden / 13 Leistungspunkte* (150 h Präsenzzeit, 240 h Eigenstudium einschl. Prüfungsvorbereitung)
---	--

*Die LP für das Modul werden erst nach Bestehen der Modulprüfung bzw. aller Modulteilprüfungen vergeben.

11. Lehrveranstaltungen:					
	<i>P / WP / W *</i>	<i>Lehrform</i>	<i>Themenbereich/Thema</i>	<i>Präsenzzeit in SWS o. Std.</i>	<i>Studienleistungen</i>
1	P	V	Quantenmechanik	3	
2	P	V	Spektroskopie	4	
3	P	V	Theoretische Chemie	3	

Bemerkungen: Jede Modulteilprüfung muss abgelegt werden, um bei einem zweimaligen Nichtbestehen einer oder mehrerer Teilprüfungen das Anrecht auf eine mündliche Modulabschlussprüfung (siehe unter 14.) zu erlangen. Die Wiederholungsfrist für die mündliche Gesamtprüfung richtet sich nach der letzten erbrachten Teilprüfung.

* P = Pflichtveranstaltung; WP = Wahlpflichtveranstaltung; W = Wahlveranstaltung

12. Modulprüfung:					
<i>A/T*</i>	<i>Art und Inhalt der Prüfung</i>	<i>Zulassungsvoraussetzung**</i>	<i>Dauer</i>	<i>Zeitpunkt</i>	<i>Art der Bewertung</i>
T	Klausur zu Quantenmechanik		2 Std.	Am Ende der Vorlesungszeit des SS	benotet
T	Gemeinsame Klausur zu Spektroskopie und Theoretischer Chemie		2 Std.	Am Ende der Vorlesungszeit des WS	benotet

Bemerkungen:

* A = Modulabschlussprüfung; T = Modulteilprüfung

** optional

13. Modulnote:		
<input type="checkbox"/>	Die Modulnote entspricht der Note der Modulabschlussprüfung.	
<input checked="" type="checkbox"/>	Die Modulnote setzt sich wie folgt zusammen:	
	Klausur zu Quantentheorie	1/3
	Gemeinsame Klausur zu Spektroskopie / Theoretischer Chemie	2/3
<input type="checkbox"/>	Das Modul wird nicht benotet.	

14. Sonstiges:	
<p>Werden eine oder mehrere Modulteilprüfungen bzw. die Modulabschlussprüfung im ersten Wiederholungsversuch nicht bestanden, so steht dem Kandidaten ein zweiter Wiederholungsversuch zu. Die zweite Wiederholungsprüfung wird grundsätzlich als mündliche Modulabschlussprüfung (zu allen im Modul enthaltenen Lehrveranstaltungen) vor einem Prüfungsgremium aus mindestens zwei Prüfern abgehalten. Im Fall von einer oder mehreren zweimal nicht bestandenen Teilprüfungen fließt die Note der mündlichen Modulabschlussprüfung (2. Wiederholung) mit dem für die jeweilige Teilprüfung vorgesehenen Gewicht in die Modulnote ein.</p> <p>Wird die mündliche Modulabschlussprüfung nicht bestanden, so führt dies gemäß § 29 Abs. 4 Satz 1 Punkt 2 (PO des Bachelorstudiengangs Chemie vom 14.06.2010) zum endgültigen Nichtbestehen der Bachelorprüfung.</p>	