

<b>VF1-Th</b>	<b>Theoretische Chemie I</b>			<b>Wahlpflicht</b>
				<b>5 Cr</b>
Studiengang	<b>Chemie Diplom</b>			<b>ab 5. Sem.</b>
Studienabschnitt	<b>Hauptstudium</b>			<b>1x pro Jahr</b>
2V+1Ü	<b>Elektronenstruktur von Atomen und Molekülen</b>			
	Workload	SWS	Vorbedingungen	
2V	48h	2	GWC (Vordiplom)	
1Ü	98h	1		
Summe	146h	3		
Prüfungsform	Hausaufgaben und bewertete Abschlussklausur			
Ziele	Die Studierenden erlangen ein fundiertes Verständnis der quantenmechanischen Beschreibung der Elektronenstruktur von Atomen und Molekülen und lernen die wichtigsten allgemeinen Näherungsverfahren kennen.			
Inhalte	Grundlagen der Quantenmechanik, Variationsrechnung, Störungstheorie, physikalische Grundlagen der chemischen Bindung in Ein- und Zweielektronenmolekülen, Hartree-Fock-Verfahren, Konzepte der Gruppentheorie, Elektronenstruktur zweiatomiger und mehratomiger Moleküle.			
Lehrende	Prof. Dr. P. Botschwina			
Modulverantw.	Prof. Dr. P. Botschwina			