

VF2-Th	Theoretische Chemie II			Wahlpflicht
				9 Cr
Studiengang	Chemie Diplom			ab 6. Sem.
Studienabschnitt	Hauptstudium			1x pro Jahr
2V	Aktuelle Methoden der Quantenchemie			
P	Praktikum Th Chemie			
	Workload	SWS	Vorbedingungen	
2V	38h	2	VF1-Th	
10P	240h	9	VF1-Th	
Summe	278h	11		
Prüfungsform	Abschlusskolloquium			
	Vorleistungen durch Protokolle und Vortrag			
Ziele	Die Studierenden erlernen die Grundzüge der aktuellen Methoden der Quantenchemie. Vertiefende Anwendungen finden im Praktikum statt.			
Inhalte	Schwächen der Hartree-Fock-Methode, zum Begriff der Elektronenkorrelation; Dichtefunktionaltheorie; Störungstheorie niedriger Ordnung mit einer SCF-Determinante als Referenzfunktion; Configuration Interaction mit einer SCF-Determinante als Referenzfunktion; Coupled Cluster-Methoden; Lokale Elektronenkorrelation; Das Multi-Configuration Self-Consistent-Field-Verfahren; Multireferenz-Methoden			
Lehrende	Prof. Dr. P. Botschwina, PD. Dr. S. Schmatz			
Modulverantw.	Prof. Dr. P. Botschwina			