Fortgeschrittene Quantenchemie (FQC)				Stand: 15.05.2018
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester
8	240	1 Semester	SoSe	2.

Lehrveranstaltungen	Typ	Umfang [SWS]	Arbeits-aufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppen-größe
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände	V	2	90	30	250
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie	V	1	45	15	250
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände	Üb	1	45	15	30
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie	Üb	2	45	15	30
Ausgewählte Kapitel der Theoretischen Chemie	Sem	1	15	15	30

Modulverantwortlicher	Prof. Dr. C. M. Marian	
Beteiligte Dozenten	Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie	
Sprache	deutsch/englisch	
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang	Modus
	M. Sc. Wirtschaftschemie	Wahlpflicht
	M. Sc. Informatik	Wahlpflicht
	M. Sc. Physik	Wahlpflicht
	M. Sc. Mathe	Wahlpflicht

Lernziele und Kompetenzen

Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls
- die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie wiedergeben
- die Gruppentheorie auf Kernbewegungen, Molekülorbitale und Elektronenspins anwenden
- entscheiden, welche Übergänge zwischen Zuständen erlaubt sind
- Grundzüge der variations und störungstheoretischen Verfahren herleiten
- Methoden zur Berechnung angeregter Zustände korrekt beurteilen und auswählen
- Umgebungseffekte in Berechnungen berücksichtigen
- Wahrscheinlichkeiten für elektronische Übergänge berechnen

Inhalte

Vorlesung Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände

1. Optimierung von Molekülorbitalen (HF, CASSCF, DFT)
2. Elektronenstrukturmethoden für angeregte Zustände
   2.1.Variationsverfahren (CI, CIS, DFT/MRCI)
   2.2. Störungstheoretische Verfahren (CASPT2)
   2.3.Response-Methoden (TDHF, TDDFT, RICC2)
3. Umgebungseffekte auf elektronische Spektren
4. Dipolübergänge und Oszillatorstärken
5. Spin-Bahn-Kopplung, Phosphoreszenz, Intersystem crossing

Vorlesung Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie

1. Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik
2. Molekülpunktgruppen
3. Reduzible und irreduzible Darstellungen, Charaktere, Orthogonalitätstheorem, Projektionsoperatoren
4. Symmetrie von Wellenfunktionen und Operatoren

5. Auswahlregeln für Übergänge zwischen molekularen Zuständen 6. Drehimpulse, Kommutatoren			
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber die Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, wird vorausgesetzt. Das Modul kann nicht belegt werden, wenn bereits das Modul MPESP belegt wurde.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Seminar und an den Übungen, erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.			
Literatur			
• A. Szabo and N. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover Pubn, 2000 • D.M. Bishop, Group Theory and Chemistry, Dover Pubn, 1993			