

<b>Spezialisierungsmodul Photodynamik mit QM/MM-Verfahren (SpDyn)</b>				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe, jedes 2. Jahr	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		V	2	90	30	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		Üb	1	45	15	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		PExp	6	105	75	15
Modulverantwortlicher	PD Dr. Oliver Weingart					
Beteiligte Dozenten	Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie					
Sprache	deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftskemie			Wahlpflicht		
	M. Sc. Informatik			Wahlpflicht		
M. Sc. Physik			Wahlpflicht			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> <li>• die Grundlagen molekülmechanischer und quantenmechanischer Verfahren sowie deren Kombination in QM/MM Verfahren wiedergeben.</li> <li>• erweitertes Wissen über quantenmechanische Verfahren zur Beschreibung angeregter Zustände vorweisen.</li> <li>• Die Bewegung von Molekülen auf Singulett-Potenzialflächen nachvollziehen.</li> <li>• kombinierte quantenmechanische/molekülmechanische Berechnungen zur Photodynamik einfacher Modellsysteme durchführen.</li> </ul>						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i> subtraktive und additive QM/MM-Verfahren, QM-Methoden für angeregte Zustände, molekülmechanische Methoden, nichtadiabatische Kopplung, Ensembles, Solvation, Surface-Hopping-Dynamik auf Born-Oppenheimer-Flächen, Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten.</p> <p><i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.</p> <p><i>Praktikum:</i> Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden.					
Studienleistungen (ggf. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung)	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Prüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
<p>F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley-VCh, 2011.</p> <p>H. M. Senn, W. Thiel, QM/MM Methods for Biological Systems, Top. Curr. Chem. (2007) 268: 173–290.</p> <p>O. Weingart, Combined Quantum and Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Simulate Ultrafast Photodynamics in Biological Systems, Curr. Org. Chem. (2017) 21: 586-601.</p>						