

|   |   |             |                     |                    |                 |              |
|---|---|-------------|---------------------|--------------------|-----------------|--------------|
| <b>Spezialisierungsmodul relativistische Quantenchemie (SpRela)</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.                 |                 |              |
| <b>Lehrveranstaltungen</b>  |   | Typ         | Umfang [SWS]        | Arbeitsaufwand [h] | Präsenzzeit [h] | Gruppengröße |
| Relativistische Quantenchemie   |   | V           | 2                   | 90                 | 30              | 30           |
| Relativistische Quantenchemie   |   | Üb          | 1                   | 45                 | 15              | 30           |
| Relativistische Quantenchemie   |   | PExp        | 6                   | 105                | 75              | 15           |
| <b>Modulverantwortlicher</b>  | Prof. Dr. C. M. Marian  |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Beteiligte Dozenten</b>  | Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Sprache</b>  | deutsch, englisch   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Weitere Verwendbarkeit des Moduls</b>  | Studiengang   |             |                     | Modus              |                 |              |
|   | M. Sc. Wirtschaftskemie   |             |                     | Wahlpflicht        |                 |              |
|   | M. Sc. Informatik   |             |                     | Wahlpflicht        |                 |              |
| M. Sc. Physik   |   |             | Wahlpflicht         |                    |                 |              |
| <b>Lernziele und Kompetenzen</b>  |   |             |                     |                    |                 |              |
| Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls  |   |             |                     |                    |                 |              |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• die grundlegenden Konzepte Relativitätstheorie wiedergeben</li> <li>• den Weg zur Dirac-Gleichung skizzieren und die Bedeutung ihrer Lösungen analysieren</li> <li>• den Weg zu ein- und zweikomponentigen Näherungen beschreiben</li> <li>• beurteilen, wann die Anwendung relativistischer Methoden notwendig ist</li> <li>• Ein- und Zweielektronen-Spin-Bahn-Operatoren gegenüberstellen</li> <li>• Übergangswahrscheinlichkeiten für spinverbotene Übergänge berechnen</li> <li>• Rechnungen mit den in der Arbeitsgruppe gängigen Programmen durchführen und interpretieren</li> </ul> |   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Inhalte</b>  |   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Vorlesung</b>  |   |             |                     |                    |                 |              |
| 1. Relativistische Effekte, Dirac-Coulomb-Gleichung, No-Pair-Näherung, Skalarrelativistische Effekte, Effektive Rumpfpotentiale   |   |             |                     |                    |                 |              |
| 2. Elektronische Spin-Bahn-Kopplung: Operatoren, Auswahlregeln, Spinabhängige Effekte   |   |             |                     |                    |                 |              |
| 3. Fluoreszenz- und Phosphoreszenzraten   |   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Praktikum</b>  |   |             |                     |                    |                 |              |
| Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung   |   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Teilnahmevoraussetzungen</b>   | Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden. |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Studienleistungen</b><br>(ggf. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung)   | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll.   |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Zulassungsvoraussetzung</b><br>zur Modulprüfung  | Erfolgreicher Abschluss des Rela-Praktikums und erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.  |             |                     |                    |                 |              |
| <b>Prüfungen</b>  | Prüfungsform  | Dauer [min] | benotet/unbenotet   |                    |                 |              |
|   | Mündliche Prüfung   | 30-45       | benotet             |                    |                 |              |
| <b>Stellenwert der Note für die Gesamtnote</b>  |   |             |                     | 8/135              |                 |              |
| <b>Sonstige Informationen</b>   |   |             |                     |                    |                 |              |
| Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.  |   |             |                     |                    |                 |              |

## Literatur

- M. Reiher, A. Wolf „Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science“, Wiley-VCH, 2009
- K. Dyall, K. Faegri, “Introduction to Relativistic Quantum Chemistry“, Oxford Univ Press, 2007
- C. M. Marian “Spin-Orbit Coupling and Intersystem Crossing in Molecules“, Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, [2\(2012\)](#) 187–203
- C. M. Marian „Spin-orbit coupling in molecules“ in: Reviews in Computational Chemistry, ed. by K. Lipkowitz and D. Boyd, Wiley-VCH, Weinheim, 17 (2001) 99-204