

Modulbezeichnung: Quantum Chemistry II (QuantCh-2) **5 ECTS**
(Quantum Chemistry II)

Modulverantwortliche/r: Andreas Görling
Lehrende: Andreas Görling

Startsemester: SS 2022	Dauer: 1 Semester	Turnus: jährlich (SS)
Präsenzzeit: 45 Std.	Eigenstudium: 105 Std.	Sprache: Englisch

Lehrveranstaltungen:

Quantum Chemistry 2 (SS 2022, Vorlesung mit Übung, 3 SWS, Andreas Görling)

Es wird empfohlen, folgende Module zu absolvieren, bevor dieses Modul belegt wird:

Quantum Chemistry I

Inhalt:

- Many-Body Perturbation Theory
- Configuration Interaction, Second Quantization, Coupled Cluster
- TD-HF, TD-DFT, RPA

Lernziele und Kompetenzen:

Students ...

- obtain sound knowledge in advanced methods of quantum chemistry
- are able to solve mathematical problems occurring in quantum chemistry
- are able to understand and assess scientific reports in the field of quantum chemistry

Literatur:

- Attila Szabo, Neil S. Ostlund: Modern Quantum Chemistry, Dover 1996
- Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry, Wiley 2017 (3rd ed.)
- Ira N. Levine: Quantum Chemistry, Pearson 2016 (7th ed.)

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

[1] Chemistry (Master of Science)

(Po-Vers. 2020w | NatFak | Chemistry (Master of Science) | Wahlmodule | Quantum Chemistry 2)

[2] Data Science (Master of Science)

(Po-Vers. 2021w | Gesamtkonto | Anwendungsfächer | Chemistry | Quantum Chemistry 2)

[3] Molecular Science (Master of Science)

(Po-Vers. 2020w | NatFak | Molecular Science (Master of Science) | Elective modules | Quantum Chemistry 2)

Studien-/Prüfungsleistungen:

Quantum Chemistry 2 (Prüfungsnummer: 65611)

Prüfungsleistung, mündliche Prüfung, Dauer (in Minuten): 20

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

O20 (PL): Oral Examination (20 minutes, not graded: pass/fail) or alternative examination according to FAU Corona Statutes!

Prüfungssprache: Englisch

Erstablesung: SS 2022, 1. Wdh.: keine Angabe

1. Prüfer: Andreas Görling

Organisatorisches:

- The elective module "Quantum Chemistry II" will be taught only in summer term!
- Students have to register for this module (check registration periods)!
- Registration/further information via StudOn!

Bemerkungen:

Module compatibility:

- as Elective Module in M.Sc. Chemistry or M. Sc. Molecular Science (5 ECTS, not graded) if **Quantum Chemistry I** was already chosen as Elective Module!