

Modul: Quantenreaktionsdynamik			
Hochschule/Fachbereich/Institut: Freie Universität Berlin/Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie/Institut für Chemie und Biochemie			
Modulverantwortliche/r: Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
Zugangsvoraussetzungen: keine			
Qualifikationsziele: Die Studentinnen und Studenten kennen theoretische Konzepte und Methoden zur Beschreibung der zeitabhängigen Quantenmechanik von chemischen Reaktionen und können damit entsprechende Computersimulationen und Visualisierungen durchführen.			
Inhalte: Zeitabhängige Quantenmechanik, Wellenpaketdynamik, adiabatische und nicht-adiabatische Dynamik, molekulare Übergänge und Reaktionen nach Anregung durch Laserpulse, numerische Methoden und Computersimulationen zum Lösen zeitabhängiger quantenmechanischer Probleme.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium Semesterwochen- stunden = SWS	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand Stunden
Vorlesung	2	-	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit SPC 30
Seminar am PC mit Anwendung von Spezialsoftware	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben und Computersimulationen	Vor- und Nachbereitung SPC 30 Prüfungsvorbereitung und -bearbeitung 30
Veranstaltungssprache		Deutsch oder Englisch	
Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme		Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen, Seminar: ja	
Arbeitszeitaufwand insgesamt		150 Stunden	5 LP
Dauer des Moduls		ein Semester	
Modulprüfung		praktische Prüfung (Simulation am Computer)	
Häufigkeit des Angebots		jedes dritte Semester	
Verwendbarkeit		Masterstudiengang Chemie	