

<b>Theoretische Photochemie</b>		<b>5 CP</b>					
<b>Wahlpflichtmodul im Pflichtbereich Physikalische und Theoretische Chemie</b>							
<b>Inhalte:</b> Einführung: molekulare Mechanismen von Absorption, Fluoreszenz und strahlungslosen Übergängen; angeregte elektronische Zustände: quantenchemische Aspekte; Notwendigkeit einer quantenmechanischen Behandlung der Kerndynamik: Wellenpaket- und Dichtematrixpropagation; Zusammenbruch der Born-Oppenheimer-Näherung: nichtadiabatische Effekte, Wellenpaketdynamik auf gekoppelten Potentialflächen, Multikonfigurationsverfahren zur hochdimensionalen Wellenpaketpropagation, Näherungsmethoden für die Kerndynamik: Surface Hopping (SH)-Methode; ultraschnelle Zerfallsphänomene an konischen Durchschneidungen; Umgebungseffekte und Solvatationsdynamik; Beispiele: Photochemie von Retinal, Azobenzol und verwandten Systemen; Beobachtung mittels nichtlinearer optischer Spektroskopie; theoretische Beschreibung nichtlinearer optischer Experimente (zum Beispiel Pump-Probe-Spektroskopie, Photon-Echo-Spektroskopie)							
<b>Qualifikationsziele und Kompetenzen:</b> Die Studierenden erhalten Einblick in aktuelle Forschungsmethoden auf dem Gebiet der theoretischen Photochemie. Sie lernen die „state of the art“-Methoden kennen, die heute zur Charakterisierung der angeregten elektronischen Zustände und Dynamik photochemischer und photobiologischer Systeme verwendet werden. Die Studierenden befassen sich mit der Rolle spezieller Topologien (insbesondere konischer Durchschneidungen) und analysieren, warum diese elektronische Übergänge auf einer ultraschnellen Zeitskala (Femtosekunden bis Pikosekunden) induzieren. Ferner stellen sie die Verbindung zu modernen nichtlinearen optischen Spektroskopien her und berechnen spektroskopische Signale explizit.							
<b>Angebotszyklus:</b>		einmal pro Jahr					
<b>Dauer des Moduls:</b>		1 Semester					
<b>Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:</b>		keine					
<b>Organisatorisches:</b>		empfohlene Vorkenntnisse: gute mathematische und theoretische Kenntnisse Die Veranstaltung findet in Englisch statt. Zur Vertiefung des Verständnisses wird die Vorlesung von eigenständiger Literatur- und Projektarbeit begleitet.					
<b>Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):</b>		aktive Teilnahme an der Literatur- und Projektarbeit					
<b>Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:</b>		Referat über eigenes Projekt oder Klausur					
<b>Voraussetzung für die Vergabe der CP:</b>		bestandene Modulabschlussprüfung					
<b>Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:</b>		Wahlpflichtmodul für Studierende der Masterstudiengänge Biophysik und Physik					
<b>Lehrveranstaltungen</b>		<b>Typ</b>	<b>SWS</b>	<b>Semester / CP</b>			
				<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
Theoretische Photochemie		V	3	5			