

**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)

Dieses Modul ist daneben auch in den Studienfächern "Data Science (Master of Science)", "Molecular Science (Master of Science)" verwendbar.

**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

Erstablingung: 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!