

MNF-chem5009	Computational Quantum Dynamics and Time-resolved Spectroscopy		
Semesterlage / Dauer	Angebot halbjährlich, Beginn im Winter- oder im Sommersemester Dauer: 1-2 Semester		
Modulverantwortliche(r)	Prof. Dr. Dassia Egorova Telefon 0431-880-5821, Email: egorova@phc.uni-kiel.de		
Studiengang / -gänge	M.Sc. Chemie: 2. - 3. Fachsemester M.Sc. Physik: 1. - 3. Fachsemester Andere Fachrichtungen nach Absprache	Wahl	
Beratung zum Modul	Prof. Dr. Dassia Egorova Telefon 0431-880-5821, Email: egorova@phc.uni-kiel.de		
Lehrveranstaltungen	Bezeichnung der Lehrveranstaltung / Lehrende(r)	SWS	Status
	Vorlesung	3 SWS	Pflicht
	Praktikum	4 SWS	Pflicht
	Seminar	1 SWS	Pflicht
Zahl der Plätze	15		
Lehrsprache	Vorlesungen: Englisch; Praktikum und Seminar: Deutsch und Englisch		
Arbeitsaufwand	Präsenzstudium: 120 h		
	Selbststudium: 40 h Seminarvortrag + 40 h Praktikumsbericht + 100 h Vorlesung Nachbereiten		
Leistungspunkte	10		
Voraussetzungen	B.Sc. in Chemie oder B.Sc. in Physik; Englische Sprache		
Erwünschte Vorkenntnisse	Grundlagen der Quantenmechanik; Belegung von 1004D		
Lernziele	understanding of basic ideas of modern methods of computational quantum dynamics and time-resolved spectroscopy; understanding the interconnection between the system dynamics and measurable signals; horizon broadening in the field		
Lehrinhalte	<ul style="list-style-type: none"> •Lectures (Vorlesung): overview of contemporary methods of computational quantum dynamics (reduced density-matrix approach, MCTDH, etc.); system-field interaction and peculiarities of photoinduced dynamics; overview of modern experimental methods of ultrafast spectroscopy (classification of techniques, their capabilities and interpretation challenges); Introduction into computational methods of time-resolved spectroscopy (response-functions tradition versus new direct methods) •Practical part (Praktikum): implementation and application of the methods for simulation of quantum dynamics and of pertaining time-resolved spectroscopic signals for several representative model systems •Seminar: current trends in the field (literature analysis and discussion, students' talks on topics of their scientific interests) 		
Schlüsselqualifikationen	ability to analyse time-resolved signals in terms of system dynamics; ability to classify methods of time-resolved spectroscopy according to dynamical information they (can) provide; development of programming skills		

Prüfung(en)	Prüfungsleistungen:
	<ul style="list-style-type: none"> •mündliche Prüfung zur Vorlesung •selbständige Bearbeitung der Aufgaben des Praktikums •schriftlicher Bericht zum Praktikum •Seminarvortrag
	Prüfungstermin: Zu Ende der Lehrveranstaltung 1. Wiederholungstermin: Vor Beginn der Vorlesungszeit des folgenden Semesters 2. Wiederholungstermin: Nach Ende der Vorlesungszeit des folgenden Semesters
	Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden)
	Benotung, Relevanz für M.Sc. Endnote: Modulnote ergibt sich aus 1/3 Prüfungsnote + 1/3 Praktikumsnote + 1/3 Vortragsnote
Literaturangaben	<ul style="list-style-type: none"> • H.-D. Meyer, F. Gatti, and G. A. Worth (ed.), "Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH Theory and Applications" •K. Blum, "Density Matrix Theory and Applications" •U. Weiss, "Quantum Dissipative Systems " •S. Mukamel, "Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy" •Review-Artikel und Einzelpublikationen nach Angabe der Dozenten;
weitere Angaben	Belegung vom chem 1004D im 1. Fachsemester (M.Sc. Chemie) ist dringend empfohlen.