

<b>Modultitel</b>		<b>Modulcode</b>	
Molekülstruktur und Moleküldynamik		chem1004C-01a	
<b>Modulverantwortliche(r)</b>			
Prof. Dr. Friedrich Temps			
<b>Veranstalter</b>			
Sektion Chemie Institut für Physikalische Chemie			
<b>Fakultät</b>			
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät			
<b>Prüfungsamt</b>			
Prüfungsamt Chemie			
<b>Leistungspunkte</b>	15		
<b>Bewertung</b>	Benotet		
<b>Dauer</b>	Zwei Semester		
<b>Angebotshäufigkeit</b>	Vorlesungen sind auf das Winter- und Sommersemester aufgeteilt, Praktikum und Seminar nur im Sommersemester		
<b>Arbeitsaufwand pro Leistungspunkt</b>	30 Stunden		
<b>Arbeitsaufwand insgesamt</b>	450 Stunden		
<b>Präsenzstudium</b>	154 Stunden		
<b>Selbststudium</b>	296 Stunden		
<b>Lehrsprache</b>	Deutsch / Englisch		
<b>Modulveranstaltung(en)</b>			
<b>Veranstaltungsart</b>	<b>Lehrveranstaltungstitel</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>SWS</b>
Vorlesung	Grundlagen und Methoden der Laserspektroskopie	Pflicht	2
Vorlesung	Moderne Methoden der Massenspektrometrie	Pflicht	2
Vorlesung	Moderne Konzepte der Reaktionsdynamik	Pflicht	2
Praktische Übung	Praktikum für Laserspektroskopie und Massenspektrometrie	Pflicht	4

Seminar	Seminar über moderne Methoden der Laserspektroskopie und Massenspektrometrie	Pflicht	1	
<b>Weitere Bemerkungen zu den Lehrveranstaltungen</b>				
Das Praktikum kann begonnen werden, wenn das Modul chem1003 (Molekülspektroskopie) abgeschlossen wurde oder zwei Vorlesungen aus chem1004C-01a belegt worden sind.				
<b>Prüfung(en)</b>				
<b>Prüfungstitel</b>	<b>Prüfungsform</b>	<b>Bewertung</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>Gewicht</b>
Praktikumstestate: Molekülstruktur und Moleküldynamik	Praktikumstestate	Benotet	Pflicht	30
Kolloquium: Molekülstruktur und Moleküldynamik	Kolloquium	Benotet	Pflicht	70
<b>Weitere Bemerkungen zu der/den Prüfung(en)</b>				
<ul style="list-style-type: none"> <li>Praktikumstestate (Versuchskolloquien, Ausführung der Praktikumsaufgaben, Versuchsprotokolle; (insgesamt 30 % der Modulnote),</li> <li>Mündliche Prüfung (Kolloquium) zum Inhalt des Praktikums und einer Zwei-SWS-Vorlesung des Moduls (70 % der Modulnote).</li> </ul> Termin des Kolloquiums: Zum 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: <ul style="list-style-type: none"> <li>Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die M.Sc. Endnote ein.</li> </ul>				
<b>Lehrinhalte</b>				
<ul style="list-style-type: none"> <li>Laserspektroskopie: Licht und die Wechselwirkung von Licht mit Materie, Funktionsprinzip des Lasers, der Laser als spektroskopische Lichtquelle, nichtlineare Optik, Doppler-begrenzte Absorptions- und Fluoreszenzspektroskopie, nichtlineare und Multiphotonenspektroskopie, Raman-Spektroskopie und Vierwellenmischung, Laserspektroskopie in Molekularstrahlen, Doppelresonanzspektroskopie, zeitaufgelöste und ultraschnelle Laserspektroskopie, kohärente Prozesse, Spektroskopie von Stoßprozessen, Einzelmolekülspektroskopie, neue Methoden und Anwendungen der Laserspektroskopie,</li> <li>Massenspektrometrie: Historische Entwicklung der Massenspektrometrie bis zu modernen Geräten und Ionisierungsmethoden (EI, CI, FAB, ESI, MALDI), physikalische Prinzipien der wichtigsten Typen von Massenspektrometern (Sektorfeld-, Quadrupol-, TOF-, Ionenfallen-, ICR-MS), Anwendungsbeispiele aus unterschiedlichen Bereichen der Chemie und Biochemie, insbesondere aus dem Gebiet der Biomoleküle (Peptid- und Proteinanalytik), Zerfallsreaktionen organischer und anorganischer Verbindungen in Massenspektrometern, Auswertung von Massenspektren, Einsatz von MALDI-PSD (PSD, post-source decay) und Tandem-Massenspektren (ESIMS/MS) zur Aufklärung von Peptidsequenzen und zur Identifizierung posttranslatiöner Modifikationen (z.B. Phosphorylierung), massenspektrometrische Techniken zur Strukturidentifizierung (CID, SID und Photodissoziation),</li> <li>Reaktionsdynamik: Elektronenzustände und Potentialhyperflächen mehratomiger Moleküle, photophysikalische und photochemische Primärprozesse, Zusammenbruch der Born-Oppenheimer-Näherung, vibronische Kopplungen und nicht-adiabatische Übergänge; Femtochemie; Dynamik von Energieübertragungsprozessen; moderne Konzepte der Theorie unimolekularer Reaktionen, Normal- und Lokalschwingungen, intramolekulare Energieumverteilung, nicht-statistisches Verhalten; Verbrennungschemie, moderne Konzepte der heterogenen Katalyse, Dynamik von Oberflächenreaktionen,</li> <li>Die genaue Stoffauswahl erfolgt durch die zuständigen DozentInnen,</li> <li>Praktikum: Ausgewählte Experimente zur Spektroskopie (insbesondere Laserspektroskopie) und Massenspektrometrie (MB-FTMW-Spektrum von van-der-Waals Molekülen, FTIR-Spektroskopie)</li> </ul>				

<p>mehratomiger Moleküle, Laser-Induzierte Fluoreszenz (LIF), Ion Imaging, MALDI, Ramanspektroskopie, Femtosekundenspektroskopie, Rastertunnelmikroskopie),</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Seminar: Vertiefung ausgewählter moderner Themen der Laserspektroskopie, Massenspektrometrie und Reaktionsdynamik, Hinführung zu aktuellen Forschungsthemen.</li> </ul>		
<b>Lernziele</b>		
<p>Die Studierenden lernen moderne Methoden und aktuelle Themen der Forschung in der Physikalischen Chemie kennen, werden an den Stand der Forschung herangeführt und erwerben die Fähigkeit, aktuelle Fragen zu formulieren und zu diskutieren. Sie sind in der Lage fortgeschrittene Experimente und Messungen zu planen, durchzuführen, auszuwerten und kritisch zu diskutieren. Sie erlangen die Fähigkeit und Kompetenz zum selbständigen wissenschaftlichen Arbeiten.</p>		
<b>Literatur</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• W. Demtröder, Laserspektroskopie – Grundlagen und Techniken; Springer</li> <li>• D. Meschede, Optics, Light and Lasers, Wiley-VCH</li> <li>• J. M. Hollas, Moderne Methoden in der Spektroskopie, Vieweg,</li> <li>• K. L. Busch, G. L. Glish, S. A. McLuckey, Mass Spectrometry,</li> <li>• J. A. Splitter, F. Turecek, Applications of Mass Spectrometry to Organic Stereochemistry,</li> <li>• F. W. McLafferty, Interpretation of Mass Spectra,</li> <li>• P. L. Houston, Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, McGraw-Hill,</li> <li>• R. D. Levine, Molecular Reaction Dynamics, Cambridge University Press,</li> <li>• W. Demtröder, Molekülphysik - Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden, Oldenbourg,</li> <li>• W. Forst, Unimolecular Reactions, Cambridge University Press,</li> <li>• T. Baer, W. L. Hase, Unimolecular Reactions, Oxford,</li> <li>• Review-Artikel und Einzelpublikationen nach Angabe der DozentInnen,</li> <li>• Vorlesungsskripte,</li> <li>• Versuchsanleitungen.</li> </ul>		
<b>Verwendung</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>Fachsemester</b>
Master, 1-Fach, Biochemie und Molekularbiologie, (Version 2016)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Chemie, (Version 2016)	Wahl	1 - 3
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2014)	Wahl	1 - 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2017)	Wahl	1 - 2