

MNF-chem1004C	Molekülstruktur und Moleküldynamik		
Semesterlage / Dauer	Angebot jährlich, Beginn im Winter- oder im Sommersemester Dauer: 2 Semester		
Modulverantwortliche(r)	Prof. Dr. Friedrich Temps Telefon 0431-880-1703, Email: temps@phc.uni-kiel.de		
Studiengang / -gänge	M.Sc. Chemie: 1. - 3. Fachsemester	Wahlpflicht	
	M.Sc. Wirtschaftschemie: 1. – 2. Fachsemester	Wahlpflicht	
Beratung zum Modul	Dozenten der Physikalischen Chemie		
Lehrveranstaltungen	Bezeichnung der Lehrveranstaltung / Lehrende(r)	SWS	Status
	Vorlesung Grundlagen und Methoden der Laserspektroskopie (nur Wintersemester) Prof. Dr. M. Beyer	2 SWS	Pflicht
	Vorlesung Moderne Methoden der Massenspektrometrie (nur Wintersemester) Prof. Dr. J. Grotemeyer	2 SWS	Pflicht
	Vorlesung Moderne Konzepte der Reaktionsdynamik (nur Sommersemester) Prof. Dr. F. Temps	2 SWS	Pflicht
	Praktikum für Laserspektroskopie und Massenspektrometrie (nur Sommersemester, sechs Wochen in der zweiten Semesterhälfte) Dozenten der Physikalischen Chemie	4 SWS	Pflicht
	Seminar über Moderne Methoden der Laserspektroskopie und Massenspektrometrie (nur Sommersemester, sechs Wochen in der zweiten Semesterhälfte) Dozenten der Physikalischen Chemie	1 SWS	Pflicht
Zahl der Plätze	Vorlesungen und Seminar: 20; Praktikum: 10		
Lehrsprache	Vorlesungen: Deutsch oder Englisch; Bei Teilnahme von ausländischen Gaststudierenden Englisch Praktikum und Seminar: Deutsch und Englisch		
Arbeitsaufwand	Präsenzstudium: 196 h		
	Selbststudium: 254 h		
Leistungspunkte	15		
Voraussetzungen	B.Sc. Chemie oder B.Sc. Wirtschaftschemie oder B.Sc. Biochemie und Molekularbiologie oder B.Sc. in Physik Für das Praktikum: abgeschlossenes Modul chem1003 (Molekülspektroskopie) oder zwei Vorlesungen aus chem1004C		
Lernziele	Die Studierenden sollen moderne Methoden und aktuelle Themen der Forschung in der Physikalischen Chemie kennen lernen, an den Stand der Forschung herangeführt werden und die Fähigkeit erwerben, aktuelle Fragen zu formulieren und zu diskutieren.		
Lehrinhalte	<ul style="list-style-type: none"> 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; 		

	<ul style="list-style-type: none"> • 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 posttranslatiionaler Modifikationen (z.B. Phosphorylierung), massenspektrometrische Techniken zur Strukturidentifizierung (CID, SID und Photodissoziation); • Reaktionsdynamik: Elektronenzustände und Potentialhyperflächen mehratomiger Molekülen, photophysikalische und photochemische Primärprozesse, Zusammenbruch der Born-Oppenheimer-Näherung, vibronische Kopplungen und nicht-adiabatische Übergänge; Dynamik von Energieübertragungsprozessen; moderne Konzepte der Theorie unimolekularer Reaktionen, Normal- und Lokalschwingungen, intramolekulare Energieumverteilung, nicht-statistisches Verhalten; Femtochemie; Verbrennungsschemie. • Praktikum: Ausgewählte Experimente zur Spektroskopie (insbesondere Laserspektroskopie) und Massenspektrometrie (MB-FTMW-Spektrum von van-der-Waals Molekülen, Laser-Induced Breakdown (LIBS), Laser-Induzierte Fluoreszenz (LIF), Ion Imaging, MALDI, Ramanspektroskopie, Femtosekundenspektroskopie); • Seminar: Vertiefung ausgewählter moderner Themen der Laserspektroskopie, Massenspektrometrie und Reaktionsdynamik, Hinführung zu aktuellen Forschungsthemen.
Schlüsselqualifikationen	<ul style="list-style-type: none"> • Einarbeitung in aktuelle Forschungsgebiete; • Planung, Durchführung, Auswertung und kritische Diskussion fortgeschrittener Experimente und Messungen; • Fähigkeit und Kompetenz zum selbstständigen wissenschaftlichen Arbeiten.
Prüfung(en)	<p>Prüfungsleistungen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Praktikumstestate (Versuchskolloquien, Ausführung der Praktikumsaufgaben, Versuchsprotokolle; (30 % der Modulnote), • Mündliche Prüfung (Kolloquium) zum Inhalt des Praktikums und einer Zwei-SWS-Vorlesung des Moduls (70 % der Modulnote) <p>Termin des Kolloquiums: Zu Ende der Lehrveranstaltung 1. Wiederholungstermin: Vor Beginn der Vorlesungszeit des folgenden Semesters 2. Wiederholungstermin: Nach Ende der Vorlesungszeit des folgenden Semesters</p> <p>Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch (nach Wahl der Studierenden)</p> <p>Benotung, Relevanz für M.Sc. Endnote: • Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die M.Sc. Endnote ein.</p>
Literaturangaben	<ul style="list-style-type: none"> • W. Demtröder, Laserspektroskopie – Grundlagen und Techniken; Springer; • D. Meschede, Optics, Light and Lasers, Wiley-VCH; • J. M. Hollas, Moderne Methoden in der Spektroskopie, Vieweg. • K. L. Busch, G. L. Glish, S. A. McLuckey, Mass Spectrometry; • J. A. Splitter, F. Turecek, Applications of Mass Spectrometry to Organic Stereochemistry; • F. W. McLafferty, Interpretation of Mass Spectra • P. L. Houston, Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, McGraw-Hill; • R. D. Levine, Molecular Reaction Dynamics, Cambridge University Press; • W. Demtröder, Molekülphysik - Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden, Oldenbourg; • W. Forst, Unimolecular Reactions, Cambridge University Press; • T. Baer, W. L. Hase, Unimolecular Reactions, Oxford; • Review-Artikel und Einzelpublikationen nach Angabe der Dozenten; • Vorlesungsskripte der Dozenten • Versuchsanleitungen
weitere Angaben	