

---

**Modulbezeichnung:** Integrierter Kurs AC (MSV-12N) 5 ECTS  
 (Integrated Course IC)

Modulverantwortliche/r: Karl Mandel

Lehrende: Nicolai Burzlaff, Romano Dorta, Thomas Drewello, Julien Bachmann, u.a., Karl Mandel

---

Startsemester: WS 2021/2022

Dauer: 2 Semester

Turnus: jährlich (WS)

Präsenzzeit: 60 Std.

Eigenstudium: 90 Std.

Sprache: Deutsch

---

**Lehrveranstaltungen:**

Integrierter Kurs -Instrumentelle Analytik (WS 2021/2022, Vorlesung, 2 SWS, Karl Mandel et al.)

Integrierter Kurs Angewandte Spektroskopie II (SS 2022, Vorlesung, 2 SWS, Nicolai Burzlaff et al.)

---

**Es wird empfohlen, folgende Module zu absolvieren, bevor dieses Modul belegt wird:**

Biochemie und Molekularbiologie, Einführung in die Nanowissenschaften

---

**Inhalt:**

- Röntgenbeugung & Röntgenstrukturanalyse: Grundlagen, Technik der Röntgenstrahlung, Symmetrie, Nomenklatur, Prinzipien und Anwendungen der Strukturlösung
- UV/vis- und Schwingungsspektroskopie: Auswahlregeln, Symmetrie, Zeitskalen, chemische Information
- Massenspektrometrie: Grundlagen und Aufbau eines Massenspektrometers, Ionisierungsmethoden, Trennungsmethoden
- Spektroskopische und mikroskopische Untersuchung von Oberflächen: Optische Mikroskopie, Nahfeldmethoden, Elektronenmikroskopie, Rastersondenmethoden, Elektronenspektroskopie, Streuungsmethoden
- ESR-Spektroskopie: Elektron-Zeeman-Effekt, Resonanzbedingung, Hyperfeinwechselwirkung, Delokalisierung und Spinpolarisation, Spindichte, Satelliten, g-Faktor, Elektron- und Kernspins, Bahndrehimpuls und Bahndrehmoment, Spin-Bahn-Kopplung, Magic Pentagon, Multispinsysteme, Nullfeldaufspaltung, Kramers- und Nicht-Kramers-Systeme, Rhombograme, isotrope und anisotrope Spektren/Systeme
- Magnetochemie: Paramagnetismus und Diamagnetismus, magnetische Suszeptibilität, Pascalsche Inkremente, Curie- und Curie-Weiss-Gesetze, effektives magnetisches Moment, Sättigungsmagnetisierung, Brillouin-Funktion, ferromagnetische und antiferromagnetische Wechselwirkungen, van-Vleck-Gleichung, Bahndrehimpuls und Gesamtdrehimpuls, Spin-Bahn-Kopplung, Nullfeldaufspaltung, anisotrope magnetische Systeme, Temperaturunabhängiger Paramagnetismus, SQUID-Magnetometer, Spin-Crossover
- NMR: NMR-Spektroskopie metallorganischer diamagnetischer Verbindungen in Lösung, chemische Verschiebung, Spin-Spin-Kopplung, Satelliten, Relaxation, COSY, HMQC

**Lernziele und Kompetenzen:**

Die Studierenden

- verstehen die Prinzipien, Anwendungsbereiche und Anwendungsobjekte der betrachteten Methoden.
- wissen über den Zusammenhang zwischen den experimentellen Daten der betrachteten Methoden und der Komposition und den Eigenschaften der untersuchten Proben.
- können die experimentellen Daten der betrachteten Methoden analysieren und damit auf die Komposition und Eigenschaften der Probe zurückgreifen.
- können die experimentellen Daten für bestimmte Proben voraussagen.

**Literatur:**

- W. Massa, Kristallstrukturbestimmung, 5. Auflage, Vieweg+Teubner, 2007;
- E. de Hoffmann, V. Stroobant, Mass Spectrometry: Principles and Applications, Wiley, 2007;
- H. Lueken, Magnetochemie, Teubner, 1999;
- L. H. Gade, Koordinationschemie, Wiley, 1998 (2008);
- J. R. Gispert, Coordination Chemistry, Wiley, 2008;
- R. S. Drago, Physical Methods for Chemists, Saunders College Publishing, 1992;

- L. Que, Physical Methods in Bioinorganic Chemistry, University Science Books, 2000;
  - Pavia, Lampman, Kriz, Vyvyan: Introduction to Spectroscopy, CENAGE learning, 5th ed.
  - Günther: NMR Spectroscopy, Wiley-VCH, 3rd ed, 2013
  - Pregosin: NMR in Organometallic Chemistry, Wiley-VCH, 2012, ISBN 978-3-527-33013-3
- 

### **Studien-/Prüfungsleistungen:**

Integrierter Kurs angewandte Spektroskopie (Prüfungsnummer: 30511)

(englische Bezeichnung: Integrated Course: Applied Spectroscopy)

Prüfungsleistung, Klausur, Dauer (in Minuten): 90

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

W90(PL): Klausur (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung gemäß Corona-Satzung!

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: SS 2022, 1. Wdh.: SS 2022

1. Prüfer: Karl Mandel

---

### **Organisatorisches:**

Bitte beachten: Die Vorlesung im WS 2020/21 findet voraussichtlich **online** statt, weitere Informationen zur Anmeldung finden Sie auf **StudOn** zu Semesterbeginn - Link folgt!

### **Bemerkungen:**

**Verwendbarkeit des Moduls:** B.Sc. Molecular Science (Vertiefungsrichtung: Nanoscience)