

**Modulhandbuch M. Sc. Chemistry**

**gemäß**

**Prüfungsordnung vom**

**08.09.2020**

# Inhalt

<b>Verwendete Abkürzungen .....</b>	<b>3</b>
<b>Modulübersicht.....</b>	<b>4</b>
Studienbeginn im Wintersemester .....	4
Studienbeginn im Sommersemester.....	5
<b>Pflichtbereich .....</b>	<b>6</b>
Advanced Inorganic Molecular and Solid State Chemistry .....	6
Organic Molecules and Materials .....	8
Advanced Physical Chemistry .....	10
Quantum Chemistry.....	12
Analytical Methods for Condensed Matter .....	14
Focusing Laboratory Course.....	16
Master of Science Arbeit.....	18
<b>Wahlpflichtbereich.....</b>	<b>19</b>
Industrial Inorganic Molecular Chemistry.....	19
Supramolecular Chemistry.....	21
Advanced Quantum Chemistry Methods .....	23
Surface Science and Electrochemistry .....	25
Chemical Biology / Medicinal Chemistry .....	27
Organometallic Chemistry .....	29
Molecular Dynamics of Time Dependent Phenomena .....	31
Macromolecular Chemistry.....	33
Inorganic Materials .....	35
Biophysical Chemistry .....	37
Theoretical Methods for Condensed Matter .....	39
Synthesis and Retrosynthesis.....	41
Modern Methods to Elucidate Structure-Function-Relationships in Biomacromolecules .....	43
Natural Product Chemistry .....	45
Magnetic Resonance Spectroscopy .....	47
Sustainability in Chemistry.....	49
Anorganische Struktur-, Festkörper- und Materialchemie.....	51

## Verwendete Abkürzungen

MNF	Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
LV	Lehrveranstaltung
V	Vorlesung
Ü	Übung
S	Seminar
P	Praktikum
LP	Leistungspunkte
ECTS	European Credit Transfer System
SLZ	Selbstlernzeit
SWS	Semesterwochenstunden
en.	Englisch

## Modulübersicht

### Studienbeginn im Wintersemester

1. Sem.	<b>MCh 20 1.1</b> <i>Advanced Inorganic Molecular and Solid State Chemistry</i> V, S 10 LP	<b>MCh 20 1.2</b> <i>Organic Molecules and Materials</i> V, S 10 LP	<b>MCh 20 1.3</b> <i>Advanced Physical Chemistry</i> V, Ü 5 LP	<b>MCh 20 1.4</b> <i>Quantum Chemistry</i> V, Ü 5 LP	30 LP
2. Sem.	<b>MCh 20 2</b> <i>Analytical Methods for Condensed Matter</i> V, S 10 LP	<b>MCh WP*</b> <i>Wahlpflichtmodule</i> 20 LP			30 LP
3. Sem.	<b>MCh WP*</b> <i>Wahlpflichtmodule</i> 20 LP		<b>MCh 20 3</b> <i>Focusing Laboratory Course</i> 10 LP		30 LP
4. Sem.	<b>MCh 20 4</b> <i>Master of Science-Arbeit</i> 30 LP				30 LP

\* Es sind insgesamt 4 Wahlpflichtmodule zu absolvieren.

WP-Module im WS: WP 8, WP 9, WP 10, WP 11, WP 12, WP 13, WP 14, WP 15, WP 16 (Dauer: 2 Semester)

WP-Module im SoSe: WP 1, WP 2, WP 3, WP 4, WP 5, WP 6, WP7, WP 17

## Studienbeginn im Sommersemester

1. Sem.	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 2</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Analytical Methods for Condensed Matter</i></p> <p>V, S <span style="float: right;">10 LP</span></p> </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 1.2</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Organic Molecules and Materials</i></p> <p>V, S <span style="float: right;">10 LP</span></p> </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 1.3</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Advanced Physical Chemistry</i></p> <p>V, Ü <span style="float: right;">5 LP</span></p> </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 1.4</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Quantum Chemistry</i></p> <p>V, Ü <span style="float: right;">5 LP</span></p> </div>	<b>30 LP</b>
2. Sem.	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 1.1</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Advanced Inorganic Molecular and Solid State Chemistry</i></p> <p>V, S <span style="float: right;">10 LP</span></p> </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh WP*</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Wahlpflichtmodule</i></p> <p style="text-align: right;">20 LP</p> </div>			<b>30 LP</b>
3. Sem.	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh WP*</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Wahlpflichtmodule</i></p> <p style="text-align: right;">20 LP</p> </div>		<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 3</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Focusing Laboratory Course</i></p> <p style="text-align: right;">10 LP</p> </div>	<b>30 LP</b>	
4. Sem.	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p style="text-align: center;"><b>MCh 20 4</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Master of Science-Arbeit</i></p> <p style="text-align: right;">30 LP</p> </div>			<b>30 LP</b>	

\* Es sind insgesamt 4 Wahlpflichtmodule zu absolvieren.

WP-Module im WS: WP 8, WP 9, WP 10, WP 11, WP 12, WP 13, WP 14, WP 15, WP 16 (Dauer: 2 Semester)

WP-Module im SoSe: WP 1, WP 2, WP 3, WP 4, WP 5, WP 6, WP 7, WP 17

## Pflichtbereich

<b>Advanced Inorganic Molecular and Solid State Chemistry</b> Modulnr./-code: MCh 20 1.1		 <b>UNIVERSITÄT BONN</b>
<b>1. Inhalte und Qualifikationsziele</b>		
Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Koordinationschemie:</b> Mechanismen von Reaktionen von Koordinationsverbindungen (Ligandenaustausch, Elektronentransferreaktionen)</li> <li>• <b>Reaktionsschritte in der homogenen Katalyse:</b> Oxidative Addition und Reduktive Eliminierung, <math>\sigma</math>-Bindungsmetathesen, Einschleppungs- und Eliminierungsreaktionen</li> <li>• <b>Übergangsmetallverbindungen:</b> Übergangsmetallhydride, Übergangsmetallalkyle, Carben-Komplexe und Olefin-Komplexe (Darstellung, Struktur, Eigenschaften, Bindungsverhältnisse und Reaktionen); Metallaktivierung und Funktionalisierung industrierelevanter Substrate wie Wasserstoff, Alkane, Kohlenmonoxid, Olefine</li> <li>• <b>Hauptgruppenelementorganyle:</b> Elementorganyle der Borgruppe, Hydro- und Carbometallierungsreaktionen</li> <li>• <b>Strukturchemie anorganischer Festkörper:</b> Strukturargumente, Packungstypen in festen Stoffen, Phasenumwandlungen, systematische Ableitung von Strukturen aus den dichtesten Kugelpackungen durch Besetzung von Oktaeder- und Tetraederlücken, Molekülgitter, Ketten-, Schicht- und Raumnetzstrukturen, Verknüpfung von Koordinationspolyedern zur Strukturbeschreibung, Niggli-Formalismus, diamantartige Strukturen.</li> <li>• <b>Intermetallische Phasen und intermetallische Verbindungen:</b> Legierungen, Zintl-Phasen und Zintl-Salze, polykationische und polyanionische Cluster der Hauptgruppenelemente, Wade'sche Regeln</li> <li>• <b>Niedervalente Übergangsmetallverbindungen:</b> magnetische Phänomene, Metall-Metall-Bindungen, Metall-Metall-Mehrfachbindungen, Metallcluster, Clusterkondensation, metallreiche Verbindungen, Clusterverknüpfung</li> <li>• <b>Festkörper als Materialien:</b> Edelsteine, ihre Verwendung und Herstellung, Diamant und Diamantsynthese, Fullerene, Carbon Nanotubes, Graphen</li> <li>• <b>Chemische Bindung in Festkörpern:</b> Einführung in die Bandstrukturtheorie, Zustandsdichte, Kristallorbitale.</li> </ul>	
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erwerb von vertieften Kenntnissen über die wichtigsten Stoffklassen der modernen anorganischen Chemie</li> <li>• Entwicklung des Verständnisses           <ul style="list-style-type: none"> <li>○ für die Eigenschaften von Übergangsmetallhydriden/organylen und Carbenkomplexen</li> <li>○ wichtiger Reaktionstypen der Komplexchemie, der homogenen Katalyse und der Aktivierung kleiner Moleküle an Metallzentren</li> <li>○ für die Strukturen und Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von Festkörpern</li> </ul> </li> <li>• Erwerb von Kenntnissen fortgeschrittener Konzepte zur Beschreibung der Struktur und der chemischen Bindung der Anorganischen Chemie</li> <li>• Anwendung erfolgreicher Lernstrategien</li> <li>• Anwendung der vermittelten Kenntnisse bei der Diskussion unbekannter Verbindungen</li> <li>• Informationsmanagement</li> <li>• kritisches Denken</li> <li>• Problemlösefähigkeit</li> <li>• Analytische Fähigkeiten dahingehend ausbauen, dass Syntheserouten zur Darstellung komplexer Moleküle geplant werden können</li> </ul>	

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Reflexionsfähigkeit schulen</li> <li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li> </ul>					
<b>2. Lehr- und Lernformen</b>						
	LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Fortgeschrittene anorganische Molekül- und Festkörperchemie	en.	60	6	180 (90 / 90)
	S	Seminar zur Vorlesung	en.	20	2	120 (30 / 90)
<b>3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul</b>						
verpflichtend nachzuweisen	Keine					
empfohlen						
<b>4. Verwendbarkeit des Moduls</b>						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Pflicht	1 oder 2	
<b>5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS</b>					<b>6. ECTS-LP</b>	
Studienleistung(en)	Keine					<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.					
<b>7. Häufigkeit</b>			<b>8. Arbeitsaufwand</b>		<b>9. Dauer</b>	
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	<b>300 h</b>		<b>1 Semester</b>	
<b>10. Modulorganisation</b>						
Lehrende(r)	Prof. Dr. N. Kornienko					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. N. Kornienko					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Anorganische Chemie					
<b>11. Sonstiges</b>						
Literatur:	<p>J. F. Hartwig, <i>Organotransition Metal Chemistry</i>, Univ. Science Books.</p> <p>R. H. Crabtree, <i>The Organometallic Chemistry Of The Transition Metals</i>, Wiley.</p> <p>C. Elschenbroich, <i>Organometallics</i>, Wiley-VCH.</p> <p>U. Müller, <i>Anorganische Strukturchemie</i>, Vieweg+Teubner Verlag.</p> <p>J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, <i>Anorganische Chemie: Prinzipien von Struktur und Reaktivität</i>, De Gruyter.</p> <p>L. H. Gade, <i>Koordinationschemie</i>, Wiley-VCH.</p> <p>F. A. Cotton, <i>Advanced Inorganic Chemistry</i>, Wiley.</p> <p>A. R. West, <i>Solid State Chemistry and its Applications</i>, Wiley</p>					

# Organic Molecules and Materials

Modulnr./-code: MCh 20 1.2



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"><li>• <i>Syntheseäquivalent und Umpolung</i>: d/a-Nomenklatur, Umpolung, Acylanionen-Äquivalente</li><li>• <i>moderne Verfahren zur C-C-Knüpfung</i>: C-Nukleophile (Enolate, metallorganische Reagenzien, Ummetallierung, Kreuz- und Homokupplungen), Redoxreaktionen</li><li>• <i>moderne Verfahren zur C=C-Knüpfung</i>: Wittig- und ähnliche Reaktionen, McMurry-Reaktion, metallvermittelte Olefinierungen</li><li>• <i>Stereoselektive Synthese</i>: ex-chiral-pool-Synthesen, chirale Auxiliare, enzymatische Methoden, enantioselektive Katalyse</li><li>• <i>Retrosynthese</i></li><li>• <i>Naturstoffsynthese</i>: Schutzgruppenchemie, Totalsynthese</li><li>• Polymere (linear, verzweigt, vernetzt, Dendrimere)</li><li>• Flüssigkristalle</li><li>• Materialien für die Elektronik/Optoelektronik (OTFTs, OLEDs, Organische Solarzellen)</li><li>• Moderne Analysemethoden</li><li>• Primäre und sekundäre Stoffwechselkreisläufe</li><li>• Enzymklassen und Kofaktoren</li><li>• Biosynthese von Fettsäuren und Polyketiden</li><li>• Biosynthese von Terpenen</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Erwerb von vertieften Kenntnissen über Schlüsselreaktionen und -konzepte der modernen organischen Chemie</li><li>• Entwicklung eines Verständnisses für mehrstufige Reaktionssequenzen</li><li>• Erwerb von vertieften Kenntnissen auf dem Gebiet der Naturstoffchemie und der organischen Materialforschung</li><li>• Ausbau der Kenntnisse um moderne Analysemethoden</li><li>• Ausbau der Fähigkeit Texte zu interpretieren</li><li>• Anwendung erfolgreicher Lernstrategien</li><li>• Informationsmanagement</li><li>• kritisches Denken</li><li>• Problemlösefähigkeiten</li><li>• Analytische Fähigkeiten dahingehend ausbauen, dass Syntheserouten zur Darstellung komplexer Moleküle geplant werden können</li><li>• Entscheidungsfähigkeit weiter ausbauen</li><li>• Reflexionsfähigkeit schulen</li><li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Synthesechemie, Materialien, Naturstoffe	en.	60	6	180 (90 / 90)
	S	Synthesechemie	en.	20	2	120 (30 / 90)

3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul			
verpflichtend nachzuweisen	Keine		
empfohlen			
4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	1
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)			10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
Sommersemester <input type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Die Lehrenden des Kekulé-Instituts für Organische Chemie und Biochemie		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. S. Höger		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	L. Kürti, B. Czakó, <i>Strategic Applications of Named Reactions in Organic Synthesis</i> , Elsevier. L. S. Hegedus, B. C. G. Söderberg, <i>Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules</i> , University Science Books. F. A. Carey, R. J. Sundberg: <i>Advanced Organic Chemistry, Part A and B</i> , Springer.  Weitere Literaturempfehlungen werden in den Lehrveranstaltungen bekannt gegeben.		

# Advanced Physical Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 1.3



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Strukturbildung:</b> Modelle zu Keimbildung, Reifungsprozessen, Grenzflächen, Membranen, Aggregaten, Polymeren, Vesikeln, sowie komplexen Flüssigkeiten</li> <li>• <b>Energetische Anregungen:</b> Grundsätzliche Aspekte, Kopplung von Anregungen, Energietransport und –dissipation, Anwendungsaspekte</li> <li>• <b>Spektroskopie und Bildgebung:</b> Vergleich Ensemble-/Einzelmolekülmethoden, Orts-/Zeitauflösung, Wellenpaketsdynamik, Optische Methoden, Magnetresonanz-Methoden, Rastersonden-Methoden, Fouriertransformation in der Optik und Spektroskopie</li> </ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Anwendung von thermodynamischen Prinzipien und spektroskopischen Methoden aus dem Bachelorstudium auf komplexe Systeme</li> <li>• Vertiefung und Erweiterung der Modellbildung und Entwicklung von Konzepten zur Beschreibung komplexer Materie</li> <li>• Erwerb von Kenntnissen zu fortgeschrittenen spektroskopischen und mikroskopischen Untersuchungsmethoden</li> <li>• Bewertung von Methoden vor dem Hintergrund physikochemischer Problemstellungen</li> <li>• Analytische Problemlösefähigkeit</li> <li>• Kritisches Denken</li> </ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Fortgeschrittene Themen der Physikalischen Chemie	en.	60	2	75 (30 / 45)
	Ü	Übung zur Vorlesung	en.	20	2	75 (30 / 45)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Keine
empfohlen	

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	1

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

Studienleistung(en)	50% der erreichbaren Punkte aus den Übungen	6. ECTS-LP  5
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.	

## 7. Häufigkeit

## 8. Arbeitsaufwand

## 9. Dauer

Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	150 h	1 Semester
---	--	-------	------------

<b>10. Modulorganisation</b>	
Lehrende(r)	Die Lehrenden des Instituts für Physikalische und Theoretische Chemie
Modulkoordinator(in)	Prof.Dr. Ulrich Kubitscheck, ab WS25/26: Jun.-Prof. Dr. Patrycja Kielb
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
<b>11. Sonstiges</b>	
Literatur:	C. Rullière, <i>Femtosecond Laser Pulses</i> , Springer. H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, <i>Principles Of Physical Chemistry</i> , Wiley. W. Demtröder, <i>Laserspektroskopie</i> , Springer. K. Dill, S. Bromberg, <i>Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Chemistry, Physics, and Nanoscience</i> , Garland Science.

# Quantum Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 1.4



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p>Diese Veranstaltung führt in moderne Rechenmethoden der Quantenchemie ein. Sie vermittelt methodische Kenntnisse, die Chemiker heutzutage sowohl zum Verständnis der Fachliteratur unbedingt benötigen als auch um eigene Arbeiten theoretisch zu begleiten. Das Modul folgt einem neu ausgearbeiteten Konzept, welches darauf abzielt, die Quantenchemie als einen „chemienahen“ Wissenschaftszweig darzustellen aber auch die notwendigen Schritte zu einer quantitativ korrekten Behandlung von Molekülen und molekularen Eigenschaften aufzeigt. Dazu werden neben der notwendigen Formelsprache auch chemische Begrifflichkeiten und deren approximative Verbindung zu grundlegenden quantenchemischen Konzepten im Detail diskutiert. Besonderer Wert wird auf die Unterscheidung zwischen messbaren Größen (Observablen) und qualitativen Konzepten gelegt. Weiterhin soll der Weg von einem physikalischen Modell zu seiner mathematischen Behandlung bis hin zu seiner algorithmischen Umsetzung und seiner konkreten Anwendung deutlich gemacht werden.</p> <p><b>Inhalte</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Einführung in die quantitative Beschreibung der Elektronenstruktur</li><li>• Hartree-Fock-Modell und Basissätze</li><li>• Gesamtenergien, Elektronendichten, Orbitalenergien und Orbitale</li><li>• Qualitative Elektronenstruktur von Molekülen anhand des MO-Modells; Populationsanalysen</li><li>• Hückel-Modelle und semi-empirische MO-Methoden</li><li>• Grundlagen von wellenfunktionsbasierten Elektronenkorrelations-verfahren</li><li>• Geometrieoptimierung und Potentialflächen</li><li>• Grundlagen und Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie</li><li>• Thermochemie</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Grundlagen der qualitativen und quantitativen Beschreibung der elektronischen Struktur von Molekülen und deren chemischen und physikalischen Eigenschaften</li><li>• Verständnis moderner Rechenmethoden der Theoretischen Chemie</li><li>• Anwendung und kritische Bewertung der erlernten theoretischen Modelle und Methoden zur rechnerischen oder phänomenologischen Lösung von chemischen Problemen</li><li>• Lernkompetenz</li><li>• Methodenkompetenz</li><li>• Selbstkompetenz</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts-sprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Quantenchemie	en.	60	2	75 (30 / 45)
	Ü	Übung zur Vorlesung	en.	20	2	75 (30 / 45)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Keine
empfohlen	

4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	1
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	50% der erreichbaren Punkte aus den Übungen		5
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	150 h	1 Semester
Sommersemester <input type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. S. Grimme, Dr. A. Hansen		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. S. Grimme		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , Wiley..		

# Analytical Methods for Condensed Matter

Modulnr./-code: MCh 20 2



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"><li>• Fortgeschrittene Anwendungen der NMR-Spektroskopie</li><li>• Grundbegriffe der Kristallographie</li><li>• physikalische Grundlagen der Beugungsphänomene mit Röntgen- und Elektronenstrahlen</li><li>• Anwendung dieser Methoden zur Strukturbestimmung kristalliner und nicht-kristalliner Stoffe</li><li>• Röntgenabsorptions- und Röntgenphotoelektronenspektroskopie für die Untersuchung der physikalischen und elektronischen Struktur</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Fähigkeit zur Anwendung der erworbenen Kenntnisse bei der Interpretation verschiedener Daten aus NMR-, Beugungs- und Röntgenexperimenten</li><li>• Entwicklung von Problemlösefähigkeiten und Ausbau der analytischen Fähigkeiten</li><li>• Aneignung methodischen Wissens und apparativer Kenntnisse</li><li>• kritischer Umgang mit Ergebnissen</li><li>• Erkennen der Grenzen von wissenschaftlichen Methoden</li><li>• Erkennen von „Fallstricken“ und Vermeiden von Fehlinterpretationen</li><li>• Entwicklung des räumlichen Vorstellungsvermögens</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Fortgeschrittene analytische Methoden in der anorganischen Chemie	en.	60	3	120 (45 / 75)
	S	Seminar zur Vorlesung	en.	60	2	90 (30 / 60)
	P	Praktische Aufgaben zu den Themen der Vorlesung	en.	2	3	90 (45 / 45)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Keine
empfohlen	

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	1 oder 2

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

		6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	50% der erreichbaren Punkte aus den Übungen	10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.	

## 7. Häufigkeit

Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>		300 h	1 Semester

<b>10. Modulorganisation</b>	
Lehrende(r)	Die Lehrenden des Instituts für Anorganische Chemie
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. N. Kornienko
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Anorganische Chemie
<b>11. Sonstiges</b>	
Literatur:	<p>W. Massa <i>Kristallstrukturbestimmung</i>, Springer-Verlag.  W. Massa, <i>Crystal Structure determination</i>, Springer.  C. Hammond, <i>The Basics of Crystallography and Diffraction</i>, IUCr Publishers.  W. Borchardt-Ott, H. Sowa, <i>Kristallographie</i>, Springer.  C. E. Housecroft, A. G. Sharpe, <i>Inorganic Chemistry</i>, Pearson.</p>

# Focusing Laboratory Course

Modulnr./-code: MCh 20 3



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

**Inhalte**  
Im Modul sollen die Studierenden anhand einer in sich abgeschlossenen wissenschaftlichen Projektstudie selbständiges wissenschaftliches Arbeiten in experimentellen oder theoretischen chemischen Themenfeldern erlernen. Dazu soll sich der/die Studierende einem in der Forschung aktiven Arbeitskreis anschließen. Das modulbegleitende Seminar vermittelt die für das Projekt benötigten Grund- und Spezialkenntnisse im jeweiligen Themenbereich. Grundlage ist eine umfassende Literaturrecherche zum Thema, die nicht nur das Kernthema sondern auch verwandte und angrenzende Gebiete einschließt. Die erhaltenen Ergebnisse und der aktuelle Literaturstand sollen schriftlich ausgearbeitet sowie in einer mündlichen Präsentation vorgestellt werden. Dieses Modul kann der Vorbereitung auf eine Masterarbeit dienen.

- Qualifikationsziele**
- Vorbereitung auf die theoretische und experimentelle wissenschaftliche Tätigkeit im Rahmen der Masterarbeit
  - Selbständiges wissenschaftliches Arbeiten
  - Eigenständige Nutzung von Recherchemöglichkeiten zur vollständigen Erfassung des Wissensstandes eines Themas
  - Fähigkeit, eigene Arbeiten fachnahem wie fachfremdem Publikum angemessen zu präsentieren
  - Effizientes Zeitmanagement
  - Informationsmanagement
  - Organisationsfähigkeit
  - Weiterentwicklung der Kommunikationsfähigkeiten

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] <sup>1</sup>
	P		en.	1		270
	S		en.	1		30

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandene Module MCh 20 1.2, MCh 20 1.3, MCh 20 1.4 und ein beständenes Modul des Wahlpflichtbereichs WP 1 bis WP 17
empfohlen	

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	2 oder 3

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

## 6. ECTS-LP

Studienleistung(en)	Keine	<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Präsentation (40%) und Protokoll (60%); en.	

## 7. Häufigkeit

## 8. Arbeitsaufwand

## 9. Dauer

Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	<b>300 h</b>	<b>1 Semester</b>
---	--	--------------	-------------------

## 10. Modulorganisation

Lehrende(r)	Die Lehrenden der Fachgruppe Chemie (MNF) und andere
Modulkoordinator(in)	Der oder die von dem oder der Studierenden gewählte Betreuer oder Betreuerin
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF) und andere

## 11. Sonstiges

Anmerkungen:

<sup>1</sup>: Die Verteilung des Workloads auf Präsenzzeit und Selbststudium ist für jede Studierende und jeden Studierenden individuell und ergibt sich nach Absprache mit der jeweiligen Betreuerin oder dem jeweiligen Betreuer.

# Master of Science Arbeit

Modulnr./-code: MCh 20 4



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	Die Themen zur Masterarbeit werden von dem Hochschullehrer oder der Hochschullehrerin ausgegeben, den oder die sich der oder die Studierende als Betreuer oder Betreuerin gewählt hat.
Qualifikationsziele	Mit der Anfertigung der Masterarbeit sollen die Studierenden zeigen, dass sie innerhalb des Zeitrahmens von sechs Monaten mit dem im vorangegangenen Studium erworbenen Wissen und den Methoden der modernen chemischen Forschung einen wissenschaftlichen Befund erarbeiten und schriftlich darstellen können. Eigene Resultate sollen in angemessener Weise einbezogen, diskutiert und bewertet werden. Dabei sollen folgende Schlüsselkompetenzen adressiert werden: <ul style="list-style-type: none"><li>• Befähigung zu selbständiger wissenschaftlicher Arbeit</li><li>• Schriftliche Ausdrucksfähigkeit</li><li>• Selbstmanagement, Selbstorganisation und Selbstmotivation</li><li>• Kritisches Denken</li><li>• Fähigkeit, Informationen zusammenzutragen, zu verstehen, auszuwerten und in gedankliche Strukturen einzuordnen</li><li>• Effizientes Zeitmanagement</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h]
	Eigen- ständige Arbeit		en.	1		900 <sup>1</sup>

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandene Module MCh 20 1.1, MCh 20 1.2, MCh 20 1.3, MCh 20 1.4, MCh 20 2 und insgesamt 60 LP aus den Modulprüfungen des Masterstudiengangs Chemistry
empfohlen	

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Pflicht	3 oder 4

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

## 6. ECTS-LP

Studienleistung(en)	Vortrag über Ergebnisse der Masterarbeit	30
Prüfungen und Prüfungssprache	Masterarbeit; en.	

## 7. Häufigkeit

## 8. Arbeitsaufwand

## 9. Dauer

Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	900 h	1 Semester
---	--	-------	------------

## 10. Modulorganisation

Lehrende(r)	Die Lehrenden der Fachgruppe Chemie (MNF)
Modulkoordinator(in)	Der oder die von dem oder der Studierenden gewählte Betreuer oder Betreuerin
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF)

## 11. Sonstiges

Anmerkungen:	<sup>1</sup> : Die Verteilung des Workloads auf Präsenzzeit und Selbststudium ist für jede Studierende und jeden Studierenden individuell und ergibt sich nach Absprache mit der jeweiligen Betreuerin oder dem jeweiligen Betreuer.
--------------	--

## Wahlpflichtbereich

<b>Industrial Inorganic Molecular Chemistry</b> Modulnr./-code: MCh 20 WP 1		 UNIVERSITÄT <b>BONN</b>				
<b>1. Inhalte und Qualifikationsziele</b>						
Inhalte	<p>Vorlesung und Seminar:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Koordinationschemie und Bindungstheorien</li> <li>• Spektroskopische und physikalische Methoden</li> <li>• Aktivierung kleiner Moleküle</li> <li>• Nutzung/Umwandlung von reichlich vorhandenen Rohstoffen</li> <li>• Aktivierung von Bindungen</li> <li>• Katalysen und Mechanismen</li> <li>• Fortgeschrittene Struktursuche mit der Cambridge Structural Database</li> <li>• Datenauswertung</li> <li>• Bewährte Praktiken für wissenschaftliches Schreiben und mündliche Präsentationen</li> </ul> <p>Laborkurs:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Synthesen und Reaktivitätsstudien von molekularen Übergangsmetall- und Hauptgruppenelementverbindungen unter Inertgasbedingungen (Schlenk-, Vakuumleitungs- und Glove-Box-Techniken)</li> <li>• Ausbildung in Reinigungs- und Charakterisierungsmethoden unter streng anaeroben Bedingungen</li> <li>• Aufreinigungsmethoden: Vakuumdestillation, Vakuumsublimation, Kristallisation, Säulenchromatographie unter streng anaeroben Bedingungen</li> <li>• Charakterisierungsmethoden: heteronukleare NMR-, IR-, Raman- und UV-Vis-Spektroskopie, Massenspektrometrie, zyklische Voltammetrie, Einkristall-Röntgendiffraktometrie</li> <li>• Sicherheit im Labor</li> <li>• SciFinder/Beilstein-Suchen</li> <li>• Houben/Weyl (Wissenschaft der Synthese)</li> <li>• Chemical Abstracts</li> </ul>					
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erwerb fortgeschrittener Kenntnisse auf dem Gebiet der anorganischen Molekülchemie und der homogenen Katalyse</li> <li>• Vertieftes Verständnis der Bindungen, der Struktur, der Reaktionen und der industriellen Verwendung von Verbindungen der Übergangsmetalle und der Hauptgruppenelemente</li> <li>• Kritische Lektüre von wissenschaftlichen Arbeiten</li> <li>• Erwerb von Kenntnissen durch die Lektüre aktueller wissenschaftlicher Arbeiten</li> <li>• Vertiefung der Fähigkeiten zur mündlichen und schriftlichen Präsentation</li> <li>• Verbesserung der Fähigkeiten zur Ausarbeitung wissenschaftlicher Anträge</li> <li>• Vertiefung der Kenntnisse über spektroskopische Methoden und deren Anwendung in der anorganischen Molekülchemie</li> <li>• Vertiefte Kenntnisse über molekulare Verbindungen von Übergangsmetallen und Hauptgruppenelementen und deren Anwendung in industriellen Prozessen</li> <li>• Fortgeschrittene Kenntnisse analytischer und spektroskopischer Techniken und deren Anwendung in der anorganischen Molekülchemie</li> <li>• Ausbildung in speziellen experimentellen Techniken zur Herstellung und Charakterisierung von sehr luft- und feuchtigkeitsempfindlichen Verbindungen</li> </ul>					
<b>2. Lehr- und Lernformen</b>						
	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h]

						(Präsenz / SLZ)
	V/S	Industrielle Anorganische Molekülchemie	en.	14	6	170 (80 / 90)
	P	Versuche zu Vorlesungs- und Seminarthemen	en.	2-3	2	130 (40 / 90)
<b>3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul</b>						
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.1					
empfohlen						
<b>4. Verwendbarkeit des Moduls</b>						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Wahlpflicht	2 oder 3	
<b>5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS</b>						<b>6. ECTS-LP</b>
Studienleistung(en)	Durchführung von Laborexperimenten, Kurzantrag, Antragspräsentation (mündlich), Teilnahme an Diskussionen, kurze Abfragen					10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en. Schriftliche Abschlussarbeit; en.					
<b>7. Häufigkeit</b>			<b>8. Arbeitsaufwand</b>		<b>9. Dauer</b>	
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h		1 Semester	
<b>10. Modulorganisation</b>						
Lehrende(r)	Prof. Dr. C. Lu und Jun.-Prof. Dr. A. Bismuto					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. C. Lu und Jun.-Prof. Dr. A. Bismuto					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Anorganische Chemie					
<b>11. Sonstiges</b>						
Literatur:	<p>J. F.Hartwig, <i>Organotransition Metal Chemistry</i>, Univ. Science Books  M. Lattman, R. A. Kemp, <i>Modern Aspects of Main Group Chemistry</i> (Acs Symposium Series, Band 917)  L. Que, Jr. (ed) <i>Physical Methods in Bioinorganic Chemistry</i>, Univ. Science Books  A. Goodman <i>Why Bad Presentations Happen to Good Causes</i>, e-book</p> <p>Während des Kurses wird wöchentlich Literatur zum Lesen zugewiesen.</p>					

# Supramolecular Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 2



UNIVERSITÄT **BONN**

## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"><li>• Historische Entwicklung der Supramolekularen Chemie</li><li>• Begriffe und Definitionen</li><li>• nicht-kovalente Wechselwirkungen</li><li>• Charakterisierung von supramolekularen Bindungsphänomenen</li><li>• Bindungskonstanten und thermodynamische Daten</li><li>• analytische Methoden</li><li>• Erkennung von ionischen Substraten – Kationen, Anionen und Ionenpaare</li><li>• Erkennung neutraler Moleküle – privilegierte Struktur- und Bindungsmotive</li><li>• Erkennung chiraler Substrate</li><li>• Selbstassemblierungsprozesse – grundlegende Überlegungen</li><li>• Selbstassemblierung via Wasserstoffbrückenbindung</li><li>• Koordinationsgesteuerte Selbstassemblierung</li><li>• Oberflächenstrukturierung</li><li>• Supramolekulare Reaktivitätskontrolle</li><li>• Rotaxane, Catenane, Knoten und Molekulare Maschinen</li><li>• Dendrimere</li><li>• Anwendung als Sensoren</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Erwerb von grundlegenden Kenntnissen und Konzepten im Bereich der Supramolekularen Chemie und Anwendung dieses Wissens in Theorie und Praxis</li><li>• Erwerb von Kenntnissen über die grundlegenden Typen nicht-kovalenter Wechselwirkungen sowie deren gezielte Anwendung zur Entwicklung von supramolekularen Aggregaten und Wirt-Gast-Komplexen</li><li>• Ausbau der handwerklichen Fähigkeiten im organisch-chemischen Labor</li><li>• Ausbau der Kenntnisse über moderne analytische Techniken</li><li>• schriftliche Dokumentation von wissenschaftlichen Versuchen</li><li>• effizientes Zeitmanagement</li><li>• Informationsmanagement</li><li>• Organisationsfähigkeit</li><li>• weitergehende Schulung des experimentellen Geschicks</li><li>• weitergehende Schulung der Beobachtungsgabe</li><li>• Entwicklung von Problemlösefähigkeiten</li><li>• Ausbau der analytischen Fähigkeiten, z.B. die Interpretation von experimentellen Befunden zu supramolekularen Phänomenen</li><li>• Entscheidungsfähigkeit weiter ausbauen</li><li>• Sorgfalt und Verantwortungsbewusstsein weiter schulen</li><li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li><li>• den (selbst-)kritischen Umgang mit Ergebnissen weiter schulen</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz/ SLZ)
V/S	Supramolekulare Chemie	en.	30	4	120 (60 / 60)
P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	2	6	180 (90 / 90)

3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2		
empfohlen			
4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. A. Lützen, Dr. S.-S. Jester, Dr. L. von Krbek		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. A. Lützen		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	J. W. Steed, J. L. Atwood, <i>Supramolecular Chemistry</i> , John Wiley & Sons. Weitere Literaturempfehlungen werden in den Lehrveranstaltungen bekannt gegeben.		

# Advanced Quantum Chemistry Methods

Modulnr./-code: MCh 20 WP 4



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p>Das Modul richtet sich an Studierende mit verstärktem Interesse an der theoretischen Behandlung von Molekülen, molekularen Eigenschaften und chemischen Reaktionen. Nach Wiederholung der HF-Theorie und Einführung neuer grundlegender theoretischer Konzepte zur quantitativen Behandlung des N-Elektronenproblems, werden die Standardmodelle der korrelierten ab initio-Quantenchemie behandelt (CI, MP, CC). Die numerische Genauigkeit der verschiedenen Methoden wird anhand von Benchmarkergebnissen an kleinen Molekülen dokumentiert. Die zur Implementation der Methoden notwendigen Schritte werden anhand einiger Beispiele aufgezeigt und die algorithmische Effizienz verschiedener Implementationsstrategien bzw. spezielle numerische Methoden zur Behandlung von großen Systemen werden diskutiert. Weitere zentrale Themen sind die Dichtefunktionaltheorie bzw. Näherungsfunktionale und ihre Eigenschaften/Grenzen sowie die theoretische Beschreibung von nicht-kovalenten Wechselwirkungen. Weiterhin erfolgt eine Einführung in die Quantendynamik und die Behandlung von schweren Elementen und elektronisch angeregten Zuständen. Das angeschlossene Programmierpraktikum bietet die Möglichkeit, anhand eines einfachen Hartree-Fock- und MP2-Programms Zugang zu den praktischen Fragen der quantenchemischen Methodenentwicklung zu erhalten und die Vorlesungsinhalte durch praktisches Arbeiten zu vertiefen. Im zweiten Teil des Praktikums wird eine Vielzahl von typischen chemischen Problemen (Struktur, Thermochemie, Spektroskopie) mit quantenchemischen Standardmethoden behandelt.</p> <p><b>Inhalte:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Wiederholung der Hartree-Fock-Theorie</li><li>• Effiziente Methoden für große Systeme</li><li>• Qualitative Diskussion des Elektronenkorrelationsproblems</li><li>• Zweite Quantisierung und Diagrammtechnik</li><li>• Wellenfunktionsbasierte Korrelationsmethoden (CI, MP, CC)</li><li>• Basissatzextrapolation und explizite Korrelation</li><li>• Relativistische Effekte und effektive Potentiale</li><li>• Dichtefunktionaltheorie</li><li>• Theoretische Spektroskopie und molekulare Eigenschaften</li><li>• Elektronisch angeregte Zustände, Multi-Referenz-Methoden</li><li>• Quantendynamik</li><li>• Nicht-kovalente Wechselwirkungen und Dispersionskorrekturen</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Vertiefende Kenntnis der Methoden und Konzepte der Quantenchemie zur quantitativen Behandlung der Elektronenstruktur von Atomen und Molekülen</li><li>• Einführung in die Programmiersprache Fortran und Umsetzung quantenchemischer Methoden in Computerprogramme</li><li>• Praktische Durchführung und Interpretation quantenchemischer Berechnungen</li><li>• Vorbereitung auf eigene Arbeiten im Bereich der ab initio-Quantenchemie</li><li>• Lernkompetenz</li><li>• Methodenkompetenz</li><li>• Selbstkompetenz</li></ul>

2. Lehr- und Lernformen						
	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Quantenchemie II	en.	20	2	60 (30 / 30)
	S	Seminar zur Vorlesung	en.	20	2	80 (30 / 50)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	1	5	160 (75 / 85)
3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul						
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.4					
empfohlen						
4. Verwendbarkeit des Moduls						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Wahlpflicht	2 oder 3	
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS						6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums und Seminarvortrag					10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.					
7. Häufigkeit			8. Arbeitsaufwand	9. Dauer		
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und	<input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester		
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Sommersemester	<input type="checkbox"/>				
10. Modulorganisation						
Lehrende(r)	Prof. Dr. S. Grimme, Dr. A. Hansen					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. S. Grimme					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie					
11. Sonstiges						
Literatur:	A. Szabo, N. S. Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry</i> . T Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen, <i>Molecular Electronic Structure Theory</i> , Wiley.					

# Surface Science and Electrochemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 5



UNIVERSITÄT **BONN**

## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Thermodynamik von Grenzflächen und Oberflächen</li> <li>• Geometrische und elektronische Struktur von Grenzflächen</li> <li>• Adsorption und Desorption</li> <li>• Chemische Bindung an Oberflächen</li> <li>• Mechanismen der heterogenen Katalyse</li> <li>• Experimentelle Methoden der Oberflächenanalyse</li> <li>• Schichtwachstum, Keimbildung</li> <li>• Modelle der elektrochemischen Doppelschicht</li> <li>• Elektrochemische Kinetik, Marcus-Theorie</li> <li>• Elektrokatalyse</li> <li>• Elektrochemische Untersuchungsmethoden</li> <li>• Elektrochemische in-situ-Charakterisierung</li> <li>• Technische Anwendung von Prozessen an Grenzflächen</li> </ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Eigenschaften, Konzepte und Modelle in der Oberflächen- und Elektrochemie.</li> <li>• Experimentelle Methoden zur Untersuchung von Oberflächen und elektrochemischen Grenzflächen sowie verwandten chemischen Prozessen.</li> <li>• Verständnis und Anwendung von Konzepten und Methoden</li> <li>• Durchführung experimenteller Untersuchungen</li> <li>• Grundlegendes Verständnis moderner Fachliteratur</li> </ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Oberflächen- und Elektrochemie	en.	30	3	135 (45 / 90)
	S	Seminar zur Vorlesung	en.	30	1	45 (15 / 30)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	2	4	120 (60 / 60)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3
empfohlen	

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

## 6. ECTS-LP

Studienleistung(en)	Antestate zum Praktikum und Praktikumsprotokolle	<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.	

## 7. Häufigkeit

## 8. Arbeitsaufwand

## 9. Dauer

Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	<b>300 h</b>	<b>1 Semester</b>
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			

<b>10. Modulorganisation</b>	
Lehrende(r)	Prof. Dr. M. Sokolowski
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. M. Sokolowski
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
<b>11. Sonstiges</b>	
Literatur:	G. Attard, C. Barnes, <i>Surfaces</i> , Oxford Univ. Press. K. W. Kolasinski, <i>Surface Science: Foundations of Catalysis and Nonoscience</i> , Wiley. W. Schmickler, E. Santos, <i>Interfacial Electrochemistry</i> , Springer. D. Pletcher, Southampton Electrochemistry Group, <i>Instrumental Methods in Electrochemistry</i> , Elsevier Science & Technology. C. H. Hamann, A. Hamnett, W. Vielstich, <i>Electrochemistry</i> , Wiley-VCH.

# Chemical Biology / Medicinal Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 6



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Theorie:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Darstellung und Gewinnung von Wirkstoffen</li><li>• Interaktion von Wirkstoffen mit Target-Proteinen, funktionelle In-vitro-Assays</li><li>• Synthese, Struktur und Anwendung von Nukleinsäuren, Peptiden und Proteinen</li><li>• Organische Chemie enzymkatalysierter Reaktionen</li><li>• Glycochemie</li><li>• Lipide und Membranchemie</li><li>• Strategien zur Wirkstoffsuche</li><li>• Katalytische Antikörper</li><li>• Kombinatorische Chemie und Biochemie</li><li>• Phagen- und Ribosomen-Display</li><li>• Aptamere</li><li>• Ribozyme, RNA-Technologien</li><li>• Modelle zur Entstehung des Lebens</li></ul> <p><b>Praktikum:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Interaktionsanalysen von Wirkstoffen mit Target-Proteinen</li><li>• Taq-Polymerase/PCR Primer Design</li><li>• Kinetik enzymkatalysierter Reaktionen</li><li>• HPLC/MS</li><li>• Gel-shift-Assays</li><li>• Fluoreszenz-Resonanzenergie-Transfers</li><li>• funktionelle Enzym-Assays</li><li>• Synthese eines Wirkstoffs</li><li>• Isolierung eines pharmakologisch aktiven Naturstoffs</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Kenntnis von Synthese und Eigenschaften der Biopolymere</li><li>• Kenntnis aktueller Konzepte der Bioorganischen Chemie, der Kombinatorischen Chemie, der Medizinischen Chemie und der Chemischen Biologie</li><li>• Anwendung der Konzepte auf moderne biologische und biotechnologische Fragestellungen</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichts-sprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
V	Medizinische Chemie und Chemische Biologie	en.	6	3	90 (45 / 45)
S	Seminar zur Vorlesung	en.	6	0,5	20 (7,5 / 12,5)
P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	2	5,5	190 (82,5 / 107,5)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2
empfohlen	

4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
	B. Sc. Molekulare Biomedizin	Wahlpflicht	
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Praktikumsprotokolle		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. C. E. Müller, Prof. Dr. M. Gütschow, Prof. Dr. M. Famulok, Prof. Dr. G. Mayer		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. C. E. Müller		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Molekulare Biomedizin (MNF); Fachgruppe Pharmazie (MNF)		
11. Sonstiges			
Literatur:	A. Miller, J. Tanner, <i>Essentials of Chemical Biology: Structure and Dynamics of Biological Macromolecules</i> , Wiley. G. L. Patrick, <i>An Introduction to Medicinal Chemistry</i> , Oxford University Press.		

# Organometallic Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 7



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Theorie:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Grundlagen der Katalyse</li><li>• Anwendung moderner katalytischer Methoden für die Synthese komplexer organischer Verbindungen</li><li>• Diskussion von Reaktionsmechanismen hinsichtlich der Selektivität</li><li>• Diskussion essentieller Aspekte der Nachhaltigkeit für die Anwendung katalytischer Reaktionen im großen und industriellen Maßstab. Rohstoffe.</li><li>• Diskussion der Diversity-Oriented-Synthesis im Kontext katalytisch kontrollierter Reaktionen</li></ul> <p><b>Praktikum:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Ausgewählte Aspekte der Labortätigkeit: Reaktionskontrolle, automatisierte Chromatographie, HPLC, Reaktionsoptimierung</li><li>• Identifizierung von Reaktionsprodukten mittels NMR, Bestimmung von Enantiomerenverhältnissen durch HPLC</li><li>• Interaktive Diskussion von Reaktionsmechanismen</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Vertiefte Kenntnisse moderner metallorganischer Reaktionen</li><li>• Verständnis und Bewertung komplexer metallorganischer Mechanismen und deren Einfluss auf die Selektivität</li><li>• Schlüsselkonzepte der Katalyse von Open-Shell-Intermediaten</li><li>• Fortgeschrittene Labortätigkeiten</li><li>• schriftliche Dokumentation von wissenschaftlichen Versuchen</li><li>• effizientes Zeitmanagement</li><li>• Informationsmanagement</li><li>• Organisationsfähigkeit</li><li>• weitergehende Schulung des experimentellen Geschicks</li><li>• weitergehende Schulung der Beobachtungsgabe</li><li>• Entwicklung von Problemlösefähigkeiten</li><li>• Ausbau der analytische Fähigkeiten, z.B. die Anwendung der Konzepte der Metallorganischen Chemie und unabhängiges Verständnis komplexer Reaktionen für fortgeschrittene Anwendungen in der organischen Synthese</li><li>• Entscheidungsfähigkeit weiter ausbauen</li><li>• Sorgfalt und Verantwortungsbewusstsein weiter schulen</li><li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li><li>• den (selbst)kritischen Umgang mit Ergebnissen weiter schulen</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Metallorganische Chemie	en.	30	4	150 (60 / 90)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung	en.	1-5	6	150 (90 / 60)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2
empfohlen	

4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Bericht zum Praktikum		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. A. Gansäuer		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. A. Gansäuer		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	L. S. Hegedus, B. C. G. Söderberg, <i>Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules</i> , University Science Books.  Weitere Literaturempfehlungen werden in den Lehrveranstaltungen bekannt gegeben.		

# Molecular Dynamics of Time Dependent Phenomena

Modulnr./-code: MCh 20 WP 8



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Monoatomare Systeme:</b> Newtonsche Dynamik, Integrationsalgorithmen, Eigenschaften; thermodynamische Zustandskontrolle: Konstante Temperatur, konstanter Druck; Freie Energie-Berechnungen (Thermodynamische Integration); molekulare Systeme: Intramolekulare Kräfte, langreichweitige Kräfte; fortgeschrittene Methoden: Polarisierbare Kraftfelder, Molekulardynamik-Simulationen, Entropie, Reaktionen, State-Of-The-Art-Methoden und –Tools werden für die Berechnung von Korrelationsfunktionen eingesetzt, Schwingungsspektren für die Struktur von Systemen der meisten Arten kondensierter Materie (z.B. Flüssigkeiten und Lösungsmittelleffekte).</li> <li>• <b>Quantendynamik:</b> Numerische Propagation der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung in der An-/Abwesenheit elektrischer Felder, semi-klassischer Ansatz für lineare und nicht-lineare optische Spektroskopie, zeitabhängiger Franck-Condon-Faktor, Überganganregung und stimulierte Emission, bound-to-bound- und bound-to-free-Übergänge, Femtochemie und Photodissoziation dreiatomiger Moleküle/Ionen.</li> <li>• <b>Ultrafast Laser Spectroscopy:</b> Eigenschaften ultraschneller optischer Pulse, Phasengeschwindigkeit vs. Gruppengeschwindigkeit, Phasen-verzögerung vs. Gruppenverzögerung, Phasengeschwindigkeitsdispersion vs. Gruppengeschwindigkeitsdispersion, Dispersion höherer Ordnung, spektrale Amplitude und spektrale Phase, Autokorrelationsfunktion des elektrischen Feldes, Frequency-resolved Optical Gating, Pump-Probe-Spektroskopie.</li> <li>• <b>Ultrafast Laser-Praktikum:</b> Durchführung von Experimenten unter Einsatz eines Ti:Saphir-Lasers mit Kerr-Linsen-Modenkopplung, der von einem frequenzverdoppelten Nd:YVO4-Laser gepumpt wird. Messung der Gruppenverzögerung von optisch transmittiven Materialien durch ein Korrelations-Pump-Probe-Experiment. Erlernen der Funktionsweise eines Lasers, eines Photonendetektors, eines Lock-In-Verstärkers und opto-mechanischer Komponenten.</li> </ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fortgeschrittene Kenntnisse moderner theoretischer und experimenteller Methoden in den Bereichen zeitaufgelöste Spektroskopie, Wellenpaketdynamik und Molekulardynamik</li> <li>• Verständnis des Zusammenspiels von Experiment und Theorie</li> <li>• eigenständige Durchführung und Auswertung von ultraschnellen Laser-Experimenten</li> <li>• Anwendung der Kenntnisse zur Lösung anspruchsvoller theoretischer und praktischer Probleme, z.B. Programmieren und Vortragen</li> </ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
V	Molekulardynamische Simulationen, Quantendynamik	en.	30	2	60 (30 / 30)
S	Seminar zu den Themen der Vorlesung	en.	30	2	80 (30 / 50)
P	Versuche zu den Themen der Vorlesung	en.	3	4	160 (60 / 100)

3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3		
empfohlen			
4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Bericht zum Praktikum		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. B. Kirchner, Prof. Dr. P. Vöhringer		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. B. Kirchner, Prof. Dr. P. Vöhringer		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation</i> , Acad. Press. M. P. Allen, D. J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i> , Clarendon Press. G. Fleming, <i>Chemical Applications of Ultrafast Spectroscopy</i> , U. S. Oxford Univ. Press. S. Mukamel, <i>Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy</i> , Oxford Univ. Press.		



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

### Inhalte

#### Theorie:

- Polymerisationsmethoden, Molekulargewichte und deren Bestimmung
- Kettenkonformation, Kautschukelastizität
- Phasenumwandlungen in Polymeren ( $T_g$ ,  $T_m$ ), Viskoelastizität
- Stufenwachstumsreaktionen (Polyester, Polyamide, Polysiloxane, Polyurethane, Dendrimere, konjugierte Polymere)
- Kinetik der Polykondensation
- Kontrollierte Reaktionen
- Radikalische Polymerisation, Homopolymere (Kinetik, Molekulargewicht), Kettenübertragung, Copolymerisation, Emulsionspolymerisation, kontrollierte radikalische Polymerisation
- Anionische Polymerisation, Polyacrylate
- Charakterisierung (Viskosität, GPC, Osmose, Lichtstreuung, MALDI-TOF Spektrometrie, NMR)
- Kationische Polymerisation
- Polyolefine
- Metathese-Polymerisation (ROMP, ADMET)
- Kristallinität in Polymeren
- Supramolekulare Polymere
- Verarbeitung und Recycling
- Industrielle Aspekte der Polymerchemie

#### Praktikum:

Auswahl an Versuchen zu folgenden Themen:

- Radikalische Polymerisation in Substanz
- Molekulargewichtsbegrenzung durch Regler
- Emulsionspolymerisation
- Kontrollierte radikalische Polymerisation
- Polykondensation, Polyaddition
- Viskosimetrie
- Gelpermeationschromatographie (GPC)
- Phasenumwandlungen in Polymeren (DTA, DSC)
- Kautschukelastizität

Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erwerb von Kenntnissen über Synthese, Eigenschaften und Anwendungen von Polymeren</li> <li>• Erwerb von Kenntnissen über moderne Methoden zur Charakterisierung von Polymeren</li> <li>• Ausbau der handwerklichen Fähigkeiten im organisch-chemischen Labor</li> <li>• schriftliche Dokumentation von wissenschaftlichen Versuchen</li> <li>• effizientes Zeitmanagement</li> <li>• Informationsmanagement</li> <li>• Organisationsfähigkeit</li> <li>• weitergehende Schulung des experimentellen Geschicks</li> <li>• weitergehende Schulung der Beobachtungsgabe</li> <li>• Entwicklung von Problemlösefähigkeiten</li> <li>• Ausbau der analytischen Fähigkeiten, z.B. die Anwendung der Konzepte der Makromolekularen Chemie bei der eigenständigen Synthese und Charakterisierung von Polymeren</li> <li>• Entscheidungsfähigkeit weiter ausbauen</li> <li>• Sorgfalt und Verantwortungsbewusstsein weiter schulen</li> <li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li> <li>• den (selbst-)kritischen Umgang mit Ergebnissen weiter schulen</li> </ul>					
<b>2. Lehr- und Lernformen</b>						
	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V/S	Makromolekulare Chemie	en.	30	4	150 (60 / 90)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung	en.	2-3	4	150 (60 / 90)
<b>3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul</b>						
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2					
empfohlen						
<b>4. Verwendbarkeit des Moduls</b>						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Wahlpflicht	2 oder 3	
<b>5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS</b>						<b>6. ECTS-LP</b>
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum					<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.					
<b>7. Häufigkeit</b>			<b>8. Arbeitsaufwand</b>		<b>9. Dauer</b>	
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und	<input type="checkbox"/>	<b>300 h</b>		<b>1 Semester</b>	
Sommersemester <input type="checkbox"/>	Sommersemester					
<b>10. Modulorganisation</b>						
Lehrende(r)	Prof. Dr. S. Höger, Dr. Gabriele Richardt					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. S. Höger					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie					
<b>11. Sonstiges</b>						
Literatur:	G. Odian, <i>Principles of Polymerization</i> , Wiley Interscience. S. Koltzenburg, M. Maskos, O. Nuyken, <i>Polymere</i> , Springer Spektrum.  Weitere Literaturempfehlungen werden in den Lehrveranstaltungen bekannt gegeben.					

# Inorganic Materials

Modulnr./-code: MCh 20 WP 10



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Grundlagen zu Anorganischen Materialien:</b> Metalle, Halbleiter, Dielektrika, Keramiken, Gläser, Nanomaterialien; Zusammenhänge zwischen Struktur, chemischer Bindung und Eigenschaften; elektronische Struktur von Festkörpern; Thermodynamik heterogener Gleichgewichte (fest-flüssig-gasförmig); Homogenitätsbereich von Phasen; elektronische Struktur von Ionen der d- und f-Elemente.</p> <p><b>Festkörpersynthesen:</b> Festkörperreaktionen, Sol-Gel-Verfahren, Hydrothermal-Synthesen, Kristallisation aus der Gasphase (Fest-Gas-Reaktionen, chemischer Transport), Mikrowellen assistierte Synthesen, Synthese thermodynamisch metastabiler Feststoffe, Syntheseverfahren für Nanomaterialien.</p> <p><b>Charakterisierung:</b> Beugungsmethoden; optische Spektroskopie (UV/VIS, IR, Raman-Spektroskopie); Elektronenspektroskopie (EDX, EELS), Kernmagnetische Resonanz; Magnetische Messungen; optische Charakterisierung (Licht- und Elektronenmikroskopie).</p> <p><b>Materialeigenschaften/Anwendungen:</b> Feststoffionenleiter und deren Anwendung in der Brennstoffzelle; Funktionskeramiken mit dielektrischen und magnetischen Eigenschaften (Piezoelektrika, Spintronics, etc.) und deren Anwendungen in elektronischen Komponenten; heterogene Katalyse (z.B. Fischer-Tropsch, Haber-Bosch, Dreiwege-Katalysator); optische Eigenschaften und Anwendungen in Farb- und Leuchtpigmenten.</p> <p><b>Praktikum:</b> Anspruchsvolle Feststoffsynthesen (luft- und/oder feuchtigkeitsempfindliche Verbindungen, definierte Reaktionsatmosphäre, metastabile Phasen):</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Chemisches Transportexperiment inkl. der Berechnung der heterogenen Gleichgewichte und der Transportrate</li><li>• Festkörperreaktionen gefolgt von Phasenbestimmung der Produkte mittels Beugungsmethoden und Mikrobereichsanalysen am Elektronenmikroskop</li><li>• Sol-Gel-Synthese eines Films auf Substrat und Bestimmung der Kristallstruktur und der Mikrostruktur als Funktion der Synthesetemperatur</li><li>• Experimente zur Herstellung von nanoskaligen Kristallen und deren Charakterisierung mit Beugungsmethoden und elektronenmikroskopischen Methoden</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Erwerb von vertieften Kenntnissen bzgl. der Synthese, Charakterisierung, Struktur, Eigenschaften und Anwendungen von anorganischen Materialien</li><li>• Sichere Durchführung von Synthesen und Charakterisierung der Produkte im Bereich Anorganische Festkörperchemie</li><li>• Fähigkeit, wissenschaftliche Ergebnisse in mündlicher und schriftlicher Form angemessen zu präsentieren</li></ul>

2. Lehr- und Lernformen						
	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V	Anorganische Materialien	en.	20	4	120 (60 / 60)
	S	Seminar zur Vorlesung	en.	20	1	40 (15 / 25)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung	en.	2	4	140 (60 / 80)
3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul						
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.1					
empfohlen						
4. Verwendbarkeit des Moduls						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Wahlpflicht	2 oder 3	
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS						6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum					10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.					
7. Häufigkeit			8. Arbeitsaufwand	9. Dauer		
Wintersemester	<input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und	300 h	1 Semester		
Sommersemester	<input type="checkbox"/>	Sommersemester				
10. Modulorganisation						
Lehrende(r)	Prof. Dr. R. Glaum, Prof. Dr. J. Beck, Dr. W. Assenmacher, Dr. J. Daniels					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. R. Glaum					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Anorganische Chemie					
11. Sonstiges						
Literatur:	A. R. West, <i>Solid State Chemistry and Its Applications</i> , Wiley. L. E. Smart, E. A. Moore, <i>Solid State Chemistry</i> , Yonsei Univ. Books. L. H. Gade, <i>Koordinationschemie</i> , Wiley-VCH.					

# Biophysical Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 11



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Moleküle der Zelle I:</b> Wasser, Ionen, Lipide, Nukleinsäuren, Proteine, Saccharide.</p> <p><b>Aufbau von Zellen:</b> Prokaryoten und Eukaryoten.</p> <p><b>Moleküle der Zelle II – Proteine:</b> Physikalische Wechselwirkungen in Proteinen (Elektrostatik inklusive Debye-Hückel-Theorie, dipolare Wechselwirkungen, sterische Abstoßung, Wasserstoffbrückenbindung, hydrophober Effekt), Simulation von Proteinstruktur und -dynamik (MD-Simulation), spezifische Bindung/molekulare Erkennung, Molecular Crowding (statistisches Modell, Einfluss auf Bindungskonstanten, Strukturumwandlungen).</p> <p><b>Moleküle der Zelle III – RNA:</b> Struktur und Funktionsweise von Ribozymen: Mechanismus und Einfluss von Metallionen. Struktur und Funktionsweise von Riboswitches: Schaltmechanismen und Einfluss auf die Genexpression. Kleine RNAs.</p> <p><b>Moleküle der Zelle IV – Biomembranen:</b> Hydrophober Effekt, Selbstaggregation und Fluid-Mosaic Modell, Membranpotentiale (Diffusionspotential, Elektrodifusionsgleichung, Donnan-Potential, Goldman-Gleichung), molekulare Grundlage der Selektivität von Ionenkanälen, Leitfähigkeit aktiver Membranen.</p> <p><b>Methoden der Biophysikalischen Chemie:</b> Moderne thermodynamische Methoden, moderne mikroskopische und spektroskopische Methoden, Kristallstrukturanalyse, Schlüsselexperimente der Biophysikalischen Chemie, exemplarische Anwendungen der in der Vorlesung erarbeiteten Konzepte.</p> <p><b>Praktikum der Biophysikalischen Chemie:</b> Optische und funktionelle Mikroskopie, thermodynamische Verfahren, Analyse von Biomakromolekülen mit spektroskopischen Methoden.</p>
---------	--

Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Vertiefte Kenntnisse der Biophysikalischen Chemie</li><li>• Verständnis von Lebensvorgängen aus physikochemischer Perspektive</li><li>• Anwendung der vermittelten Kenntnisse zur Lösung von theoretischen und praktischen Problemen</li><li>• Eigenständige Durchführung und Auswertung von Experimenten mit den Methoden der Biophysikalischen Chemie</li></ul>
---------------------	---

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
V	Biophysikalische Chemie	en.	20	2	60 (30 / 30)
S	Seminar zur Vorlesung	en.	20	2	90 (30 / 60)
P	Versuche zu den Themen der Vorlesung	en.	2	4	150 (60 / 90)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3
empfohlen	

4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum und Seminarvortrag		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. R. Merkel, Jun.-Prof. Dr. P. Kielb		
Modulkoordinator(in)	Jun.-Prof. Dr. P. Kielb		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	J. Kuriyan, B. Konforti, D. Wemmer, <i>The Molecules of Life: Physical Principles and Cellular Dynamics</i> , Garland Pub. D. Klostermeier, M.G. Ruldoph, <i>Biophysical Chemistry</i> , Apple Academic Press Inc. Weitere aktuelle Literatur wird zur Verfügung gestellt		

# Theoretical Methods for Condensed Matter

Modulnr./-code: MCh 20 WP 12



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p>Nicht-kovalente Wechselwirkungen (NKWW) zwischen Atomen und Molekülen (irreführend auch als „nicht-bindende“ oder „schwache“ Wechselwirkungen bezeichnet) sind für die Bildung kondensierter Materie (z.B. Flüssigkeiten oder Molekulkristalle) von essentieller Bedeutung. Als wichtiges Unterscheidungsmerkmal zu kovalenten Bindungen ist in guter Näherung der additive und damit kumulative Charakter der NKWW zu sehen. So können sich viele, individuell kleine Beiträge bereits in mittelgroßen Systemen zu hohen Gesamtbindungsenergien aufsummieren. Moderne quantenchemische Methoden der WFT oder DFT sind in Lage, diese NKWW quantitativ zu beschreiben und eröffnen somit einen theoretischen Zugang zu einer Vielzahl von Stoffeigenschaften.</p> <p>Im ersten Teil der Veranstaltung werden sowohl die theoretischen Grundlagen der NKWW vermittelt als auch praktische Aspekte ihrer Berechnung für verschiedenste Systeme diskutiert und im Praktikum an typischen Beispielen demonstriert. NKWW sind besonders von Bedeutung in Flüssigkeiten und für Lösungsmittelleffekte, welche vorzugsweise mit Molekulardynamik behandelt werden. Es sollen konkret Konzepte zur Beschreibung der NKWW in solchen Simulationen (also von Kraftfeldern bis hin zu „on the fly“-berechneten Potentialen) behandelt werden. Im Nachgang solcher Berechnungen muss die Vielzahl von Daten, die in den sogenannten Trajektorien steckt, analysiert werden. Im Praktikum sollen anhand von konkreten Beispielen flüssige Systeme und die zugehörigen Arbeitsschritte verstanden werden. Die quantenchemische Beschreibung von kristallinen Festkörpern und ihren Oberflächen unterscheidet sich aufgrund der Translationssymmetrie fundamental von der Behandlung molekularer Systeme. Sowohl der Hamiltonoperator als auch die Wellenfunktion müssen periodische Randbedingungen erfüllen. Als Konsequenz ergeben sich prinzipiell unendlich viele Wechselwirkungsintegrale, und die Gesamtwellenfunktion müsste aus unendlich vielen Kristallorbitalen aufgebaut sein. Im dritten Teil der Vorlesung werden die theoretischen Grundlagen der Ansätze vorgestellt, mit denen sich diese Problematik behandeln lässt. Dazu wird das Konzept des reziproken Raums vorgestellt. Die Anzahl der Orbitale lässt sich dann durch Auswahl spezieller Punkte in der irreduziblen Brillouinzone auf eine endliche Anzahl reduzieren. Als Basisfunktionen werden Blochfunktionen entweder aus ebenen Wellen oder atomzentrierten Funktionen verwendet. Daraus ergeben sich unterschiedliche Ansätze für die näherungsweise Berechnung der unendlichen Gittersummen. Im Praktikum werden die Studierenden mit dem Kristallorbitalprogramm CRYSTAL ausgewählte Festkörper und Oberflächen behandeln. Dabei werden Atomisierungsenergien, Gitterparameter, Bandstrukturen sowie Adsorptionsstrukturen und -energien berechnet.</p>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Fortgeschrittene Kenntnisse der quantenchemischen Methoden zur Behandlung von Kristallen und Flüssigkeiten</li><li>• Praktische Durchführung und Interpretation quantenchemischer Berechnungen kondensierter Materie</li><li>• Vorbereitung auf eigene Arbeiten im Bereich der Theoretischen Chemie kondensierter Materie</li><li>• Lernkompetenz</li><li>• Methodenkompetenz</li><li>• Selbstkompetenz</li></ul>

2. Lehr- und Lernformen						
	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V/S	Theoretische Chemie der Festkörper	en.	20	3	120 (45 / 75)
	P	Praktische Aufgaben zu den Themen der Vorlesung	en.	20	6	180 (90 / 90)
3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul						
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.4					
empfohlen						
4. Verwendbarkeit des Moduls						
	Studiengang/Teilstudiengang			Pflicht-/ Wahlpflicht	Fachsemester	
	M. Sc. Chemistry			Wahlpflicht	2 oder 3	
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS						6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum					10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.					
7. Häufigkeit			8. Arbeitsaufwand	9. Dauer		
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und	<input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester		
Sommersemester <input type="checkbox"/>	Sommersemester					
10. Modulorganisation						
Lehrende(r)	Prof. Dr. T. Bredow, Prof. Dr. B. Kirchner, Prof. Dr. S. Grimme					
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. T. Bredow					
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie					
11. Sonstiges						
Literatur:	A. J. Stone, <i>The Theory of Intermolecular Forces</i> , Clarendon Press. R. Hoffmann, R. Dronskowski, <i>Computational Chemistry of Solid State Materials: A Guide for Material Scientists, Chemists, Physicists and Others</i> , Wiley-VCH. A. R. Leach, <i>Molecular Modelling</i> , Prentice Hall. C. Kittel, <i>Einführung in die Festkörperphysik</i> , Oldenbourg.					

# Synthesis and Retrosynthesis

Modulnr./-code: MCh 20 WP 13



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Theorie:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Retrosynthese und Synthesestrategien</li><li>• Anwendung moderner Synthesemethoden in der Synthese komplexer Funktionsverbindungen</li><li>• Diskussion komplexer Naturstoff- und Wirkstoffsynthesen</li><li>• Ausgewählte moderne Konzepte (u.a. Symmetrie, Intramolekularisierung, Tandemprozesse, Multikomponentenreaktionen, Biomimetische Synthese)</li><li>• Anwendung moderner NMR-Verfahren zur Bestimmung der 2D- und 3D-Struktur von Funktionsverbindungen</li></ul> <p><b>Praktikum:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Ausgewählte Aspekte der Praxis der organischen Chemie: Reaktionskontrolle, Chromatographie, GC, HPLC, Reaktionsoptimierung</li><li>• 2D und 3D-Bestimmung komplexer organischer Verbindungen durch NMR-Spektroskopie</li><li>• Interaktive Erarbeitung von Retrosynthesen und Synthesepänen komplexer Funktionsverbindungen</li></ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Erwerb von vertieften Kenntnissen über moderne Syntheseverfahren</li><li>• Verständnis und Beurteilung von Synthesen komplexer Funktionsverbindungen mit einem Schwerpunkt auf der Totalsynthese von Naturstoffen</li><li>• Ausbau der handwerklichen Fähigkeiten im organisch-chemischen Labor</li><li>• Ausbau der Kenntnisse über NMR-spektroskopische Verfahren zur 2D- und 3D-Strukturbestimmung</li><li>• schriftliche Dokumentation von wissenschaftlichen Versuchen</li><li>• effizientes Zeitmanagement</li><li>• Informationsmanagement</li><li>• Organisationsfähigkeit</li><li>• weitergehende Schulung des experimentellen Geschicks</li><li>• weitergehende Schulung der Beobachtungsgabe</li><li>• Entwicklung von Problemlösefähigkeiten</li><li>• Ausbau der analytischen Fähigkeiten, z.B. die Anwendung der Konzepte der Organischen Chemie zur eigenständigen Erarbeitung von Syntheserouten komplexer Funktionsverbindungen</li><li>• Entscheidungsfähigkeit weiter ausbauen</li><li>• Sorgfalt und Verantwortungsbewusstsein weiter schulen</li><li>• Kommunikationsfähigkeit weiterentwickeln</li><li>• den (selbst-)kritischen Umgang mit Ergebnissen weiter schulen</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichts- sprache	Gruppen- größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V/S	Organische Synthese und Retrosynthese	en.	30	6	180 (90 / 90)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	1-5	3	120 (45 / 75)

3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2		
empfohlen			
4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum und Seminarvortrag		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. D. Menche		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. D. Menche		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	Literaturempfehlungen werden in den Lehrveranstaltungen bekannt gegeben.		

# Modern Methods to Elucidate Structure-Function-Relationships in Biomacromolecules

Modulnr./-code: MCh 20 WP 14



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Vorlesung:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlagen der Biochemie</li> <li>• Strukturbiologie: Zusammenhang von Struktur und Funktion</li> <li>• Theoretischer Hintergrund der Kristallographie an Makromolekülen</li> <li>• Lösen der Kristallstruktur eines Proteins</li> <li>• cryo-EM</li> <li>• Bio-EPR</li> <li>• Bio-NMR</li> <li>• FRET, SAXS</li> <li>• Detaillierte Fallbeispiele zur Lösung komplexer Probleme in der Strukturbiologie             <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Crispr/Cas9</li> <li>○ Injektionssysteme</li> <li>○ Ionenkanäle und Transporter</li> <li>○ Naturstoffsynthese</li> <li>○ Molekulare Lineale</li> </ul> </li> <li>• „Emerging techniques“: Freier Elektronen Laser</li> </ul> <p><b>Praktikum:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Protein-Expression und -reinigung</li> <li>• Aktivitätsassay</li> <li>• Kristallisation</li> <li>• Lösen der Kristallstruktur eines Proteins</li> </ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlegende Kenntnisse der Biochemie mit dem Schwerpunkt Strukturbiologie</li> <li>• Theoretischer Hintergrund der Strukturbestimmung mit unterschiedlichen Methoden</li> <li>• Protein-Expression, -Reinigung und -Charakterisierung</li> <li>• Auswertung von Beugungsdaten, Lösung makromolekularer Strukturen mithilfe kristallographischer Methoden</li> <li>• Anwendung des erlernten Wissens auf neue Probleme</li> <li>• Lösung komplexer Probleme durch Kombination geeigneter wissenschaftlicher Methoden</li> <li>• Bewusstsein für die Grenzen wissenschaftlicher Methoden</li> <li>• Verantwortungsvolle Arbeitsweise im wissenschaftlichen Labor</li> <li>• Gute Laborpraxis</li> <li>• Ordnungsgemäße Dokumentation wissenschaftlicher Ergebnisse</li> <li>• Kritische Umgang mit wissenschaftlichen Ergebnissen</li> </ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	V/S	Analytische Methoden in der Strukturbiologie	en.	30	3	120 (45 / 75)
	P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	2	6	180 (90 / 90)

3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3		
empfohlen			
4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Protokolle zum Praktikum		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	PD Dr. G. Hagelüken		
Modulkoordinator(in)	PD Dr. G. Hagelüken		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	B. Rupp, <i>Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology</i> , Garland Science. J. W. Engels, F. Lottspeich, <i>Bioanalytik</i> , Springer Spektrum.		

# Natural Product Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 15



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Theorie:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Historische Entwicklung</li><li>• Begriffe und Definitionen</li><li>• Naturstoffklassen:<ul style="list-style-type: none"><li>○ Fettsäuren, Polyketide und Prostaglandine</li><li>○ Terpene inkl. Steroide und Carotenoide</li><li>○ Alkaloide</li><li>○ Aminosäuren, ribosomale und nicht-ribosomale Peptide</li></ul></li><li>• Methoden der Strukturaufklärung:<ul style="list-style-type: none"><li>○ NMR-Spektroskopie, insbesondere 2D</li><li>○ Aufklärung der relativen Konfiguration</li><li>○ Aufklärung der absoluten Konfiguration</li><li>○ GC/MS und HPLC/MS, inkl. HRMS-Techniken</li></ul></li><li>• Biosynthese von Naturstoffen:<ul style="list-style-type: none"><li>○ klassische Methoden (Fütterung isotoopenmarkierter Vorläufer)</li><li>○ moderne Methoden (Gentechnik, Molekular- und Strukturbiologie)</li><li>○ Genregulation</li><li>○ Bioinformatik in der Naturstoffchemie</li></ul></li><li>• Wirkstoffchemie:<ul style="list-style-type: none"><li>○ wichtige Wirkstoffklassen (Antibiotika, Zytostatika, Virostatika, u. a.)</li><li>○ Struktur-Aktivitäts-Beziehungen, Wirkstoffdesign</li></ul></li></ul> <p><b>Praxis:</b> Durchführung präparativer und analytischer Arbeiten, wie z. B. die Darstellung isotoopenmarkierter Vorläufer für Fütterungsexperimente, Synthese von Referenzverbindungen für die Strukturaufklärung, Isolierung und NMR-basierte Strukturaufklärung niedermolekularer Naturstoffe, GC/MS-Analyse komplexer Naturstoffgemische, Klonierung von Genen und Reinigung rekombinanter Enzyme für Biosynthesestudien.</p>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Grundlegende Kenntnisse der Naturstoffchemie</li><li>• Kenntnisse bzgl. der Strukturaufklärung, Synthese und Biosynthese von Naturstoffen</li><li>• Biologische Funktion von Naturstoffen, Wirkstoffe</li><li>• Isolierung (chromatographische Reinigung) von Naturstoffen</li><li>• Strukturaufklärung mithilfe spektroskopischer Methoden</li><li>• Aufklärung der Biosynthese von Naturstoffen durch Isotoopenmarkierungsexperimente, genetische und enzymatische Ansätze</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
V/S	Naturstoffchemie	en.	30	4	120 (60 / 60)
P	Versuche zu den Themen der Vorlesung / des Seminars	en.	1-3	6	180 (90 / 90)

<b>3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul</b>			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.2		
empfohlen	Teilnahme am Arbeitsgruppenseminar zur vertiefenden Besprechung von Problemen der Naturstoffbiosynthese		
<b>4. Verwendbarkeit des Moduls</b>			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
<b>5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS</b>			<b>6. ECTS-LP</b>
Studienleistung(en)	Protokoll zum Praktikum		<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
<b>7. Häufigkeit</b>		<b>8. Arbeitsaufwand</b>	<b>9. Dauer</b>
Wintersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	<b>300 h</b>	<b>1 Semester</b>
<b>10. Modulorganisation</b>			
Lehrende(r)	Prof. Dr. J. Dickschat		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. J. Dickschat		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie		
<b>11. Sonstiges</b>			
Literatur:	P. M. Dewick, <i>Medicinal Natural Products</i> , Wiley. C. T. Walsh, Y. Tang, <i>Natural Product Biosynthesis</i> , Royal Society of Chemistry.		

# Magnetic Resonance Spectroscopy

Modulnr./-code: MCh 20 WP 17



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<p><b>Vorlesung:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Spin</li> <li>• Wechselwirkung zwischen Spin und Magnetfeld / elektromagnetischer Strahlung</li> <li>• Bloch-Gleichungen</li> <li>• Aufbau des Spektrometers: Quellen, Wellenleiter, Resonatoren</li> <li>• T1/T2-Relaxation und Linienform</li> <li>• Liouville/Von-Neumann-Gleichung</li> <li>• Spin-Hamilton-Operator für NMR und EPR</li> <li>• Pulse, FIDs und Echos</li> <li>• Pulssequenz und Spindynamik</li> <li>• Wege der Kohärenzübertragung und Dichtematrix-Formalismus</li> </ul> <p><b>Übung:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Anwendungen der Magnetresonanz-Theorie</li> <li>• Berechnung von Spindynamiken</li> <li>• Transformationen</li> </ul> <p><b>Seminar:</b> Ein Thema aus dem Bereich der Magnetresonanzspektroskopie wird selbstständig erarbeitet und in Form einer 30-minütigen Vorlesung mit anschließender Diskussion präsentiert.</p> <p><b>Praktikum:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Pulse, FIDs und Echos</li> <li>• Phasendurchlauf</li> <li>• Relaxationsmessungen</li> <li>• Transiente Nutation</li> </ul>
Qualifikationsziele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlegende Kenntnisse der Spinphysik</li> <li>• Grundlegende theoretische Kenntnisse der EPR/NMR-Spektroskopie</li> <li>• Grundlegendes Verständnis der Beziehung zwischen Pulssequenz und Spindynamik</li> <li>• Anwendung der erlernten Methoden und Konzepte auf Problemstellungen der Magnetresonanzspektroskopie</li> </ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
V	Theorie der Magnetresonanz	en.	25	2	90 (30 / 60)
S	Seminarvortrag zu einem Thema der Magnetresonanzspektroskopie	en.	25	2	90 (30 / 60)
Ü	Anwendungen der Magnetresonanz-Theorie	en.	25	2	60 (30 / 60)
P	Versuche zur Magnetresonanzspektroskopie	en.	25	2	60 (30 / 60)

<b>3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul</b>			
verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3		
empfohlen			
<b>4. Verwendbarkeit des Moduls</b>			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
<b>5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS</b>			<b>6. ECTS-LP</b>
Studienleistung(en)	50% der erreichbaren Punkt ein den Übungen und Protokolle zum Praktikum		<b>10</b>
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündliche Abschlussprüfung; en.		
<b>7. Häufigkeit</b>		<b>8. Arbeitsaufwand</b>	<b>9. Dauer</b>
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	<b>300 h</b>	<b>1 Semester</b>
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			
<b>10. Modulorganisation</b>			
Lehrende(r)	Prof. Dr. O. Schiemann		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. O. Schiemann		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
<b>11. Sonstiges</b>			
Literatur:	M. H. Levitt, <i>Spin Dynamic</i> , GB Wiley. A. Schweiger, G. Jeschke, <i>Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance</i> , Oxford University Press.		

# Sustainability in Chemistry

Modulnr./-code: MCh 20 WP 18



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalt	<p>Das Modul befasst sich mit Themen der Nachhaltigkeit in der Chemie, die für die Gesellschaft relevant sind. Die Gesellschaft braucht Wissenschaftler*innen, die kritisch denken und <b>interdisziplinäre</b> Strategien anwenden können, um eine bessere Zukunft durch nachhaltige Entwicklung zu schaffen. In diesem Modul lernen die Studierenden moderne Aspekte der Nachhaltigen Chemie kennen: a) die Geschichte der chemischen Umweltverschmutzung, b) wie man giftige Prozesse sowie Produkte verhindern oder verringern kann und c) wie man Prozesse und Chemikalien so konzipiert, dass sie sowohl sicher als auch nachhaltig sind. Im Rahmen des Moduls werden Ansätze von Systemdenken vermittelt, um die Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Aspekten der Nachhaltigkeit zu verstehen.</p> <p><b>Inhalt:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Konzept der Nachhaltigkeit in der Chemie und ihre Beziehung zu Gesellschaft, Wirtschaft und Umwelt mit praktischen Beispielen</li><li>• Prozesse an denen Klimagase und andere kleine Moleküle beteiligt sind</li><li>• Chemie der Energieumwandlung und -speicherung</li><li>• Katalyse und Nachhaltigkeit (Materialien, Reaktionen, Charakterisierung, mechanistische Analyse)</li><li>• Lebenszyklus von Substraten und Produkten (Lösungsmittel, Lösungsmittel-effekte, Kunststoffe, biologische Abbaubarkeit, Analyse)</li><li>• Bedeutung von Ressourcen</li></ul>
Qualifizierungsziele	<ul style="list-style-type: none"><li>• Detaillierte Kenntnisse der Konzepte und Methoden der Nachhaltigen Chemie</li><li>• Anwendung der Methoden und Konzepte der Nachhaltigen Chemie und Entwicklung von optimalen Vorgehensweisen für einschlägige chemische Probleme</li><li>• Wissenschaftskommunikation: Wissenstransfer im gesellschaftlichen Diskurs</li><li>• Lernkompetenz: Systemorientierter Denkansatz</li><li>• Problemlösung im Team</li></ul>

## 2. Lehr- und Lernformen

LV-Art	Thema	Unterrichts-sprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [hr] (Präsenz/ SLZ)
V	Nachhaltigkeit in Chemie	en.	20	2	60 (30 / 30)
S	Seminar zur Vorlesung	en.	20	2	80 (30 / 50)
P	Experimente zu den Themen der Vorlesung bzw. des Seminars	en.	1	5	160 (75 / 85)

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

Verpflichtend nachzuweisen	Bestandenes Modul MCh 20 1.3
Empfohlen	

4. Verwendbarkeit des Moduls			
	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht/ Wahlpflicht	Fachsemester
	M.Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3
5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS			6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Erfolgreicher Abschluss des Laborkurses und Vortrag im Seminar		10
Prüfungen und Prüfungssprache	Klausur; en.		
7. Häufigkeit		8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/>	300 h	1 Semester
Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>			
10. Modulorganisation			
Lehrende(r)	Prof. Dr. B. Kirchner, Prof. Dr. R. Glaum, Prof. Dr. C. Lu, Prof. Dr. A. Gansäuer, Jun.-Prof. Dr. P. Kielb, Prof. Dr. T. Bredow, Jun.-Prof. Dr. A. Bunsecu, Dr. W. Assenmacher		
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. B. Kirchner		
Anbietende Organisationseinheit	Fachgruppe Chemie (MNF), Clausius Institut für Physikalische und Theoretische Chemie		
11. Sonstiges			
Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> <li>• P.T. Anastas, J.C. Warner, Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press: New York, 1998</li> <li>• T. Welton, 2015, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical &amp; Engineering Sciences, Vol: 471, ISSN: 1471-2946</li> <li>• Neil Winterton, 2023, Chemistry for Sustainable Technologies: A Foundation</li> </ul>		

# Anorganische Struktur-, Festkörper- und Materialchemie

Modulnr./-code: MCh 20 WP 19



## 1. Inhalte und Qualifikationsziele

Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> <li>Anorganische Strukturchemie</li> <li>Anorganische Festkörperchemie</li> <li>Festkörperchemische Präparationsmethoden</li> <li>Physikalische Eigenschaften von Festkörpern</li> <li>Anwendungen von Festkörpern</li> </ul>
Qualifikationsziele	<p><b>Kenntnisse:</b> Die Studierenden verfügen über tiefgehende Kenntnisse auf dem Gebiet anorganischer Struktur- und Festkörperchemie und können Kristallstrukturen systematisch beschreiben und ihre Strukturverwandtschaften zu verschiedenen Aristotypen darlegen. Sie kennen einschlägige Synthese- und Charakterisierungsmethoden der Festkörperchemie, die Darstellung von Phasenbeziehungen in Zustandsdiagrammen. Sie kennen die Grundzüge der Glas- und Kieselglasbearbeitung und kennen die Grundlagen des chemischen Transports.</p> <p><b>Fertigkeiten und Kompetenzen:</b> Die Studierenden vermögen Festkörper strukturell zu klassifizieren und Verwandtschaften aufzuzeigen. Sie können relevante Charakterisierungsmethoden auswählen und kennen deren theoretische Hintergründe. Sie können Pulverdiffraktogramme und Einkristallstrukturdaten unter Anleitung aufnehmen und mit Hilfe interpretieren. Sie haben die Grundlagen der Glas- und Kieselglasbearbeitung erlernt und vermögen chemische Transportreaktionen zu konzipieren und durchzuführen. Sie können über die vorgenannten Themen einen wissenschaftlichen Kurzvortrag halten.</p>

## 2. Lehr- und Lernformen

	LV-Art	Thema	Unterrichtssprache	Gruppen-größe	SWS	Workload [h] (Präsenz / SLZ)
	VL		en.	20	4	60/60
	S		en.	20	2	30/30
	P		en.	2	6	90/30

## 3. Voraussetzungen für die Teilnahme am Modul

verpflichtend nachzuweisen	MCh20 2 Analytical Methods for Condensed Matter
empfohlen	MCh20 1.1 Advanced Inorganic Molecular and Solid State Chemistry

## 4. Verwendbarkeit des Moduls

	Studiengang/Teilstudiengang	Pflicht-/Wahlpflicht	Fachsemester
	M. Sc. Chemistry	Wahlpflicht	2 oder 3

## 5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS

5. Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten entsprechend dem ECTS		6. ECTS-LP
Studienleistung(en)	Seminarvortrag	10
Prüfungen und Prüfungssprache	Mündlich, en.	

## 7. Häufigkeit

7. Häufigkeit	8. Arbeitsaufwand	9. Dauer
Wintersemester <input type="checkbox"/> Sommersemester <input checked="" type="checkbox"/>	Winter- und Sommersemester <input type="checkbox"/> 300 h	1 Semester

## 10. Modulorganisation

Lehrende(r)	Prof. Dr. Florian Kraus
Modulkoordinator(in)	Prof. Dr. Florian Kraus
Anbietende Organisationseinheit	Anorganische Chemie
<b>11. Sonstiges</b>	
Literatur:	Wells, Structural Inorganic Chemistry Tilley, Understanding Solids West, Solid State Chemistry and its Applications Müller, Inorganic Structure Chemistry