



UNIVERSITÄT  
DES  
SAARLANDES



# Modulhandbuch

## Masterstudiengang Chemie

Universität des Saarlandes | Fakultät NT | Stand 21.02.2024

## Inhalt

Modulübersicht.....	2
Modulbeschreibungen.....	6
<b>Pflichtbereich</b>	
Anorganische Chemie M.....	6
Organische Chemie M.....	10
Physikalische Chemie M.....	13
Chemische Erkenntnisse und deren Kommunikation.....	16
Masterarbeit.....	18
<b>Wahlpflichtbereich</b>	
Strukturaufklärung mittels Beugungsmethoden.....	19
Nachhaltige Analytische Chemie.....	22
Moderne Synthesemethoden.....	26
Organische Naturstoffchemie I.....	30
Organische Naturstoffchemie II.....	32
Biologische Chemie.....	34
Medizinische Chemie I.....	36
Medizinische Chemie II.....	38
Grundlagen der Polymere.....	40
Modern Polymer Chemistry.....	43
Hybrid Materials and Coatings.....	46
Biomaterials.....	50
NanoBioMaterials.....	53
Theoretische Chemie.....	56
Theoretische Anorganische Chemie.....	61
Electronic Spectroscopy.....	65
Naturwissenschaften I.....	70
Naturwissenschaften II.....	71
Vertiefungspraktikum I.....	72
Vertiefungspraktikum II.....	73
Vertiefungspraktikum III.....	74

## Modulübersicht Master Chemie

Modul	ME	Name des Modulelements	CP	MCP	Sem.
<b>Pflichtbereich (60 CP zu erbringen)</b>					
<b>ACM</b>		<b>Anorganische Chemie M</b>		<b>9</b>	
	ACMa	Strukturchemie und Kristallographie	3		1-2
	ACMb	Moderne Komplexchemie	3		1-2
	ACMc	Moderne Elementorganische Chemie	3		1-2
<b>OCM</b>		<b>Organische Chemie M</b>		<b>9</b>	
	OCMa	Aromatenchemie	3		1-2
	OCMb	Metallorganische Chemie	3		1-2
	OCMc	Moderne Synthesemethoden	3		1-2
<b>PCM</b>		<b>Physikalische Chemie M</b>		<b>9</b>	
		3 Veranstaltungen aus 4:			
	PCMa	Ultrasensitive Fluoreszenzanalytik	3		1-2
	PCMb	EPR Spektroskopie	3		1-2
	PCMc	Kolloide und Grenzflächen	3		1-2
	PCMd	Molecular Modelling	3		1-2
<b>EKC</b>		<b>Chemische Erkenntnisse und deren Kommunikation</b>		<b>3</b>	
	EKC	Chemische Erkenntnisse und deren Kommunikation		3	1-2
<b>ZZ</b>		<b>Masterarbeit</b>		<b>30</b>	
	ZZ	Masterarbeit	30		4
<b>Wahlpflichtbereich I (42 CP zu erbringen)</b>					
<b>ACVI</b>		<b>Strukturaufklärung mittels Beugungsmethoden</b>		<b>min 6</b>	
	ACK-T	Theorie der Röntgenbeugung	3		1-3
	ACK-P	Pulverdiffraktion in der Praxis	3		1-3
	ACK-SC	Einkristalldiffraktion in der Praxis	3		1-3

<b>ACVII</b>		<b>Nachhaltige Analytische Chemie</b>		<b>min 6</b>	
		Umweltanalytik und Monitoring-Strategien	3		1-3
		Instrumentelle Analytik	3		1-3
		Gewässeranalytik	3		1-3
<b>OCVI</b>		<b>Moderne Synthesemethoden</b>		<b>min 6</b>	
	OC15	Stereochemie	3		1-3
	OC09	Stereoselektive Synthese	3		1-3
	OC08	Pericyclische Reaktionen	3		1-3
<b>OCVII</b>		<b>Organische Naturstoffchemie I</b>		<b>6</b>	
	OC10	Heterocyclen, Natur- und Wirkstoffe	3		1-3
	OC11	Enzyme in der Organischen Synthese	3		1-3
<b>OCVIII</b>		<b>Organische Naturstoffchemie II</b>		<b>min 6</b>	
		Retrosynthese	3		1-3
		Naturstoffsynthese	3		1-3
		2D-NMR-Spektroskopie	3		1-3
<b>OCIX</b>		<b>Biologische Chemie</b>		<b>6</b>	
	OC16	Chemie der Biopolymere	3		1-3
	OC17	Chemical Glycobiology	3		1-3
<b>MEDI</b>		<b>Medizinische Chemie I</b>		<b>6</b>	
	MED01	Medizinische Chemie 1	3		1-3
	MED02	Medizinische Chemie 2	3		1-3
<b>MEDII</b>		<b>Medizinische Chemie II</b>		<b>min 6</b>	
	MEDÜ	Übung Medizinische Chemie	1		1-3
	MEDG	Grundpraktikum Medizinische Chemie	2		1-3
	MEDV	Vertiefungspraktikum Medizinische Chemie	3 od. 6		1-3
<b>MCI</b>		<b>Grundlagen der Polymere</b>		<b>6</b>	
	MC01	Synthese von Polymeren	3		1-3

	MC02	Polymeranalytik	3		1-3
<b>MCII</b>		<b>Modern Polymer Chemistry</b>		<b>min 6</b>	
	MC08	Modern Methods in Polymer Chemistry	3		1-3
	MC03	Industrielle Makromolekulare Chemie a+b	3		1-3
	MCG	Makromolekulares Grundpraktikum	3		1-3
<b>MCIII</b>		<b>Hybrid Materials and Coatings</b>		<b>min 6</b>	
	HyMat	Hybrid Materials and Nanocomposites	3		1-3
	FC	Functional Coatings	3		1-3
	SMP	Smart Materials & Polymers	3		1-3
	HyCoP	Hybrids and Coatings	3		1-3
<b>MCIV</b>		<b>Biomaterials</b>		<b>6</b>	
	Biomed	Biomedical Polymers	3		1-3
	LiveMAT	Engineered Living Materials for Biomedicine	1,5		1-3
	BiomatP	Biomaterials Practical Course	1,5		1-3
<b>MCV</b>		<b>NanoBioMaterials</b>		<b>6</b>	
	NBM-1	NanoBioMaterialien 1	3		1-3
	NBM-2	NanoBioMaterialien 2	3		1-3
<b>TCI</b>		<b>Theoretische Chemie I</b>		<b>min 6</b>	
		Einführung in die Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen a+b	3-6		1-3
		Grundlagen der Quantenchemie	3		1-3
		Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie	6		1-3
		Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie	3		1-3
		Modellierung von Moleküleigenschaften	3		1-3
<b>TCII</b>		<b>Theoretische Anorganische Chemie</b>		<b>min 6</b>	
		Einführung in die Computerchemie	3		1-3
		Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie	3		1-3
		Modellierung von Moleküleigenschaften	3		1-3

<b>PCVI</b>		<b>Electronic Spectroscopy</b>		<b>min 6</b>	
		Advanced Applications of EPR-Spectroscopy	3		1-3
		Fluorescence Spectroscopy	3		1-3
		Modellierung von Moleküleigenschaften	3		1-3
		Light	3		1-3
		Photochemistry	3		1-3
<b>NaWil</b>		<b>Naturwissenschaften I</b>		<b>6</b>	
		beliebige Veranstaltungen aus dem Wahlpflichtbereich I zu 6 CP	$\Sigma 6$		1-3
<b>NaWill</b>		<b>Naturwissenschaften II</b>		<b>6</b>	
		beliebige Veranstaltungen aus dem naturwissenschaftlich-technischen Bereich zu 6 CP	$\Sigma 6$		1-3
Wahlpflichtbereich II (18 CP zu erbringen)					
<b>VPI</b>		<b>Vertiefungspraktikum I</b>		<b>6</b>	
	VPI	Vertiefungspraktikum im Fachbereich Chemie	6		1-3
<b>VPII</b>		<b>Vertiefungspraktikum II</b>		<b>6</b>	
	VPII	Vertiefungspraktikum im Fachbereich Chemie	6		1-3
<b>VPIII</b>		<b>Vertiefungspraktikum III</b>		<b>6</b>	
	VPIII	Vertiefungspraktikum im Fachbereich Chemie	6		1-3

CP: Creditpoints, MCP: Summe Creditpoints pro Modul

Modul					Abkürzung
Anorganische Chemie M					ACM
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-2	1-2	jährlich	2 Sem.	6	9

Modulverantwortliche*r	Munz			
Dozierende	Dozenten der Anorganischen Chemie			
Zuordnung zum Curriculum	Pflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>			
	Vorlesung	ACMa - Festkörperchemie II - Strukturen und Eigenschaften	2	3
	Vorlesung	ACMb - Moderne Komplexchemie	2	3
	Vorlesung	ACMc - Moderne Elementorganische Chemie	2	3
Leistungskontrollen	<p><u>ACMa - Festkörperchemie II - Strukturen und Eigenschaften:</u> Schriftliche Prüfung</p> <p><u>ACMb - Moderne Komplexchemie und ACVc - Moderne Elementorganische Chemie:</u> Für eine Veranstaltung Mündliche Prüfung (50%), für die andere Veranstaltung Essay (20%) sowie Posterpräsentation (30%).</p>			
Workload	<p><u>ACMa - Festkörperchemie II - Strukturen und Eigenschaften:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Präsenzzeit Übung 15h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 45 h Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>ACMb - Moderne Komplexchemie:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 60 h Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>ACMc - Moderne Elementorganische Chemie:</u></p>			

	Präsenzzeit Vorlesung 30 h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 60 h Summe (3 CP) 90 h
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Gewichteter Mittelwert der Einzelnoten gemäß § 14 (4) der gemeinsamen Prüfungsordnung der Fakultät NT
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen:</p> <p><u>ACMa - Festkörperchemie II - Strukturen und Eigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Grundlagenverständnis der Kristallographie</li> <li>▪ Kristallographische Zusammenhänge verstehen und anwenden können</li> <li>▪ Durchführung kristallographischer Berechnungen</li> <li>▪ Verständnis für komplexe Kristallstrukturen und deren Beschreibung mit den erlernten Methoden</li> <li>▪ Kenntnisse über die Zusammenhänge zwischen der kristallographischen Struktur und den Eigenschaften eines Festkörpers</li> <li>▪ Kenntnisse zu besonderen Eigenschaften anorganischer Festkörper, z.B. magnetische und elektrische Eigenschaften</li> </ul> <p><u>ACMb - Moderne Komplexchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Forschungsnahe Vertiefung der im Bachelor-Studiengang (AC03, AC04) gelegten Grundlagen der metallorganischen Chemie der Nebengruppenelemente</li> <li>▪ Verständnis für Konzepte der Nebengruppenchemie in Synthese, struktureller und spektroskopischer Charakterisierung, sowie Eigenschaften</li> <li>▪ Konzipierung aktueller Forschungsfragen</li> <li>▪ Kenntnis der Anwendungen und Komplexdesign</li> <li>▪ Verwendung bindungstheoretischer Modelle</li> </ul> <p><u>ACMc - Moderne Elementorganische Chemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Forschungsnahe Vertiefung der im Bachelor-Studiengang (AC05) gelegten Grundlagen der metallorganischen Chemie der Hauptgruppenelemente</li> <li>▪ Verständnis und Anwendung der Konzepte der Hauptgruppenchemie in Synthese, struktureller und spektroskopischer Charakterisierung</li> <li>▪ Vorhersage von Tendenzen in den Eigenschaften von Verbindungen der Hauptgruppenelemente</li> </ul>
Inhalt(e)	<p><u>ACMa - Festkörperchemie II - Strukturen und Eigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Struktur, chemische Bindung und Eigenschaften von</li> </ul>

	<p>Festkörpern</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Grundlagen der Kristallographie</li> <li>▪ Einfache Strukturtypen in kristallographischer Betrachtung</li> <li>▪ Kristallbaufehler (Defekte)</li> <li>▪ Intermetallische Phasen</li> <li>▪ Eigenschaften von Festkörpern</li> <li>▪ Elektronische Struktur von Festkörpern</li> </ul> <p><u>ACMb - Moderne Komplexchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Terminale und verbrückte Carbene, Imide, Oxide, und Homologe</li> <li>▪ Radikal- und redoxaktive Liganden</li> <li>▪ Reaktivität, Bindungsaktivierung und Katalyse</li> <li>▪ Einführung in physikalisch-organische und physikalisch-anorganische Charakterisierungsmethoden</li> <li>▪ Aktivierung kleiner Moleküle: Stickstoff, Sauerstoff, Kohlenwasserstoffe, Wasser</li> <li>▪ Protonen-gekoppelter Elektronentransfer</li> <li>▪ Stereoelektronische Deskriptoren</li> <li>▪ Oxidationsstufen, X-Ray Absorption/Emission, hetero-NMR und Festkörper NMR</li> </ul> <p><u>ACMc - Moderne Elementorganische Chemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Elementunabhängige Einordnung und Anwendung typischer Funktionalitäten (Kationen, Anionen, Radikale, Carbenanaloga, Mehrfachbindungen, konjugierte Systeme, molekulare Cluster)</li> <li>▪ Konzipierung aktueller Forschungsfragen in der elementorganischen Chemie</li> <li>▪ Verwendung bindungstheoretischer Modelle für elementorganische Struktur motive</li> <li>▪ Anwendung moderner Analysemethoden (EPR, Mößbauer, Heterokern-NMR) im Kontext der Vorlesung</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch; nach Absprache Deutsch</p> <p><u>ACMa - Strukturchemie und Kristallographie:</u></p> <p>L. Smart, E.A. Moore, Solid State Chemistry: An Introduction, CRC Press;</p> <p>A.R. West, Solid State Chemistry and its Applications, Wiley;</p> <p>U. Müller, Anorganische Strukturchemie, Vieweg + Teubner;</p> <p>W. Borchardt-Ott, H. Sowa, Kristallographie, Springer Spektrum;</p> <p>E. Riedel (Hrsg.), Moderne Anorganische Chemie, de Gruyter;</p>

International Tables for Crystallography, Volume A

ACMb - Moderne Komplexchemie:

J. F. Hartwig, Organotransition Metal Chemistry, From Bonding to Catalysis, University Science Books, 2010.

W. B. Tolman, Activation of Small Molecules, Wiley, 2006.

E. V. Anslyn, D. A. Dougherty Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, 2006.

R. A. Scott, C. M. Lukehart, Applications of Physical Methods to Inorganic and Bioinorganic Chemistry, Encyclopedia of Inorganic Chemistry, Wiley, 2007.

ACMc - Moderne Elementorganische Chemie:

R. Steudel (mit D. Scheschkewitz), *Chemistry of the Non-Metals*, 2<sup>nd</sup> Edition, de Gruyter

E. Riedel (Hrsg.), *Moderne Anorganische Chemie*, de Gruyter

C. Elschenbroich, *Organometallics*, 3<sup>rd</sup> edition, Wiley.

Modul					Abkürzung
Organische Chemie M					OCM
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-2	1-2	WS	1 Sem.	6	9

Modulverantwortliche*r	Kazmaier				
Dozierende	Kazmaier, Titz				
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Pflichtmodul				
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine				
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP	
	Vorlesung	OCMa Aromatenchemie	2	3	
	Vorlesung	OCMb Metallorganische Chemie	2	3	
	Vorlesung	OCMc Moderne Synthesemethoden	2	3	
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Klausuren nach Abschluss der Lehrveranstaltungen				
Workload	Vorlesung		90 h		
	Vor- und Nachbereitung, Klausur		180 h		
	Summe:		270 h (9 CP)		
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Gewichteter Mittelwert der Einzelnoten gemäß § 14 (4) der gemeinsamen Prüfungsordnung der Fakultät NT				
Lernziele/Kompetenzen	Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen: Moderne organische Synthesechemie				
Inhalt(e)	Moderne organische Synthesechemie <b>OCMa: Aromatenchemie</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Einführung, was ist Aromatizität?</li> <li>• Heteroaromaten, Höhere Aromaten, Toxizität</li> <li>• Chemische &amp; Bio-Synthese von Aromaten und Heteroaroma-</li> </ul>				

	<p>ten</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Elektrophile Aromatische Substitution</li> <li>• Beispiel: Wirkstoffe für Catechol-O-Methyltransferase</li> <li>• Nukleophile Aromatische Substitution</li> <li>• Radikalische Aromatische Substitution</li> <li>• Metallierung und Folgereaktionen</li> <li>• Übergangsmetallvermittelte Reaktionen (Pd-Katalyse)</li> <li>• Reduktionen und Oxidationen</li> <li>• Industrielle Aromatenchemie</li> </ul> <p><b>OCMb: Metallorganische Chemie</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Allgemeine Grundlagen metallorganischer Reaktionen</li> <li>2. Mechanismen metallorganischer Reaktionen</li> <li>3. Synthetische Anwendungen metallorganischer Reaktionen Hydridkomplexen, Carbonylkomplexen, Carbenkomplexen, Alken- und Alkinkomplexen, p-Allylkomplexe, Arenkomplexe.</li> <li>4. Übergangsmetall-katalysierte Reaktionen Katalytische Anwendungen von Übergangsmetallhydriden, von <math>\sigma</math>-Komplexen, von Carbenkomplexen, von Alken- und Dienkomplexen, von <math>\pi</math>-Allyl-Komplexen</li> </ol> <p><b>OCMc: Moderne Synthesemethoden I</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li><b>1. Oxidationsreaktionen/Reduktionsreaktionen</b> Oxid. von C-H-Bindungen, Oxid. von C-C-Bindungen. Oxid. von C-C-Mehrfachbindungen. Red. mit komplexen Hydriden, Red. Decarboxylierung, Red von C-C-Mehrfachbindungen, Ionische Hydrierung, Red. durch katalytische Hydrierung, Entschwefelung, Red. durch ‚auflösende Metalle‘, Red. mit Diimid</li> <li><b>2. Carbonylreaktionen</b> Reaktionen an der Carbonylgruppe. Reaktionen zur <math>\alpha</math>-Carbonylgruppe.</li> <li><b>3. Radikalreaktionen</b> Erzeugung von Radikalen, Radikalische Kettenreaktionen und Reduktionen, Additionen von Radikalen an Mehrfachbindungen, Umlagerungen von Radikalen, Gruppen-Transfer-Reaktionen, Radikalische Allylierungen, Radikalische Ringöffnungen, Übergangsmetall-induzierte Radikalreaktionen reductive, oxidative Verfahren</li> </ol>
Weitere Informationen	<p>Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch Literaturhinweise:</p>

Titz: Vorlesungsmanuskript – Aromaten- und Heteroaromaten-  
chemie sowie Literaturempfehlungen im Skript  
Clayden, Greeves, Warren: Organic Chemistry  
Brückner: Reaktionsmechanismen: Organische Reaktionen, Ste-  
reochemie, Mod. Synthesemethoden  
Hegedus: Organische Synthese mit Übergangsmetallen.  
Kazmaier: Vorlesungsmanuskript - Moderne Synthesemethoden  
(sowie dort zitierte Literatur)

Modul					Abkürzung
Physikalische Chemie M					PC M
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-2	1-2	jährlich	1 Sem.	9	9

Modulverantwortliche*r	Stopkowicz			
Dozierende	Jung, Kay, Kraus, Stopkowicz			
Zuordnung zum Curriculum	Pflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>			
	A Vorlesung + Praktikum	Ultrasensitive Fluoreszenzanalytik	1V+2P	3
	B Vorlesung + Praktikum	EPR Spektroskopie	1V+2P	3
	C Vorlesung + Praktikum	Kolloide und Grenzflächen	1V+2P	3
	D Vorlesung + Praktikum	Molecular modelling	1V+2P	3
Leistungskontrollen	Studierende müssen drei von vier Vorlesungen (teils mit Prüfungen) mit dazugehörigen Versuchen (mit Protokollen) absolvieren.			
<i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	<p>A: Benotetes Protokoll.</p> <p>B: Unbenotetes Protokoll und benotete Abschlussprüfung.</p> <p>C: Unbenotetes Protokoll und benotete Abschlussprüfung.</p> <p>D: Unbenotetes Protokoll und benotete Abschlussprüfung.</p>			
Workload	<p><u>A Ultrasensitive Fluoreszenzanalytik:</u></p> <p>Präsenzzeit Vorlesung 15 h</p> <p>Nachbereitung Vorlesung, Vorbereitung Praktikum 15 h</p> <p>Präsenzzeit &amp; Auswertung Praktikum 30 h</p> <p>Zusatzzeit für Protokollanfertigung, 30 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>B EPR-Spektroskopie:</u></p> <p>Präsenzzeit Vorlesung 30 h</p> <p>Präsenzzeit Praktikum 30 h</p> <p>Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 30 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p>			

	<p><u>C Kolloide und Grenzflächen:</u></p> <p>Präsenzzeit Vorlesung/Übung 30 h</p> <p>Präsenzzeit Praktikum 30 h</p> <p>Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 30 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>D Molecular Modelling</u></p> <p>Präsenzzeit Vorlesung und praktische Einheiten 30 h</p> <p>Vor- und Nachbereitung, Vorbereitung auf Prüfung 60 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p>
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Gesamtnote = Mittelwert der drei benoteten Prüfungen/Protokoll.
Lernziele/Kompetenzen	<p>Dieses Modul führt in moderne Methoden der Molekül- und supramolekularen Spektroskopie, der Elektronen-Paramagnetischen-Resonanz (EPR) Spektroskopie und in die Grundlagen ihrer technischen Umsetzung ein. Es vermittelt außerdem Grundlagen der Kolloid- und Grenzflächenchemie sowie der Computerchemie.</p> <p>Neben den rein fachlichen Inhalten will das Modul anregen, Aspekte des präparativen Arbeitens („sauberes Arbeiten“) und des wissenschaftlichen Informationsflusses zu hinterfragen. Die Teilnehmenden sollen die Möglichkeiten und Grenzen der behandelten Methoden anhand spezifischer Kriterien beurteilen können.</p>
Inhalt(e)	<p><u>Vorlesung Ultrasensitive Fluoreszenzanalytik</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Elektronische Zustände und ihre Zustandsdynamik</li> <li>• Laser als spektroskopische Strahlungsquelle</li> <li>• Grundlagen der Optik und Fluoreszenzmikroskopie</li> <li>• Einzelmoleküldetektion und -spektroskopie</li> </ul> <p><u>Vorlesung EPR-Spektroskopie</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Verwendung von stabilen paramagnetischen Spezies als Sonden der Struktur</li> <li>▪ Bildung von photoangeregten Triplett-Zuständen nach gepulster Laseranregung</li> <li>▪ Simulation von EPR-Spektren mit der Easyspin Toolbox in Matlab™</li> </ul> <p><u>Vorlesung Kolloide und Grenzflächen</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Prinzipien, Kategorien und technische Relevanz grenzflächendominierter Systeme</li> <li>▪ Wechselwirkungen zwischen Molekülen, Kolloiden und Grenzflächen</li> <li>▪ Die DLVO-Theorie elektrostatischer Kolloide</li> <li>▪ Bildung und Stabilität von Emulsionen und Kolloiden</li> </ul>

	<p><u>Vorlesung Molecular Modelling</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Grundlagen der Elektronen-Struktur-Rechnungen</li> <li>▪ Quantenchemische Modellierung von Molekülen</li> <li>▪ Gängige quantenchemische Methoden</li> </ul> <p><u>Masterpraktikum Physikalische Chemie</u></p> <p>Ausführlichere Experimente zu den drei ausgewählten Vorlesungsthemen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Einzelmolekülmikroskopie</li> <li>▪ Theorie, Praxis und Analyse der kontinuierlichen, gepulsten und zeitaufgelösten EPR-Spektroskopie</li> <li>▪ Mikrofluidik-basierte Herstellung, Stabilität und Eigenschaften von Pickering-Ramsden-Emulsionen</li> <li>▪ computerchemische Modellierung von Molekülen und deren Eigenschaften</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Deutsch, Englisch</p> <p>Literaturhinweise:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• T. Engel und P. Reid: Physikalische Chemie,</li> <li>• W. Parson, Modern Optical Spectroscopy, Springer, Berlin Heidelberg 2015</li> <li>• D. F. Evans, H. Wennerström: The Colloidal Domain: Where Physics, Chemistry, Biology, and Technology Meet</li> <li>• H.T. Davis, Statistical Mechanics of Phases, Interfaces and Thin Films, Wiley.VCH</li> <li>• Chechik, Carter and Murphy: Electron Paramagnetic Resonance (Oxford Chemistry Primer), OUP 2016</li> <li>• C. J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry</li> <li>• F. Jensen: Introduction to Computational Chemistry</li> <li>• Eigene Skripte und Übersichtsartikel</li> </ul>

Modul					Abkürzung
Chemische Erkenntnisse und deren Kommunikation					EKC
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-2	1-2	jährlich	1 Sem.	2	3

Modulverantwortliche*r	Scheschkewitz			
Dozierende	Dozenten der Anorganischen Chemie			
Zuordnung zum Curriculum	Pflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>			
	Vorlesung/ Übung	Chemische Erkenntnisse und deren Kommunikation	2	3
Leistungskontrollen	<p><u>Benotete Übung</u> Zur Semesterhälfte</p> <p><u>Hausarbeit</u> Neuverfassung eines Artikels auf Basis publizierter Daten oder Beschreibung eines Forschungsvorhabens</p>			
Workload	Präsenzzeit Vorlesung		12 h	
	Präsenzzeit Übung		12 h	
	Nachbereitung und Hausarbeit		66 h	
	Summe (3 CP)		90 h	
Zusammensetzung der Modulnote	85 % Note der Hausarbeit			
<i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	15 % Note der bewerteten Übung			
Lernziele/Kompetenzen	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ die Grundlagen der Logik, sowie Erkenntnis- und Wissenschaftstheorie kennen und erklären können</li> <li>▪ wissenschaftliches Fehlverhalten und Plagiate zu erkennen und zu vermeiden</li> <li>▪ eine stringente und überzeugende wissenschaftliche Argumentation aufbauen</li> <li>▪ ein durchgeführtes Forschungsprojekt adäquat be-</li> </ul>			

	<p>schreiben und sachgerecht diskutieren</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ einen geplanten Forschungsgegenstand nachvollziehbar darstellen</li> </ul>
Inhalt(e)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ antike Wurzeln der Erkenntnistheorie</li> <li>▪ Entwicklung der modernen Wissenschaftstheorie</li> <li>▪ Falsifikationsprinzip und seine Grenzen</li> <li>▪ Plagiarismus und wissenschaftliches Fehlverhalten</li> <li>▪ Argumentative Logik und Sprache</li> <li>▪ Darstellung experimenteller Daten zu Publikationszwecken an Beispielen der Chemie</li> <li>▪ Wissenschaftliches Schreiben in Englisch für Nichtmuttersprachler</li> <li>▪ Aufbau von Forschungsartikeln und -anträgen</li> <li>▪ Einreichungsprozess von Forschungsartikeln</li> <li>▪ Übungen zum Verfassen von Manuskripten</li> </ul>
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	<p>Unterrichtssprache: Englisch; nach Absprache Deutsch</p> <p><u>Empfohlene Literatur:</u></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Kate L. Turabian, <i>Manual for Writers of Research Papers, Theses, and Dissertations: Chicago Style for Students and Researchers in Chicago Guides to Writing, Editing, and Publishing</i>, 9<sup>th</sup> Edition, University of Chicago Press, Chicago <b>2019</b></li> <li>2. Hilary Glasman-Deal, <i>Science Research Writing: For Native And Non-native Speakers Of English</i>, 2<sup>nd</sup> Edition, World Scientific Publishing Europe Ltd., London <b>2020</b></li> </ol>

Modul					Abkürzung
Masterarbeit					ZZ
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
4	4	WS + SS	1 Sem.		30

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender						
Dozierende	Dozenten des Masterstudienganges Chemie						
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Pflichtmodul						
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Mindestens 80 CP aus den anderen Modulen des Master-Studienganges Chemie						
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Schriftliche Arbeit						
Workload	<table border="0"> <tr> <td>Experimentelle Arbeiten</td> <td>800 h</td> </tr> <tr> <td>Niederschrift der Arbeit</td> <td>100 h</td> </tr> <tr> <td>Summe:</td> <td>900 h (30 CP)</td> </tr> </table>	Experimentelle Arbeiten	800 h	Niederschrift der Arbeit	100 h	Summe:	900 h (30 CP)
Experimentelle Arbeiten	800 h						
Niederschrift der Arbeit	100 h						
Summe:	900 h (30 CP)						
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 und 21 der Prüfungsordnung)</i>	Mittelwert (Zehntel) der Noten der beiden Gutachten						
Lernziele/Kompetenzen	In der Master-Arbeit lernen die Studierenden unter fachlicher Anleitung wissenschaftliche Methoden auf die Lösung eines vorgegebenen Problems innerhalb einer vorgegebenen Zeit anzuwenden.						
Inhalt(e)	Literaturstudium zum gegebenen Thema - Selbständige Durchführung von Experimenten - Kritische Beurteilung und Diskussion der erhaltenen Resultate - Vergleich der Resultate mit dem Stand der Literatur - Niederschrift der Arbeit						
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch Literaturhinweise: werden je nach Thema von den betreuenden Dozenten gegeben						

Strukturaufklärung mittel Beugungsmethoden					Abkürzung ACVI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	1 Sem.	6	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Oliver Janka			
Dozierende	Janka, Morgenstern			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	AC10 wünschenswert Für die Modulelemente ACK-P und / oder ACK-SC wird das Modulelement ACK-T zwingend benötigt			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	Theorie der Röntgenbeugung (ACK-T)	2	3
	Praktikum	Pulverdiffraktion in der Praxis (ACK-P)	2	3
	Praktikum	Einkristalldiffraktion in der Praxis (ACK-SC)	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Abschlussprüfung für ACK-T ACK-P und ACK-SC unbenotet			
Workload	Theorie der Beugung & Symmetriellehre (ACK-T)			
	Präsenzzeit Vorlesung	30 h		
	Bearbeitung Übungsblätter	15 h		
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung	45 h		
	Summe (3 CP)	90 h		
	Pulverdiffraktion in der Praxis (ACK-P)			
	Präsenzzeit Praktikum	60 h		
Vor- und Nachbereitung	30 h			
Summe (3 CP)	90 h			

	<p>Einkristalldiffraktion in der Praxis (ACK-SC)</p> <table> <tr> <td>Präsenzzeit Praktikum</td> <td>60 h</td> </tr> <tr> <td>Vor- und Nachbereitung</td> <td>30 h</td> </tr> <tr> <td>Summe (3 CP)</td> <td>90 h</td> </tr> </table>	Präsenzzeit Praktikum	60 h	Vor- und Nachbereitung	30 h	Summe (3 CP)	90 h
Präsenzzeit Praktikum	60 h						
Vor- und Nachbereitung	30 h						
Summe (3 CP)	90 h						
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Note der Abschlussprüfung, Praktikum unbenotet						
Lernziele/Kompetenzen	<p>Die Studierenden sollen:</p> <p>Theorie der Beugung &amp; Symmetriellehre (ACK-T)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Einen tiefergehenden Einblick in die Symmetriellehre erhalten</li> <li>▪ Die Theorie der Beugung (geometrisch und kinematisch) erlernen</li> <li>▪ Mit Hilfe der Beugungstheorie die Grundlagen der Pulver- und Einkristallbeugung verstehen</li> <li>▪ Weiterführende Beugungsmethoden (Neutronen, Elektronen, Hochdruck) kennenlernen</li> <li>▪ Strukturverwandtschaften mit Hilfe von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen erlernen.</li> </ul> <p>Pulverdiffraktion in der Praxis (ACK-P)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Die Präparation von Pulverproben für die Diffraktion erlernen</li> <li>▪ Messungsroutinen erlernen und verstehen</li> <li>▪ Anhand von Beispielen die Auswertung der erhaltenen Beugungsdaten erlernen</li> </ul> <p>Einkristalldiffraktion in der Praxis (ACK-SC) (Gerät)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Die Züchtung geeigneter Einkristalle erlernen</li> <li>▪ Aufsetzen und Ausrichten eines Kristalles auf dem Goniometer, Bestimmung der Messstrategie und Integration der Daten und Absorptionskorrektur</li> <li>▪ Softwareanwendungen erlernen</li> <li>▪ Lösen und Verfeinern einer Kristallstruktur</li> <li>▪ Einführung kristallographischer Gruppen: Faktorgruppe, schwarz-weiß-Gruppen (magnetische Gruppen), ein-, zwei- und dreidimensionale Gruppen (polare vs. nicht polare Gruppen)</li> <li>▪ Puckering Parameter</li> <li>▪ Koordinationszahlen und Koordinationsgeometrien</li> </ul>						
Inhalt(e)	<p>Theorie der Beugung &amp; Symmetriellehre (ACK-T)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Strahlungsarten und deren Detektion</li> <li>▪ Beugungstheorie</li> <li>▪ Beugungsmethoden</li> <li>▪ Symmetriellehre</li> <li>▪ Gruppe-Untergruppe-Beziehungen</li> </ul>						

	<p>Pulverdiffraktion in der Praxis (ACK-P)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Probenpräparation</li> <li>▪ Messmethoden</li> <li>▪ Datenauswertung</li> <li>▪ Interpretation der Daten</li> </ul> <p>Einkristalldiffraktion in der Praxis (ACK-SC)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Probenpräparation</li> <li>▪ Messmethoden</li> <li>▪ Datenauswertung</li> <li>▪ Interpretation der Daten</li> </ul>
<p>Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch</p> <p>Literaturhinweise: Borchardt-Ott, H. Sowa, Kristallographie, Springer Spektrum; International Tables for Crystallography, Volume A, A1 und E</p>

Modul					Abkürzung
Nachhaltige Analytische Chemie					ACVII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	10	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Kautenburger				
Dozierende	Dozierende der Chemie				
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul Master Chemie				
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine				
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP	
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>				
	Vorlesung	Umweltanalytik und Monitoring-Strategien	2	3	
	Vorlesung	Instrumentelle Analytik	2	3	
	Praktikum	Gewässeranalytik	6	3	
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete mündliche oder schriftliche Prüfungen zu den einzelnen Lehrveranstaltungen, Praktikum unbenotet				
Workload	<u>Umweltanalytik und Monitoring-Strategien:</u>				
	Präsenzzeit Vorlesung:				30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung				60 h
	Summe (3 CP)				90 h
	<u>Vorlesung Instrumentelle Analytik:</u>				
	Präsenzzeit Vorlesung:				30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung				60 h
Summe (3 CP)				90 h	
<u>Praktikum Gewässer-Analytik:</u>					
Präsenzzeit Blockpraktikum				60 h	
Vor- und Nachbereitung:				30 h	

	Summe (3 CP)	90 h
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Gewichteter Mittelwert der Einzelnoten gemäß § 14 (4) der gemeinsamen Prüfungsordnung der Fakultät NT	
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen</p> <p><u>Umweltanalytik und Monitoring-Strategien:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Kenntnisse im Bereich der Auswirkung von Chemikalien und chemischen Vorgängen auf die Umwelt.</li> <li>▪ Kenntnisse zur Konzeptionierung von Messprogrammen, zur Gewinnung von Umweltproben und deren Konservierung (am Beispiel Gewässer mit Hinblick auf das Praktikum)</li> <li>▪ Kenntnisse zur Evaluierung, statistischen Auswertung sowie zur Interpretation der gewonnenen Messdaten</li> <li>▪ Kenntnisse über Methoden zur Analyse von Umweltchemikalien und chemischen Prozessen bezüglich ihrer Umweltgefährdung</li> <li>▪ Vertiefte Kenntnisse zu Grundlagen umweltanalytischer Methoden, Kopplungsmethoden und deren Anwendung</li> </ul> <p><u>Instrumentelle Analytik:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Vertiefte Einblick in die Methodenentwicklung zur Entwicklung von Chromatogrammen und Massenspektren</li> <li>▪ Vertiefte Kenntnisse über die einzelnen Arten von Massenspektrometern</li> <li>▪ Vertiefte Kenntnisse zur Auswertung von Massenspektren organischer und anorganischer Verbindungen</li> <li>▪ Einführung in die Analyse großer Datensätze</li> <li>▪ Kenntnisse zur Erhebung von Messdaten mittels Non-Target Screening</li> </ul> <p><u>Praktikum Gewässer-Analytik:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Praktische Anwendung der Grundlagen der instrumentellen Analytik und Umweltanalytik auf Fragestellungen der nachhaltigen Analyse von Gewässern in der Umwelt</li> <li>▪ Anwendung verschiedener Probenaufbereitungsverfahren</li> <li>▪ Untersuchung von Umweltproben auf eine Vielzahl bekannter Substanzen</li> <li>▪ Erlernen der Grundlagen des Non-Target-Screenings</li> </ul>	

## Inhalt(e)

Umweltanalytik und Monitoring-Strategien:

- Überblick über Umweltmonitoring- Strategien, Konzepte und Ziele
- Quellen und Eintragspfade von Substanzen in die Umwelt
- Überblick über umweltrelevante Messparameter
- Bestimmung von Summen und Gruppenparametern
- Probenahme in der Umweltanalytik
- Probenvorbereitungsmethoden
- Überblick über spektroskopische bzw. spektrometrische Quantifizierungsmethoden
- Ionenchromatographie
- AAS und ICP-basierte Methoden zur Elementanalytik
- Überblick über Kopplungsmethoden (CE-ICP-MS, LC-ICP-MS, und LA-ICP-MS)
- Evaluierung und Interpretation erhobener umweltanalytischer Messdaten mit Hilfe multivariater Statistik
- Optionales praktisches Fallbeispiel (inkl. Exkursion): Online Gewässermonitoring: Aufbau und Funktion von Gewässergüte-Messstationen zur hochfrequenten Erhebung von Echtzeit-Messdaten verschiedener relevanter Güteparameter

Instrumentelle Analytik:

- Einführung in die Methodenentwicklung von chromatografischen Trennmethoden
- Einführung in die Methodenentwicklung von Massenspektrometrischen Methoden
- Ionisationstechniken in der Massenspektrometrie
- Analysatoren in der Massenspektrometrie
- Interpretation von Massenspektren von organischen und anorganischen Verbindungen
- HPLC und HPLC-MS
- GC und GC-MS
- Probenvorbereitung von Gewässerproben
- Einführung in Non Target Screening
- Einführung in statistische Methoden (Kendrick Plot, Van-Krevelen, PCA)
- Exkurs, Bedeutung der Gewässeranalytik in der Justiz

Praktikum Gewässer-Analytik:

- Probenahme von Gewässerproben
- Probenaufbereitung mittels SPE
- Probenaufbereitung mittels Flüssig-Flüssig-Extraktion
- Vermessung der Proben mit HPLC-FT-ICR-MS

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Vermessung der Proben mit GC-MS</li> <li>▪ Datenprozessierung und statistische Auswertung</li> <li>▪ Erstellen von Feature Tables</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Deutsch bzw. Englisch</p> <p>Literaturhinweise:</p> <p>Folien zur Vorlesung als PDF-File (zum Download im Internet zugänglich)</p> <p><u>Umweltanalytik und Monitoring-Strategien:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• D. C. Harris, Lehrbuch der quantitativen Analyse. Springer-Verlag, 2014, ISBN: 978-3-642-37787-7</li> <li>• F. W. Fifield, Haines, P. J., Environmental Analytical Chemistry, Wiley, 2000, ISBN: 978-0-632-05383-4</li> <li>• R. A. Hites, J. D. Raff, Umweltchemie, Eine Einführung mit Aufgaben und Lösungen, Wiley, 2017, ISBN: 978-3-527-33523-7</li> <li>• J.E. Andrews, P. Brimblecombe, T.D. Jickells, P.S. Liss, B. Reid, An Introduction to Environmental Chemistry, Wiley, 2004, ISBN: 978-0632059058</li> <li>• J.S. Gaffney, N.A. Marley, Chemistry of Environmental Systems: Fundamental Principles and Analytical Methods, Wiley, 2019, ISBN: 978-1-119-31358-8</li> <li>• M.A. Hanif, F. Nadeem, I. Ahmad Bhatti, H.M. Tauqeer, Environmental Chemistry: A Comprehensive Approach, Wiley, 2020, ISBN: 978-1-119-65091-1</li> </ul> <p><u>Instrumentelle Analytik:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• J.H.Gross, Mass Spectrometry A textbook, Springer, 2004, ISBN: 978-3-540-40739-3</li> <li>• F.W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation von Massenspektren, Springer, 1995, ISBN: 978-3-642-39848-3</li> </ul>

Modul					Abkürzung
Moderne Synthesemethoden					OCVI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	6	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Jauch			
Dozierende	Jauch			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	Stereochemie OC15 (WS)	2	3
	Vorlesung	Stereoselektive Synthese OC09 (SS)	2	3
	Vorlesung	Pericyclische Reaktionen OC08 (SS)	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete Abschlussprüfung: Benotete Klausur zu jeder Vorlesung			
Workload	<u>OC15:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h Summe (3 CP) 90 h <u>OC09:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h Summe (3 CP) 90 h <u>OC08:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h Summe (3 CP) 90 h			
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Note der Abschlussprüfung			

Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen</p> <p><u>Stereochemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Kennen verschiedener Arten von Isomerie</li> <li>▪ Kennen verschiedener stereogener Elemente</li> <li>▪ Bestimmen der Konfiguration stereogener Elemente nach CIP</li> <li>▪ Kennen von stabilen Konformationen verschiedener Strukturen</li> <li>▪ Erklären warum diese Konformationen stabil sind</li> <li>▪ Kennen von modernen Methoden zur Bestimmung von Absolutkonfigurationen und zur Analytik von Stereoisomeren</li> </ul> <p><u>Stereoselektive Synthese</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Kennen von Selektivitäten und deren Ursache(n)</li> <li>▪ Klassifizierung von stereoselektiven Reaktionen</li> <li>▪ Kennen von Möglichkeiten der EPC-Synthese</li> <li>▪ Chiral Pool, Chirale Auxilliare, Chirale Katalysatoren</li> <li>▪ Kennen von Methoden zur enantioselektiven Synthese von Alkoholen, Epoxiden, Aminen,...</li> </ul> <p><u>Pericyclische Reaktionen</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Kennen der Klassen von Pericyclischen Reaktionen</li> <li>▪ Kennen der entsprechenden Woodward-Hoffmann-Regeln</li> <li>▪ Anwenden der Woodward-Hoffman-Regeln auf komplexe Pericyclische Reaktionen</li> </ul>
Inhalt(e)	<p><u>Stereochemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ 1. Strukturen und Isomerie</li> <li>▪ 1.1. Konstitution und Konstitutionsisomere</li> <li>▪ 1.2. Konfiguration und Konfigurationsisomere</li> <li>▪ 1.3. Konformation und Konformationsisomere</li> <li>▪ 1.4. Zusammenfassende Klassifikation von Isomeren</li> <li>▪ 2. Analytik von Stereoisomeren</li> <li>▪ 2.1. Analytik von Diastereomeren</li> <li>▪ 2.2. Enantiomeranalytik und Racematspaltung</li> <li>▪ 3. Prochiralität und Heterotopiekonzept</li> <li>▪ 3.1. Prochirale <math>sp^3</math>-hybridisierte C-Atome</li> <li>▪ 3.2. Prochirale <math>sp^2</math>-hybridisierte C-Atome</li> <li>▪ 3.3. Heterotopiekonzept</li> </ul> <p><u>Stereoselektive Synthese</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ 1. Grundlagen der Stereoselektiven Synthese</li> <li>▪ 1.1. Selektivität</li> <li>▪ 1.2. Ursachen der Selektivität</li> <li>▪ 1.3. Möglichkeiten der EPC-Synthese</li> <li>▪ 1.4. Nicht-lineare Effekte</li> </ul>

- 1.5. Kinetische Racematspaltung
- 1.6. Desymmetrisierung
- 1.7. Selbstregeneration von Stereogenen Zentren
- 2. Enantioselektive Synthese von Alkoholen
- 2.1. Addition von Organometallverbindungen an Aldehyde und Ketone
- 2.2. Enantioselektive Reduktion von Carbonylverbindungen
- 2.3. Enantioselektive Hydroborierung-Oxidation von Doppelbindungen
- 2.4. Enantioselektive Oxidationen
- 2.5. Regioselektive Öffnung von enantiomerenreinen Epoxiden
- 3. Enantioselektive Synthese von Epoxiden
- 3.1. Epoxidierung von Elektronenreichen Doppelbindungen (Shi, Jacobsen, Sharpless)
- 3.2. Epoxidierung von Elektronenarmen Doppelbindungen (Julia-Colonna)
- 4. Enantioselektive Aldol-Reaktionen
- 4.1. Aldol-Reaktionen mit chiralen Auxilliaren
- 4.2. Aldol-Reaktionen mit chiralen Katalysatoren
- 5. Enantioselektive Michael-Additionen
- 6. Enantioselektive Synthese von Aminen

#### Pericyclische Reaktionen

- 1. No Mechanism Reactions vor 1965
- 2. Notwendige und hinreichende Grundlagen
- 2.1. HMO-Theorie
- 2.2. Aromatische und antiaromatische Übergangszustände
- 2.3. FMO-Theorie von Fukui
- 2.4. Korrelationsdiagramme und Überkreuzungsverbot (non-crossing rule)
- 3. Übersicht über pericyclische Reaktionen
- 3.1. Cycloadditionen
- 3.2. Elektrocyclische Ringschluss- und Ringöffnungsreaktionen
- 3.3. Sigmatrope Umlagerungen
- 3.4. Konzertierte Gruppenübertragungen
- 3.5. Cheletrope Reaktionen
- 4. Mechanismus der pericyclischen Reaktionen – Woodward-Hoffman-Regeln
- 4.1. Theoretische Betrachtung – Erhaltung der Orbital-symmetrie
- 4.2. Theoretische Betrachtung – Grenzorital-Methode
- 4.3. Theoretische Betrachtung – Dewar-Zimmermann-Konzept

	<ul style="list-style-type: none"><li>▪ 5. Präparative Anwendungen</li><li>▪ 5.1. Cycloadditionen</li><li>▪ 5.2. Sigmatrope Umlagerungen</li><li>▪ 5.3. Elektrocyclische Ringschluss- und Ringöffnungsreaktionen</li><li>▪ 5.4. Konzertierte Gruppenübertragungen</li><li>▪ 5.5. Cheletrope Reaktionen</li><li>▪ 6. Anhang</li><li>▪ 6.1. Biographie von R. B. Woodward</li><li>▪ 6.2. Biographie von R. Hoffmann</li></ul>
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch  Literaturhinweise: vgl. Skripten zu den Vorlesungen  Literaturempfehlungen OC15: Eliel, Wilen, Mander, Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley VCH 1994 und im Skript angegebene Literatur  Literaturempfehlungen OC09: M. Nogradi et al., <i>Stereochemistry and Stereoselectiv Synthesis</i> , Wiley-VCH, 2016; R. E. Gawley, J. Aube, <i>Principles of Asymmetric Synthesis</i> , Elsevier, 2012  Literaturempfehlungen OC08: Pericyclic Reactions, S. Kumar, V. Kumar, S. P. Singh, Academic Press 2015; Pericyclic Reactions, S. Sankararaman, 1. Aufl. 2005, Wiley-VCH

Modul					Abkürzung
Organische Naturstoffchemie I					OCVII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	1 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Speicher			
Dozierende	Speicher			
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflicht Master Chemie			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	OC10 Heterocyclen, Natur- und Wirkstoffe	2	3
	Vorlesung	OC 11 Enzyme in der Organischen Synthese	2	3
Leistungskontrollen	Benotete Abschlussprüfungen			
Workload	Präsenzzeit Vorlesung			60 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			120 h
	Summe (6 CP)			180
	h			
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Mittelwert der Abschlussprüfungen			
Lernziele/Kompetenzen	<u>OC 10: Heterocyclen:</u> Eigenschaften und Synthesen von Heterocyclen; Werkzeuge in der Synthese; heterocyclische Naturstoffe und Wirkstoffe  <u>OC 11: Enzyme in der organischen Synthese:</u> Kenntnisse zur Gewinnung und Handhabung von Enzymen; Enzymklassen und „Funktionsweise; Biotransformation zur selektiven Synthese organischer Verbindungen			
Inhalt(e)	<u>OC 10: Heterocyclen:</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Struktur und Nomenklatur von Heterocyclen</li> <li>▪ Drei- und Vierring-Heterocyclen</li> <li>▪ Schwerpunkt: Fünf- und Sechsring-Heterocyclen</li> <li>▪ Höhergliedrige Heterocyclen</li> </ul> <u>OC 11: Enzyme in der organischen Synthese:</u>			

	<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Einführung: Proteine, Enzyme, Enzymkinetik</li><li>▪ Produktion, Isolierung und Handling von Enzymen, Enzymklassen und Nomenklatur</li><li>▪ Hydrolase-Reaktionen</li><li>▪ Oxidoreduktase-Reaktionen</li><li>▪ Enzyme zur Knüpfung von C-C-Bindungen</li><li>▪ Enzyme zur Knüpfung glycosidischer Bindungen</li><li>▪ Weitere Enzyme in der Organischen Synthese</li><li>▪ Künstliche Enzyme und katalytische Antikörper</li></ul>
Weitere Informationen	<p>Unterrichtssprache: Deutsch</p> <p>Literaturhinweise:</p> <p>Eicher/Hauptmann/Speicher: The Chemistry of Heterocycles</p> <p>Faber: Biotransformations in Organic Chemistry</p>

Modul					Abkürzung
Organische Naturstoffchemie II					OC VIII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	1 Sem.	6	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Kazmaier			
Dozierende	Kazmaier, Jauch			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	Retrosynthese	2	3
	Vorlesung	Naturstoffsynthese	2	3
	Vorlesung	2D-NMR-Spektroskopie	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete Abschlussprüfung für jede einzelne Vorlesung			
Workload	Präsenzzeit Vorlesung Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung Summe (9 CP)			90 h 180 h 270 h
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Durchschnittsnote der Abschlussprüfungen			
Lernziele/Kompetenzen	Die Studenten sollen mit den verschiedenen Klassen von Naturstoffen vertraut sein, sollen die wichtigsten Biosynthesewege kennen und Totalsynthesen von komplexen Naturstoffen verstehen und nachvollziehen können. Die Studenten sollen in der Lage sein, für kleinere Naturstoffe eigenständig Synthesen auf dem Papier zu entwerfen. Die Studierenden sollen in der Lage sein, die Strukturen von komplexeren Naturstoffen mit Hilfe verschiedener 1D- und 2D-			

	Methoden aufzuklären.
Inhalt(e)	<p><u>OC 12: Retrosynthese</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Kennenlernen verschiedener Retrosynthesestrategien (T-Goal, S-Goal, Stereoselektive Strategien,...),</li> <li>- Retrosynthesetechniken,</li> <li>- Durchführung exemplarischer Retrosynthesen.</li> </ul> <p><u>OC 13: Naturstoffsynthese</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Übersicht über Naturstoffklassen (Struktur, Herkunft, Wirkung),</li> <li>- Elementare Biosynthesewege,</li> <li>- Synthesen ausgewählter komplexer Naturstoffe</li> </ul> <p><u>OC 14: Strukturaufklärung in der Organischen Chemie II – 2D-NMR-Spektroskopie</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Vertiefte theoretische Grundlagen der NMR-Spektroskopie,</li> <li>- Vertiefte Gerätetechnik,</li> <li>- 2D-NMR-Methoden: H,H-COSY, TOCSY, HSQC, HMQC, HMBC, NOESY, ROESY,</li> <li>- Ausführliche Besprechung dieser Spektren bei einem bekannten Molekül und bei einem (für die Studierenden) unbekanntem Molekül.</li> </ul>
Weitere Informationen	Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch
<i>Verwendbarkeit des Moduls</i>	Literaturhinweise:
<i>Unterrichtssprache</i>	Corey: The Logic of Chemical Synthesis
<i>Ggf. Literatur</i>	Nuhn: Naturstoffchemie
	Bhat/Sivakamur: Chemistry of Natural Products
	Nicolaou: Classics in Total Synthesis I + II + III
	Claridge: High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry
	Friebolin: Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie

Modul					Abkürzung
Biologische Chemie					OC IX
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	1 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Titz			
Dozierende	Titz			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	OC16 Chemie der Biopolymere	2	3
	Vorlesung	OC17 Chemical Glycobiology	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Klausuren nach Abschluss der Lehrveranstaltungen			
Workload	<u>OC16 und OC17:</u> Präsenzzeit Vorlesung Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung Summe (6 CP)			60 h 120 h 180 h
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Mittelwert der Noten der Abschlussprüfungen			
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen:</p> <p>Die wichtigsten Klassen der Biopolymere kennen, sowie deren chemischen Synthesen und biosynthetischen Mechanismen beherrschen. Ebenso werden moderne Methoden, die entscheidenden Einfluss auf unser modernes Leben haben, besprochen.</p>			

	<p>Vertiefend werden die vielfältigen Rollen von Kohlenhydraten in der Natur beleuchtet. Es werden deren chemische und biochemische Synthesen erlernt, sowie analytische Methoden eingeführt. Anschließend wird das Wissen durch ausgewählte Highlights aus der angewandten Forschung vertieft.</p>
<p>Inhalt(e)</p>	<p><b>OC 16: Chemie der Biopolymere</b></p> <p>Biopolymere: Nukleinsäuren, Proteine, Kohlenhydrate, Lipide</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• chemische Struktur und Aufbau, daraus resultierende Eigenschaften</li> <li>• Biosynthese der Biopolymere, Funktionsweise der jeweils wichtigsten Enzyme</li> <li>• Chemische Synthese der Polymerisationsreaktionen: Nukleinsäuren, Peptide, Glykosylierungen</li> <li>• angewandte Themen: Nukleinsäure und Protein Sequenzierung, PCR, mRNA-Vakzine, chemische und biotechnologische Herstellung von Proteinen</li> </ul> <p><b>OC 17: Chemical Glycobiology</b></p> <p><b>Chemical Part:</b> Anomeric Effect, Protecting Group Chemistry, Glycosylation Chemistry, Oligosaccharide Synthesis;  <b>Biosynthetic part:</b> Enzymes: Glycosyl Hydrolases and Inhibitors, Transglycosylation, Glycosyltransferases and Inhibitors, Reading Carbohydrate Signals with Lectins, Asn-linked Protein Glycosylation (N-glycosylation); <b>Analytical Methods:</b> NMR, Mass Spectrometry, Biochemical Assays for Transferases and Hydrolases, Lectin-binding Assays, Glycan Arrays; <b>Applied topics:</b> Bacterial and Eukaryotic Cell Adhesion, Coagulation Cascade and Heparin; Glucose Metabolism and Diabetes, Natural Product Glycosylation, <i>Bacillus thuringiensis</i> in crop protection, Carbohydrate Vaccines</p>
<p>Weitere Informationen</p> <p>Verwendbarkeit des Moduls</p> <p>Unterrichtssprache</p> <p>Ggf. Literatur</p>	<p><u>Unterrichtssprache:</u> OC16: Deutsch, OC17: Englisch</p> <p><u>Literaturhinweise:</u></p> <p>John McMurry: Organic Chemistry (CENgage)</p> <p>Clayden, Greeves, Warren, Wothers: Organic Chemistry (Oxford University Press)</p> <p>Stryer: Biochemie (SpringerSpektrum Verlag, SULB online)</p> <p>Stick: Carbohydrates Essential Molecules of Life (Elsevier)</p> <p>Varki: Essentials of Glycobiology  <a href="https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK579918/">(https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK579918/)</a></p>

Modul					Abkürzung
Medizinische Chemie I					MEDI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Hirsch			
Dozierende	Empting, Hirsch, Titz			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	MED01 Medizinische Chemie 1	2	3
	Vorlesung	MED02 Medizinische Chemie 2	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Mündliche oder schriftliche Prüfung nach Abschluss der Lehrveranstaltungen			
Workload	<u>Vorlesung MED01:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 60 h <u>Vorlesung MED02:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 60 h Summe (3+3 = 6 CP) 180 h			
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Note der Abschlussprüfung			
Lernziele/Kompetenzen	Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen:  Verständnis der wichtigsten Konzepte und Zusammenhänge in der modernen Medizinischen Chemie / Fähigkeiten zum wis-			

	senschaftlichen Arbeiten in Medizinischer Chemie unter fachkundiger Anleitung
Inhalt(e)	<p><b>MED01:</b> Pharmakokinetik/ Pharmakodynamik; Wirkstofftargets; <i>Drug-discovery</i> Strategien; Naturstoffe; Kombinatorische Bibliotheken und HTP-Synthese; elektronisches Screenen, Struktur-Wirkungs-Beziehungen; Bioisosterie, Ringtransformation; Spezifische Substituenteneffekte; Quantifizierung von Arzneistoff-Rezeptor-Interaktionen; Präklinische Wirkstofftestung</p> <p><b>MED02:</b> Protein-Ligand-Interaktion; Enzyminhibitoren und Rezeptor(ant)agonisten; Leitstrukturfindung; Molecular Modeling; Kraftfeldmethoden/ Quantenmechanik; Moleküldynamik; Konformationsanalyse; wissensbasierte Ansätze; Pharmakophormodelle; <i>active analogue approach</i>; Leitstrukturen durch Datenbanksuche; Bindungsmodus von Liganden; <i>induced fit</i>; molekulares elektrostatisches Potential; Proteinmodellierung; quantitative Struktur-Wirkungs-Beziehungen; strukturbasiertes Wirkstoffdesign, de novo-Design; Metabolismus; Prodrugs</p>
Weitere Informationen	<p>Unterrichtssprache: Deutsch</p> <p>Literaturhinweise:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>(1) G. Klebe: <i>Wirkstoffdesign</i>, Spektrum Akademischer Verlag</li><li>(2) C. G. Wermuth: <i>The Practice of Medicinal Chemistry</i>, Elsevier Academic Press</li><li>(3) G. L. Patrick: <i>An introduction to MEDICINAL CHEMISTRY</i>, Oxford University Press</li><li>(4) K. Müller, H. Prinz, M. Lehr: <i>Pharmazeutische/Medizinische Chemie</i>, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart</li></ol>

Modul					Abkürzung
Medizinische Chemie II					MEDII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	1-2 Sem.	11	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Ducho				
Dozierende	Ducho, Empting, Engel, Frotscher, Hirsch, Titz				
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul				
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine. Eine Teilnahme an der Vorlesung MED01 vor einer Teilnahme am Praktikum MEDG wird jedoch empfohlen.				
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP	
	Übung	MEDÜ Übungen Medizinische Chemie	1	1	
	Praktikum	MEDG Grundpraktikum Medizinische Chemie	2	2	
	Praktikum	MEDV Vertiefungspraktikum Medizinische Chemie	5 <b>oder</b> 8	3 <b>od.</b> 6	
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	<u>MEDÜ und MEDG</u> : schriftliche oder mündliche Prüfung nach Abschluss der Lehrveranstaltungen <u>MEDV</u> : unbenotetes Praktikumsprotokoll				
Workload	<u>Übung MEDÜ</u> : Präsenzzeit Übungen 15 h Bearbeitung der Übungsaufgaben 15 h <u>Praktikum MEDG</u> : Präsenzzeit Praktikum 30 h Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 30 h Summe (1+2 = 3 CP) 90 h  <u>Praktikum MEDV</u> : <i>kurze Version (5 SWS, 3 CP)</i> Präsenzzeit Praktikum 75 h				

	Vor- und Nachbereitung 15 h Summe (3 CP) 90 h <i>lange Version (8 SWS, 6 CP)</i> Präsenzzeit Praktikum 120 h Vor- und Nachbereitung 60 h Summe (6 CP) 180 h
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Note der Abschlussprüfung MEDÜ/MEDG
Lernziele/Kompetenzen	Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen:  Verständnis der wichtigsten Konzepte und Zusammenhänge in der modernen Medizinischen Chemie / Fähigkeiten zum experimentellen wissenschaftlichen Arbeiten in Medizinischer Chemie unter fachkundiger Anleitung
Inhalt(e)	<p><b>MEDÜ:</b> Übungen zu den für MEDG und die Abschlussprüfung relevanten Themen</p> <p><b>MEDG:</b> Experimentelle Bestimmung von Substituentenparametern unter Einsatz moderner Verfahren: <math>\pi</math>, <math>R_m</math>, <math>pK_a</math>, <math>\delta</math>; Hansch-Analyse; diverse Molecular-Modelling-Versuche wie: Proteinmodelling; Docking; de-novo-Design; Moleküldynamik-Simulation; Pharmakophormodelle</p> <p><b>MEDV:</b> Bearbeitung eines aktuellen Forschungsthemas unter Betreuung eines/-r Assistenten/-in im Arbeitskreis, Literaturrecherche; Zeit- und Ressourcen-Planung, experimentelle Durchführung, Arbeitsbericht, ggf. Kurzvortrag im Arbeitskreis</p>
Weitere Informationen	Unterrichtssprache: Deutsch  Literaturhinweise: (1) G. Klebe: <i>Wirkstoffdesign</i> , Spektrum Akademischer Verlag (2) C. G. Wermuth: <i>The Practice of Medicinal Chemistry</i> , Elsevier Academic Press (3) G. L. Patrick: <i>An introduction to MEDICINAL CHEMISTRY</i> , Oxford University Press (4) K. Müller, H. Prinz, M. Lehr: <i>Pharmazeutische/Medizinische Chemie</i> , Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart (5) H.-D. Höltje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, <i>Molecular Modeling</i> , Wiley-VCH (6) A. R. Leach, <i>Molecular Modelling</i> , Pearson Prent. Hall (7) R. Mannhold, P. Krogsgaard-Larsen, H. Timmerman, <i>Advanced Computer-Assisted Techniques in Drug Discovery</i> , VCH (8) R. Mannhold, H. Kubinyi, G. Folkers, <i>Cheminformatics in Drug Discovery</i> , Wiley-VCH

Modul Grundlagen der Polymere					Abkürzung MCI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Gallei			
Dozierende	Gallei			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung + Übung	Synthese von Polymeren	2	3
	Vorlesung + Seminar	Polymeranalytik	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete Abschlussprüfungen (MC01, MC02)			
Workload	<u>Vorlesung MC01:</u> Präsenzzeit Vorlesung + Übung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h <u>Vorlesung MC02:</u> Präsenzzeit Vorlesung + Seminar 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h Summe (6 CP) 180 h			
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Note der Abschlussprüfungen, Praktikumsnote			
Lernziele/Kompetenzen	Die Studierenden sollen - die Synthese der wichtigsten Gebrauchspolymere beherrschen. - die wichtigsten Polymerisationsmechanismen kennenler-			

	<p>nen.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- die wichtigsten Methoden zur Charakterisierung von Polymeren kennenlernen.</li> </ul>
<p>Inhalt(e)</p>	<p><u>MC01:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Polyolefine durch radikalische Polymerisation</li> <li>- Polyolefine durch Ziegler-Natta Polymerisation, Taktizität</li> <li>- Polybutadien, Polyisopren durch anionische Polymerisation</li> <li>- Polystyrol durch radikalische bzw. anionische Polymerisation, Emulsions- und Suspensionspolymerisation</li> <li>- Polyacrylate durch radikalische und anionische und lebende radikalische Polymerisation</li> <li>- Polyvinylchlorid, Polyvinylfluoride durch radikalische Polymerisation</li> <li>- Polyvinylether, Polyvinylester durch radikalische Polymerisation</li> <li>- Leitfähige Polymere durch koordinative und Elektropolymerisation</li> <li>- Aliphatische Polyether, durch ringöffnende Polymerisation</li> <li>- Polyester durch Polykondensation</li> <li>- Polyamide durch Polykondensation bzw. ringöffnende Polymerisation, flüssigkristalline Polymere</li> <li>- Polyurethane durch Polyaddition</li> <li>- Cellulosederivate durch polymeranaloge Umsetzung</li> </ul> <p><u>MC02:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Primärstruktur, Nomenklatur, Beispiele</li> <li>- Kinetik der radikalischen Polymerisation, Molmassenverteilungen</li> <li>- Polymerstruktur in Lösung</li> <li>- Thermodynamik von Polymerlösungen</li> <li>- Molmassenbestimmung, Lichtstreuung</li> <li>- Trägheitsradius, hydrodynamischer Radius, Viskosität</li> <li>- Molmassenverteilung, GPC</li> <li>- Kristallisation und Phasenumwandlungen, DSC</li> </ul>

<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Deutsch</p> <p>Literaturempfehlungen:</p> <p>Tieke, Makromolekulare Chemie, Wiley</p> <p>Elias, Makromolekulare Chemie, Wiley</p> <p>Elias, An Introduction to Polymer Science, Wiley</p>
--	--

Modul					Abkürzung
Modern Polymer Chemistry					MCII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	8	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Gallei			
Dozierende	Gallei, Walter			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Für MCG: MC01			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	Modern Methods in Polymer Chemistry MC08	2	3
	Vorlesung	Industrielle Makromolekulare Chemie a+b MC03 a und b	2	3
	Praktikum	Makromolekulares Grundpraktikum MCG	4P	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete Abschlussprüfungen (MC08, MC03 a + b) Benotete Protokolle und Kolloquien (MCG)			
Workload	<u>Vorlesung MC08:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h <u>Vorlesung MC03 a + b:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 60 h <u>Makromolekulares Grundpraktikum:</u> Präsenzzeit, Vor- und Nachbereitung 90 h Summe (9 CP) 270 h			

Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Note der Abschlussprüfungen, Praktikumsnote
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen:</p> <p>Verständnis der wichtigsten Konzepte und Zusammenhänge in der modernen Makromolekularen Chemie / Fähigkeit zum wissenschaftlichen Arbeiten in Makromolekularer Chemie unter fachkundiger Anleitung</p> <p><u>MC08:</u></p> <p>Die Studierenden entwickeln ein Verständnis zu Reaktionsmechanismen und den synthetischen Optionen in der aktuellen Polymerchemie. Darüber hinaus werden Methoden diskutiert, um die Konstitution von Polymeren experimentell nachzuweisen und diese mit den daraus resultierenden Eigenschaften und Anwendungsfeldern zu korrelieren. Basierend auf den Syntheserouten werden auch Phasen- und Ordnungszuständen dargestellt, die auf dem komplexen Zusammenspiel der intra- und intermolekularen Selbstorganisation beruhen. Dies wird anhand verschiedener Beispiele aus der Praxis veranschaulicht und es wird demonstriert, wie man anhand der Polymerchemie heutzutage funktionale Polymere nutzen kann.</p>
Inhalt(e)	<p><u>MC08:</u></p> <p>Ziel dieser Vorlesung sind vertiefte Kenntnisse in allen Bereichen der modernen Synthese und molekularen Charakterisierung makromolekularer Stoffe. Zunächst werden die in der Vorlesung MC1 vorgestellten Ketten- und Schrittwachstumsreaktionen mechanistisch und kinetisch fundiert diskutiert. Basierend hierauf werden aktuelle Forschungs- und Entwicklungstrends zu den verschiedenen Polymerisationsverfahren vorgestellt und ebenfalls mechanistisch und kinetisch diskutiert. Der letzte Teil der Vorlesung widmet sich komplexeren Polymerarchitekturen und ihrer gezielten Herstellung - beginnend vom definiert verzweigten Homopolymer bis hin zu vernetzten Polymeren, funktionalen Polymeren und insbesondere Polymeren an Grenzflächen.</p> <p><u>MC03 a + b:</u></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Kommerzielle Bedeutung der Polymere, vom Rohöl zum Monomer, Polymermarkt, Bedeutung der Polymere für die chemische Industrie, Rohstoffbasis,</li> <li>2. Technologien/Prozesse vom Monomer zum Polymer, Grundverständnis der technischen Prozesse in der Polymerchemie,</li> <li>3. Praktiken der industriellen Forschung; Denk- und Arbeitsweise eines industriellen Forschers,</li> <li>4. Strukturpolymere, Kennenlernen ausgewählter Struktureigenschaften-Prinzipien und Anwendungen, Kunststoffe in</li> </ol>

	<p>der Umwelt,</p> <p>5. Polymere, Kennenlernen ausgewählter Struktur-Wirkungs-Prinzipien und Anwendungen.</p> <p><u>MCG:</u></p> <p>Versuche zu: Freie Radikalische Polymerisation, Copolymerisation, Anionische Polymerisation, Polykondensation, Verkapselung, Emulsionspolymerisation, Dampfdruckosmometrie, Gelpermeations-Chromatographie, Viskosimetrie, DSC und thermogravimetrische Analyse, Microextrusion, 3D-Druck</p>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatu</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch, Deutsch</p> <p>Literaturempfehlungen MC08, MCG:</p> <p><i>Controlled and Living Polymerizations</i>, Axel H.E. Müller and Krzysztof Matyjaszewski, Wiley-VCH</p> <p><i>Block Copolymers in Nanoscience</i>, M. Lazzari, G. Liu, S. Lecommandoux, Wiley-VCH</p> <p><i>Functional Polymer Films</i>, W. Knoll, R. C. Advincula, Wiley-VCH</p> <p>Review-Artikel zu ausgewählten Themenfeldern werden in der Vorlesung angegeben.</p> <p>Praktikumsskript</p>

Modul					Abkürzung
Hybrid Materials and Coatings					MCIII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	12	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Guido Kickelbick			
Dozierende	Gallei, Kickelbick, Kraus			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	HyMat Hybrid Materials and Nanocomposites	2	3
	Vorlesung	FC Functional Coatings	2	3
	Vorlesung	Smart Materials & Polymers	2	3
	Praktikum	Hybrids and Coatings	6	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Abschlussprüfungen			
Workload	<u>HyMat Hybrid Materials and Nanocomposites:</u>			
	Präsenzzeit Vorlesung			30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			60 h
	Summe (3 CP)			90 h
	<u>FC Functional Coatings:</u>			
	Präsenzzeit Vorlesung			30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			60 h
	Summe (3 CP)			90 h
	<u>SMP: Smart Materials &amp; Polymers</u>			
Präsenzzeit Vorlesung			30 h	
Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			60 h	

	<p>Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>HyCoP: Hybrids and Coatings:</u></p> <p>Präsenzzeit Praktikum 60 h</p> <p>Vor- und Nachbereitung 30 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p>
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Gewichteter Mittelwert der Einzelnoten gemäß § 14 (4) der gemeinsamen Prüfungsordnung der Fakultät NT
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen</p> <p><u>HyMat: Hybrid Materials and Nanocomposites:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Chemischen Synthese und Struktur von Hybridmaterialien und Nanokompositen</li> <li>▪ Struktur-Eigenschaftsbeziehungen von Hybridmaterialien</li> <li>▪ Überblick über Charakterisierungsmöglichkeiten der Materialien</li> <li>▪ Verständnis von technologischen Anwendungen</li> </ul> <p><u>FC: Functional Coatings:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Kenntnisse der wichtigsten Klassen funktionaler Beschichtungen und ihrer physikalisch-chemischen Funktionsprinzipien</li> <li>▪ Überblick über Verfahren der Gasphasen- und Flüssigphasenbeschichtung</li> <li>▪ Grundkenntnisse zur Charakterisierung der Beschichtungen</li> </ul> <p><u>HyCoP: Hybrids and Coatings - Praktikum:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Chemische Synthese von Vorstufen für Hybridmaterialien</li> <li>▪ Synthese von Nanopartikeln und deren Oberflächenfunktionalisierung</li> <li>▪ Charakterisierung der erhaltenen Verbindungen und Materialien</li> </ul> <p><u>SMP: Smart Materials &amp; Polymers</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ kennen den Unterschied zwischen strukturellen, funktionalen und smarten Materialien/Polymeren</li> <li>▪ können Bausteine und zugrundeliegende Mechanismen für Struktur und Funktionen für verschiedene Anwendungen identifizieren und zuordnen (z.B. Benetzung von Oberflächen, Lotuseffekt, elektrochemische Konzepte, Morphologie und Selbstorganisation)</li> <li>▪ wissen, wie verschiedene externe Reize für Schaltbarkeiten und chemische Einheiten als Teil einer (makromolekularen) Struktur wirken</li> <li>▪ lernen, die Schaltfähigkeit weicher Materialien durch Temperatur, pH-Wert-Änderung, Licht und Elektroche-</li> </ul>

	<p>mie zu verstehen</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ erfahren die grundlegenden Prinzipien und Designkonzepte für weiche und energieeffiziente Aktor-/Sensorsysteme</li> <li>▪ bauen ein Verständnis über die wichtigsten Anwendungen von Systemen aus intelligenten Materialien im Bereich der Energieumwandlung (z.B. Energy Harvesting)</li> </ul>
<p>Inhalt(e)</p>	<p><u>HyMat Hybrid Materials and Nanocomposites:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Historie, Begriffe, Definitionen</li> <li>▪ Chemie der Vorstufen</li> <li>▪ Sol-Gel Prozess</li> <li>▪ Verfahren zur organischen Oberflächenmodifizierung von Nanopartikeln</li> <li>▪ Poröse Hybridmaterialien</li> <li>▪ Charakterisierungsmethoden, z.B. Festkörper-NMR, Thermische Analyse</li> <li>▪ Anwendungen</li> </ul>
	<p><u>FC Functional Coatings:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Barrierschichten</li> <li>▪ Optische Beschichtungen</li> <li>▪ Elektronische Schichten</li> <li>▪ Tribologische Schichten</li> <li>▪ Beschichtungstechnologien</li> <li>▪ Analyseverfahren: funktional und strukturell</li> </ul>
	<p><u>SMP: Smart Materials &amp; Polymers</u></p> <p>Die Vorlesung führt in das Gebiet und den Kontext intelligenter (smarten) Materialien aus einer Material- und Systemperspektive ein. Der Schwerpunkt ist das Design und die Anwendung der Reizbarkeit von Polymeren und Hybridmaterialien. Mehrere Beispiele, von denen viele in alltäglichen Anwendungen zu finden sind, werden diskutiert, und einige aktuelle Trends in der Forschung werden hervorgehoben. Die Vorlesung behandelt dabei funktionelle und intelligente Grenzflächen (Benetzung) und elektrochemische Grenzflächen (für Energiespeicherung, Sensorik, Antrieb, Wassersanierung und Ionentrennung). Schließlich werden praktische Anwendungen von intelligenten Systemen auf der Grundlage solcher neuen Materialien erörtert. Anhand mehrerer Beispiele aus der Praxis werden Engineering-Tools für die systematische Analyse, Simulation und den Entwurf von Aktoren und Sensoren aus intelligenten Materialien vorgestellt.</p>
	<p><u>Hybrids and Coatings:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Verfahren zur Synthese von reaktiven Vorstufen für Hybridmaterialien</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Nanopartikelsyntheseverfahren</li> <li>▪ Verfahren zur Oberflächenfunktionalisierung von Nanopartikeln</li> <li>▪ Charakterisierung von Hybridmaterialien und Nanokompositen mittels NMR, IR, TGA und DSC</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch</p> <p>Literaturhinweise: Foliensätze und teilweise Videopodcasts mit Literaturhinweisen (für Vorlesungsteilnehmer zum Download/Streamen im Internet zugänglich)</p> <p>(HyMat): G. Kickelbick, Hybrid Materials: Synthesis, Characterization, and Applications, Wiley-VCH, 2006</p>

Modul					Abkürzung
Biomaterials					MCIV
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Prof. Aránzazu del Campo				
Dozierende	Prof. Aránzazu del Campo, Prof. Wilfried Weber; jeweils mit KollegInnen des INM				
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Masterstudium Chemie, Wahlpflicht				
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Voraussetzung für die Teilnahme an den Praktikum Bio-medP ist die erfolgreiche Teilnahme an den Vorlesungen.				
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP	
	Vorlesung mit Übung	<b>Biomed</b> Biomedical Polymers	2, WS	3	
	Vorlesung	<b>LiveMat</b> Engineered Living Materials for Biomedicine	1, SS	1,5	
	Praktikum	<b>BiomatP</b> Biomaterials Practical Course	1, WS	1,5	
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Teilprüfungen, schriftlich und/oder mündlich, in Deutsch oder Englisch. Praktikum: schriftlicher Bericht, unbenotet.				
Workload	<u>Biomed mit Übung:</u>				
	Präsenzzeit Vorlesung				20 h
	Präsenzzeit Übung				10 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung				60 h
	Summe (3 CP)				90 h
	<u>LiveMat:</u>				
	Präsenzzeit Vorlesung				15 h

	<p>Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 30 h Summe (1,5 CP) 45 h</p> <p><u>BiomatP: (2 Wochen)</u> Präsenzzeit Praktikumsversuche 30 h Vor- und Nachbereitung, Berichtvorbereitung 15 h Summe (1,5 CP) 45 h</p>
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Nach CP gewichteter Mittelwert der Teilprüfungen (Praktikum unbenotet)
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen</p> <p><u>Biomed: Biomedical materials with exercises</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Chemical structure, physical properties and processing methods of biomedical polymer materials</li> <li>▪ Fundamentals cell-materials interactions: Biocompatibility, immunogenicity, biofouling.</li> <li>▪ Application scenarios and examples of polymer materials in biomedical devices.</li> <li>▪ Material selection rules for biomedical polymers as function of medical application (exercises)</li> </ul> <p><u>LiveMAT: Engineered Living Materials for Biomedicine</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Materials and technologies for cell encapsulation</li> <li>▪ Programming functions in living cells by synthetic biology</li> <li>▪ Synergistic materials-cell communication</li> <li>▪ Properties, medical application scenarios and examples of engineered living materials</li> </ul> <p><u>Biomaterials Practical Course</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Hydrogel synthesis</li> <li>▪ Biomaterial property characterization</li> <li>▪ Biofabrication</li> </ul>
Inhalt(e)	<p><u>Biomed: Biomedical materials with exercises</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Fundamentals and classes of biomaterials. Introduction to biomedical polymers</li> <li>▪ Non degradable synthetic polymers for medical application (Polyolefins, silicones, fluorinated polymers, acrylates)</li> <li>▪ Degradable synthetic polymers for medical applications (polyesters, polyurethanes)</li> <li>▪ Synthetic hydrogels (PEG, PVA, PHEMA, silicone hydro-</li> </ul>

	<p>gels)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Natural polymers for medical applications (alginates, gelatine, chitosan)</li> <li>▪ Hydrogels, microgels, interpenetrated networks</li> <li>▪ Medical fibers and textiles</li> <li>▪ Protein adsorption on biomaterials. Biofouling. Non-biofouling materials</li> <li>▪ Host-material interactions, biocompatibility, immunogenicity, thrombogenicity</li> <li>▪ Exercises: Design criteria for polymers for biomedical applications and case studies</li> <li>▪ Exercises: Presentation of biomedical devices containing biomedical polymers. Properties, design and alternative materials.</li> </ul> <p><u>LiveMAT</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Living tissues and biofilms. Composition and structure. Cell-matrix interactions</li> <li>▪ Artificial extracellular matrices. Biomaterials for tissue engineering and regenerative medicine</li> <li>▪ Technologies for cell encapsulation in biomaterials</li> <li>▪ Programming material's functions in cells (I)</li> <li>▪ Programming material's functions in cells (II)</li> <li>▪ Analytical methods to assess functionality and interactions of materials and living components</li> <li>▪ Engineered living materials for health monitoring and cell-based biosensing</li> <li>▪ Engineered Living Therapeutic Materials</li> <li>▪ Biosafety and biocontainment aspects in living therapeutics</li> </ul> <p><u>Biomaterials Practical Course</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Hydrogel synthesis (synthetic and natural hydrogels)</li> <li>▪ Biomaterial property characterization (swelling, molecular diffusion, mechanical properties transparency, degradation, protein adsorption)</li> <li>▪ Identification structure-property relationships</li> <li>▪ Self-grown living materials</li> <li>▪ 2D and 3D Biofabrication technologies (3D printing, electrospinning, microfluidics)</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch</p> <p>Literaturhinweise: werden zu Beginn der Veranstaltung bekannt gegeben</p>

Modul					Abkürzung
NanoBioMaterials					MCV
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	4	6

Modulverantwortliche*r	Tobias Kraus			
Dozierende	Lola González-García, Tobias Kraus (NBM-1) Annette Kraegeloh, Wilfried Weber (NBM-2) jeweils mit KollegInnen des INM			
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine			
Modulelemente <i>Lehr- und Lernformen, ggf. erwartete TN-Zahl</i>	Lehr- und Lernform <i>Vorlesung, Übung, ...</i>	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	NanoBioMaterialien 1	2	3
	Vorlesung	NanoBioMaterialien 2	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	benotete Abschlussprüfung (Einzelklausur)			
Workload	<u>NBM-1</u>			
	Präsenzzeit Vorlesung			30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			60 h
	Summe (3 CP)			90 h
	<u>NBM-2</u>			
	Präsenzzeit Vorlesung			30 h
	Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung			60 h
	Summe (5 CP)			90 h
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Gewichteter Mittelwert der Einzelnoten gemäß § 14 (4) der gemeinsamen Prüfungsordnung der Fakultät NT			
Lernziele/Kompetenzen	Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen			

	<p><u>NanoBioMaterialien 1:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Skaleneffekte in Materialien: Moleküle, Nanostrukturen, Mikrostrukturen, Materialeigenschaften</li> <li>• Herstellung von Nanostrukturen</li> <li>• Oberflächen-Volumen-Verhältnisse</li> <li>• Kräfte auf der Nanometer-Skala</li> <li>• Elektromagnetische Eigenschaften von Nanostrukturen</li> <li>• Nanokomposite und ihre mechanischen und optischen Eigenschaften</li> </ul> <p><u>NanoBioMaterialien 2:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Kenntnisse der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen biologischer Materialien</li> <li>• Prinzipien der Biomineralisation und biogene Materialien</li> <li>• Grundkenntnisse der Struktur und Funktion biologischer Zellen und Gewebe</li> <li>• Eigenschaften von Nanomaterialien mit biomedizinischem Anwendungspotenzial</li> <li>• Prinzipien und Anwendungsbeispiele lebender Materialien</li> <li>• Überblick über Sicherheitsaspekte von Materialien</li> <li>• Kenntnisse ausgewählter Methoden zur Charakterisierung von Materialien im biologischen Kontext</li> </ul>
<p>Inhalt(e)</p>	<p><u>NanoBioMaterialien 1:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Einführung in Nanomaterialien</li> <li>• Synthese und Struktur von Nanopartikeln</li> <li>• Nanomechanik und DNA-Origami</li> <li>• Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnisse</li> <li>• Moleküle auf Nanopartikeln</li> <li>• Dünnschichten und Mikrofabrikation</li> <li>• Nano- und Biotribologie</li> <li>• Kohlenstoff-Nanostrukturen</li> <li>• Elektromechanische Eigenschaften von Nanostrukturen und Kompositen</li> <li>• Nanokomposite für Festigkeit und Schutz</li> <li>• Transporteigenschaften und Perkolation</li> </ul> <p><u>NanoBioMaterialien 2:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Struktur und Funktion biologischer Materialien</li> <li>• Zell- und Gewebefunktionen</li> <li>• chemische und mikroskopische Analytik zur Darstellung von Materialien im biologischen Kontext</li> <li>• biogene Materialien</li> <li>• biomedizinische Anwendungen von (Nano)Materialien</li> <li>• Lebende Materialien</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"><li>• Materialsicherheit</li></ul>
Weitere Informationen	Unterrichtssprache: Englisch
<i>Verwendbarkeit des Moduls</i>	Literaturhinweise: NBM-2: Vorlesungsfolien (ppt) und Skript zum Download verfügbar
<i>Unterrichtssprache</i>	Literaturempfehlungen: Molecular Biology of the Cell, Alberts weitere Empfehlungen (z.B. Übersichtsartikel) werden im Rahmen der Vorlesung gegeben
<i>Ggf. Literatur</i>	

Modul					6Abkürzung
Theoretische Chemie					TCI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	14	Mind. 6

Modulverantwortliche*r	Stopkowicz				
Dozierende	Stopkowicz, Munz, Hub				
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflichtmodul				
Zulassungsvoraussetzungen	Keine				
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP	
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>				
	A Vorlesung mit Übung	Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen	2-4	3-6	
	B Vorlesung mit Übung	TC1 Grundlagen der Quantenchemie	2	3	
	C Praktikum	TC1 Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie	4	6	
	D Vorlesung mit Übung	TC2 Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie	2	3	
E Vorlesung mit Übung bzw. Übungsanteilen	Modellierung von Moleküleigenschaften	2	3		
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	<p>Benotete Fachprüfung nach den Lehrveranstaltungen</p> <p><u>A: Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen:</u> Mündliche Prüfung mit möglichem Schwerpunkt auf Quantenchemie (Stopkowicz) oder Molekulardynamik (Hub)</p> <p><u>B: TC1 Grundlagen der Quantenchemie:</u> Mündliche Prüfung</p> <p><u>C: TC1 Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie:</u> Benotetes Protokoll</p> <p><u>D: TC2 Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie:</u> Mündliche Prüfung</p> <p><u>E: Modellierung von Moleküleigenschaften:</u> Projektarbeit und Vor-</p>				

	trag								
Workload	<p><u>A: Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen:</u>          Präsenzzeit Vorlesung 15/60 h          Präsenzzeit Übung/Practical 15/30 h          Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 60/120 h          Summe (3 oder 6 CP) 90/180 h</p> <p><u>B: TC1 Vorlesung Grundlagen der Quantenchemie:</u>          Präsenzzeit Vorlesung + Übung 30h          Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 60 h          Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>C: TC1 Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie</u>          Präsenzzeit Praktikum 60h          Vor- und Nachbereitung, Protokoll 30 h          Summe (3 CP) 90 h</p> <p><u>D: TC2 Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie:</u>          Präsenzzeit Vorlesung 30 h          Präsenzzeit Übung 30 h          Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung 120 h          Summe (6 CP) 180 h</p> <p><u>E: Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <table> <tr> <td>Präsenzzeit Vorlesung/Übung</td> <td>40 h</td> </tr> <tr> <td>Vor- und Nachbereitung</td> <td>15 h</td> </tr> <tr> <td>Projektarbeit</td> <td>35 h</td> </tr> <tr> <td>Summe (3 CP)</td> <td>90 h</td> </tr> </table>	Präsenzzeit Vorlesung/Übung	40 h	Vor- und Nachbereitung	15 h	Projektarbeit	35 h	Summe (3 CP)	90 h
Präsenzzeit Vorlesung/Übung	40 h								
Vor- und Nachbereitung	15 h								
Projektarbeit	35 h								
Summe (3 CP)	90 h								
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Arithmetisches Mittel der benoteten Abschlussprüfungen								
Lernziele/Kompetenzen	Die Studierenden erlernen sowohl den praktischen Umgang mit computerchemischen Programmpaketen, die experimentelle Arbeiten unterstützen bzw. theoretische Vorhersagen liefern als auch eine vertiefte Kenntnis der zugrundeliegenden computerchemischen Methoden. Sie können theoretische Berechnungen durchführen als auch die Güte und Sinnhaftigkeit eigener sowie publizierter theoretischer Vorhersagen bewerten. Sie können die Grundzüge der ver-								

	wendeten Methoden erklären und sich selbstständig in Themen der Theoretischen Chemie einarbeiten. Bei Belegung der Veranstaltung Grundlagen der Quantenchemie (Programmierpraktikum) erwerben sie zusätzlich konkrete Programmierkenntnisse in der Umsetzung quantenchemischer Methoden.
Inhalt(e)	<p><u>A: Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen</u></p> <p><i>Vorlesungsteil 1 (Quantenchemische Methoden)</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantenmechanische Beschreibung von Molekülen, Schrödinger-Gleichung, Born-Oppenheimer-Näherung</li> <li>• Näherungen für die Wellenfunktion, Hartree-Fock-Theorie, Dichtefunktionaltheorie, LCAO-Ansatz, Roothaan-Hall-Gleichungen</li> <li>• Wellenfunktionsbasierte Beschreibung der Elektronenkorrelation, Configuration-Interaction-Methoden, Møller-Plesset-Störungstheorie, Coupled-Cluster-Theorie</li> <li>• Beschreibung statischer Elektronenkorrelation: multiconfigurational SCF bzw complete active space (CAS-SCF) Methoden</li> <li>• QM/MM-Methoden</li> </ul> <p><i>Vorlesungsteil 2 (Molekularmechanische Methoden)</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Struktur, Funktion und intramolekulare Wechselwirkungen von biologischen Makromolekülen</li> <li>• Molekulardynamik-Simulationen: physikalische Grundlagen und Algorithmen</li> <li>• Bestimmung von Proteinstrukturen, Struktur-Refinement gegen experimentelle Daten</li> <li>• Elektrostatik in Proteinen, Poisson-Boltzmann-Theorie, Lösemittel- und Protonierungseffekte</li> <li>• Kollektive Dynamik: Normalmoden und Hauptkomponentenanalyse</li> <li>• Berechnung freier Energien</li> </ul> <p><i>Übungen</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Übungen zu den o.g. Themen</li> <li>• Computerpraktika zur Anwendung quantenchemischer und molekularmechanischer Methoden</li> </ul> <p><u>B: TC1 Grundlagen der Quantenchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Molekülorbitale und Mehrelektronenwellenfunktion</li> <li>• Hartree-Fock Theorie (Ansatz, konkrete Herleitung der entsprechenden Gleichungen)</li> <li>• Self-Consistent-Field Verfahren zur Lösung der HF Gleichungen</li> <li>• Basissatzdarstellung und Roothaan-Hall-Gleichungen</li> <li>• Implementierung von HF-SCF und Durchführung entspre-</li> </ul>

	<p>chender Berechnungen</p> <p><i>Übungen</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Übungen zu den o.g. Themen</li> </ul> <p><u>C: TC1 Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlagen des Programmierens</li> <li>• Planung und Konzeption eines Computerprogramms</li> <li>• Umsetzung quantenchemischer Methoden in einem Computerprogramm</li> </ul> <p><u>D: TC2 Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Fortgeschrittene quantenchemische Methoden</li> <li>• Theoretische Beschreibung von Vielteilchensystemen</li> <li>• Fortgeschrittene Techniken der Theoretischen Chemie: Zweite Quantisierung</li> <li>• Quantitative Beschreibung von Elektronenkorrelation</li> </ul> <p><i>Übungen</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Übungen zu den o.g. Themen</li> </ul> <p><u>E: Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Visualisierung/Plotten berechneter Spektren/Orbitale</li> <li>▪ Modellierung von UV-Vis Spektren (TD-DFT, EOM-CCSD, saCASSCF)</li> <li>▪ Modellierung von Emissionsspektren und vibronischen Effekten</li> <li>▪ Modellierung der Eigenschaften von Verbindungen mit schweren Elementen</li> <li>▪ Modellierung von XRay-Spektren und Magnetismus</li> <li>▪ Modellierung und Konstruktion fortgeschrittener MO-Diagrammen</li> <li>▪ Modellierung von EPR und NMR-Spektren. Modellierung paramagnetischer NMR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung von Conceptual-DFT zur Modellierung elektrochemischer Eigenschaften</li> <li>▪ Anwendung von Energy Decomposition Analysis und QTAIM zum Verständnis chemischer Eigenschaften</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch; nach Absprache Deutsch</p> <p>Verwendbarkeit:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Die Vorlesung Einführung in die Quantenchemie kann nicht in diesem Modul eingebracht werden, wenn in PC V das Thema Molecular Modelling gewählt wurde</li> </ul>

- Die Veranstaltung Einführung in Theoretische Chemie und Molekulare Simulationen kann nicht sowohl im Bachelor- als auch im Masterstudium belegt werden
- Die Vorlesung Modellierung von Moleküleigenschaften kann entweder in diesem oder im Theoretische Anorganische Chemie (TCAC) Modul eingebracht werden.
- Das Programmierpraktikum Grundlagen der Quantenchemie soll zusammen mit der zugehörigen Vorlesung absolviert werden

Literatur:

A: C. J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry, F. Jensen: Introduction to Computational Chemistry

B&C: Szabo, N. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover, 1996

D: Skripte zu den Vorlesungen

E: Übersichtsartikel, E. I. Solomon, R. A. Scott, R. B. King: Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry, Wiley-VCH 2009.

Modul					Abkürzung
Theoretische Anorganische Chemie					TCII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	6	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Munz			
Dozierende	Dozenten der Anorganischen und Theoretischen Chemie			
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	<i>Vorlesung, Übung, ...</i>			
	Vorlesung	Einführung in die Computerchemie	2	3
	Vorlesung	Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie	2	3
Leistungskontrollen	Benotete Fachprüfung nach den Lehrveranstaltungen			
	<i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>			
	<u>Einführung in die Computerchemie:</u> Mündliche Prüfung oder ggf. in Absprache Projektarbeit und Vortrag			
	<u>Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie:</u> Prüfung			
Workload	<u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u> Projektarbeit und Vortrag			
	<u>Einführung in die Computerchemie:</u>			
	Präsenzzeit Vorlesung/Übung			30 h
	Vor- und Nachbereitung			15 h
	Projektarbeit			45 h
	Summe (3 CP)			90 h
	<u>Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie:</u>			
Präsenzzeit Vorlesung/Übung			30 h	
Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung			60 h	
Summe (3 CP)			90 h	

	<p><u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <p>Präsenzzeit Vorlesung/Übung 40 h</p> <p>Vor- und Nachbereitung 15 h</p> <p>Projektarbeit 35 h</p> <p>Summe (3 CP) 90 h</p>
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Arithmetisches Mittel der benoteten Abschlussprüfungen
Lernziele/Kompetenzen	<p>Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen</p> <p><u>Einführung in die Computerchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Grundlegendes Verständnis computerchemischer Methoden</li> <li>▪ Bedienung eines modernen quantenchemischen Programmes für grundlegende Anwendungen und Moleküloptimierungen sowie der Berechnung von Reaktionsmechanismen</li> <li>▪ Anwendung von Symmetrie, IR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung und Verständnis der Grenzorbitaltheorie</li> <li>▪ Grundlegendes Verständnis der Chemischen Bindung</li> </ul> <p><u>Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Verwendung von Charaktertafeln zur Ermittlung von Termsymbolen</li> <li>▪ Erstellung reduzibler und irreduzibler Darstellungen</li> <li>▪ Konstruktion entarteter Molekülorbitale mittels Reduktions- und Projektionsoperator</li> <li>▪ Verwendung von Fragmentorbitalen</li> <li>▪ Qualitative Erstellung von MO-Diagrammen polyatomiger Moleküle</li> </ul> <p><u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Visualisierung/Plotten berechneter Spektren/Orbitale</li> <li>▪ Modellierung von UV-Vis Spektren (TD-DFT, EOM-CCSD, saCASSCF)</li> <li>▪ Modellierung von Emissionsspektren und vibronischen Effekten</li> <li>▪ Modellierung der Eigenschaften von Verbindungen mit schweren Elementen</li> <li>▪ Modellierung von XRay-Spektren und Magnetismus</li> <li>▪ Modellierung und Konstruktion fortgeschrittener MO-Diagrammen</li> <li>▪ Modellierung von EPR und NMR-Spektren. Modellierung paramagnetischer NMR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung von Conceptual-DFT zur Modellierung elektrochemischer Eigenschaften</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Anwendung von Energy Decomposition Analysis und QTAIM zum Verständnis chemischer Eigenschaften</li> </ul>
Inhalt(e)	<p><u>Einführung in die Anorganische Computerchemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Konzepte der Chemischen Bindung</li> <li>▪ Grundlagen der Elektronen-Struktur-Rechnungen</li> <li>▪ Quantenchemische Modellierung von Molekülen</li> <li>▪ Übergangszustandssuche und Reaktionsmechanismen</li> <li>▪ Symmetrie und IR-Spektroskopie</li> <li>▪ Einführung in die Dichtefunktionaltheorie</li> <li>▪ Gängige quantenchemische Methoden</li> </ul> <p><u>Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Wiederholung von Punktsymmetrie und Gruppentheorie</li> <li>▪ Einführung in qualitative Methoden zur Konstruktion von MO-Diagrammen</li> <li>▪ Reduktion von Darstellung unter Verwendung von Charaktertafeln</li> <li>▪ Projektion entarteter Molekülorbitale unter Verwendung des Projektionsoperators</li> <li>▪ Ausführliche praktische Übungen zu allen behandelten Aspekten</li> </ul> <p><u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Visualisierung/Plotten berechneter Spektren/Orbitale</li> <li>▪ Modellierung von UV-Vis Spektren (TD-DFT, EOM-CCSD, saCASSCF)</li> <li>▪ Modellierung von Emissionsspektren und vibronischen Effekten</li> <li>▪ Modellierung der Eigenschaften von Verbindungen mit schweren Elementen</li> <li>▪ Modellierung von XRay-Spektren und Magnetismus</li> <li>▪ Modellierung und Konstruktion fortgeschrittener MO-Diagramme</li> <li>▪ Modellierung von EPR und NMR-Spektren. Modellierung paramagnetischer NMR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung von Conceptual-DFT zur Modellierung elektrochemischer Eigenschaften</li> <li>▪ Anwendung von Energy Decomposition Analysis, Populationsanalyse und QTAIM zum Verständnis chemischer Eigenschaften</li> </ul>
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i>	Unterrichtssprache: Englisch; nach Absprache Deutsch Verwendbarkeit:

Unterrichtssprache

Ggf. Literatur

- Die Vorlesung Modellierung von Moleküleigenschaften kann entweder in diesem oder im Theoretischen Chemie Modul (TC) eingebracht werden.

Literatur Einführung in die Anorganische Computerchemie:

F Jensen "Introduction to Computational Chemistry 3 rd Edition, Wiley, Weinheim 2017.

C. J. Cramer Essentials of Computational Chemistry, 2nd Ed., Wiley-VCH 2006.

Literatur (Anwendung der MO-Theorie in der Anorganischen Chemie): K. C. Molloy, Group Theory for Chemists, 2<sup>nd</sup> Edition, Woodhead Publishing

Literatur (Modellierung von Moleküleigenschaften):

Übersichtsartikel

Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry, E. I. Solomon, R. A. Scott, R. B. King, Wiley-VCH 2009.

Modul					Abkürzung
Electronic Spectroscopy					PCVI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	jährlich	2 Sem.	10	Min. 6

Modulverantwortliche*r	Jung			
Dozierende	Jung, Kay, Munz			
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflichtmodul			
Zulassungsvoraussetzungen	Keine			
Modulelemente	Lehr- und Lernform	Bezeichnung	SWS	CP
	Vorlesung	Advanced Applications of EPR-Spectroscopy	2	3
	Vorlesung	Fluorescence Spectroscopy	2	3
	Vorlesung	Inorganic Synthesis and Spectroscopy	2	3
	Vorlesung	Light	2	3
	Vorlesung	Photochemistry	2	3
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Benotete Fachprüfung nach den Lehrveranstaltungen <u>EPR Spectroscopy</u> : mündliche Prüfung <u>Fluoreszenzspektroskopie</u> : mündliche Prüfung <u>Modellierung von Moleküleigenschaften</u> : Projektarbeit <u>Photochemie</u> : mündliche Prüfung <u>Light</u> : Protokoll			
Workload	<u>Advanced Applications of EPR-Spectroscopy</u> : Präsenzzeit Vorlesung 30 h Vor- und Nachbereitung, Klausurvorbereitung 30 h Projektarbeit 30 h Summe (3 CP) 90 h <u>Fluoreszenzspektroskopie (im Wechsel m. Photochemie)</u> : Präsenzzeit Vorlesung 30 h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 60 h Summe (3 CP) 90 h <u>Modellierung von Moleküleigenschaften</u> :			

	Präsenzzeit Vorlesung/Übung 30 h Projektarbeit 60 h Summe (3 CP) 90 h <u>Light:</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Projektarbeit 30 h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 30 h Summe (3 CP) 90 h <u>Photochemie (im Wechsel m. Fluoreszenzspektroskopie):</u> Präsenzzeit Vorlesung 30 h Nachbereitung und Vorbereitung der Prüfung 60 h Summe (3 CP) 90 h
Zusammensetzung der Modulnote (vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)	Arithmetisches Mittel der benoteten Abschlussprüfungen
Lernziele/Kompetenzen	Nach Abschluss dieses Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kompetenzen <u>EPR Spectroscopy:</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Analyse von organischen, chromophoren Strukturen im Bezug auf ihre magnetooptischen Eigenschaften</li> <li>▪ Verständnis des theoretischen Hintergrunds der Spektren von photoangeregten Triplet-Zuständen von Chromophoren</li> <li>▪ Verständnis der Photophysik von Stickstoff-Vakanzzentren in Diamant und deren Verwendung in Masern</li> </ul> <u>Fluoreszenzspektroskopie:</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Analyse von organischen, chromophoren Strukturen im Bezug auf ihre optischen Eigenschaften</li> <li>▪ Durchführung der Fluoreszenzspektroskopie und Fehlerquellen</li> <li>▪ Auswirkung optischer Eigenschaften auf Anwendungen in den Material- und Lebenswissenschaften</li> </ul> <u>Photochemie:</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Analyse von Molekülen und Materialien im Bezug auf ihre photochemischen Eigenschaften</li> <li>▪ Kenntnisse über die Durchführung experimenteller Photochemie</li> <li>▪ Chancen von „Licht als Reagenz“ im Hinblick auf Nachhaltigkeit und ungewöhnliche Synthesen</li> </ul> <u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Visualisierung/Plotten berechneter Spektren/Orbitale</li> <li>▪ Modellierung von UV-Vis Spektren (TD-DFT, EOM-CCSD, saCASSCF)</li> <li>▪ Modellierung von Emissionsspektren und vibronischen Effekten</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Modellierung der Eigenschaften von Verbindungen mit schweren Elementen</li> <li>▪ Modellierung von XRay-Spektren und Magnetismus</li> <li>▪ Modellierung und Konstruktion fortgeschrittener MO-Diagrammen</li> <li>▪ Modellierung von EPR und NMR-Spektren. Modellierung paramagnetischer NMR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung von Conceptual-DFT zur Modellierung elektrochemischer Eigenschaften</li> <li>▪ Anwendung von Energy Decomposition Analysis und QTAIM zum Verständnis chemischer Eigenschaften</li> </ul> <p><u>Light:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Ableitung des Planck'schen Gesetzes über die Strahlung schwarzer Körper aus ersten Prinzipien.</li> <li>▪ Herleitung des Stefan-Boltzmann-Gesetzes und des Weinschen Verschiebungsgesetzes</li> <li>▪ Ermittlung der Temperatur eines Objekts aus seinem elektromagnetischen Spektrum, von gewöhnlichen Objekten bis hin zu Sternen und der kosmischen Hintergrundstrahlung, durch Schreiben eines eigenen Computercodes in Matlab oder Python</li> </ul>
Inhalt(e)	<p><u>EPR Spectroscopy:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Photophysics of porphyrins and their derivatives</li> <li>▪ Analysis of EPR spectra of triplet states</li> <li>▪ Photophysics of NV- centers in Diamond</li> <li>▪ Technical aspects of dielectric resonators</li> <li>▪ Technical aspects of MASERs</li> </ul> <p><u>Fluoreszenzspektroskopie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Farben und einfache MO-Modelle von Farbstoffen</li> <li>▪ Form und Intensitäten von spektroskopischen Banden</li> <li>▪ Experimentelle Fluoreszenzspektroskopie</li> <li>▪ Interne Konversion &amp; Interkombinationsübergänge</li> <li>▪ Umgebungseinflüsse und Lösungsmittelleffekte</li> <li>▪ Adiabatische Photochemie &amp; Fluoreszenzlöschung</li> <li>▪ Vektorieller Charakter des Übergangsdipolmomentes: Fluoreszenzanisotropie, Energietransfer und Exzitonen</li> <li>▪ Anwendungen: Indikatoren &amp; Substrate</li> </ul> <p><u>Photochemie:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Potentialhyperflächen</li> <li>▪ Moderne experimentelle Methoden</li> <li>▪ Chemie and Photophysik des Triplettzustandes</li> <li>▪ Umlagungen und Isomerisierung von <math>\pi</math>-Bindungen</li> <li>▪ Ladungstransferreaktionen and Marcus-Theorie</li> <li>▪ Anorganische Photochemie</li> <li>▪ Chemilumineszenz</li> <li>▪ Singulett-Sauerstoff</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Photoelektrochemie and Solarzellen</li> </ul> <p><u>Modellierung von Moleküleigenschaften:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Visualisierung/Plotten berechneter Spektren/Orbitale</li> <li>▪ Modellierung von UV-Vis Spektren (TD-DFT, EOM-CCSD, saCASSCF)</li> <li>▪ Modellierung von Emissionsspektren und vibronischen Effekten</li> <li>▪ Modellierung der Eigenschaften von Verbindungen mit schweren Elementen</li> <li>▪ Modellierung von XRay-Spektren und Magnetismus</li> <li>▪ Modellierung und Konstruktion fortgeschrittener MO-Diagramme</li> <li>▪ Modellierung von EPR und NMR-Spektren. Modellierung paramagnetischer NMR-Spektren</li> <li>▪ Anwendung von Conceptual-DFT zur Modellierung elektrochemischer Eigenschaften</li> <li>▪ Anwendung von Energy Decomposition Analysis, Populationsanalyse und QAIM zum Verständnis chemischer Eigenschaften</li> </ul> <p><u>Licht:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Konzept der Schwarzkörperstrahlung</li> <li>▪ Versagen der klassischen Physik</li> <li>▪ Rayleigh-Jeans Gesetz und UV-Katastrophe</li> <li>▪ Planck'sches Strahlungsgesetz</li> <li>▪ Zusammenhänge zwischen der Temperatur eines Objektes und seiner abgestrahlten Energie</li> <li>▪ Wiensches Verschiebungsgesetz</li> <li>▪ Stefan-Boltzmann-Gesetz</li> <li>▪ kosmische Mikrowellenhintergrundstrahlung</li> <li>▪ Konzept des Raumwinkels und seine Bedeutung in der Astronomie</li> </ul>
<p>Weitere Informationen</p> <p><i>Verwendbarkeit des Moduls</i></p> <p><i>Unterrichtssprache</i></p> <p><i>Ggf. Literatur</i></p>	<p>Unterrichtssprache: Englisch; nach Absprache Deutsch</p> <p>Literaturhinweise:</p> <p>Literaturempfehlungen <u>EPR Spectroscopy</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Chechik, Carter, Murphy, Electron Paramagnetic Resonance, Oxford</li> <li>• Roessler and Salvadori, Chem. Soc. Rev., 2018, 47, 2534</li> <li>• Zollitsch et al. Maser threshold characterization by resonator Q-factor tuning. Commun Phys 6, 295 (2023). <a href="https://doi.org/10.1038/s42005-023-01418-3">https://doi.org/10.1038/s42005-023-01418-3</a></li> </ul> <p>Literaturempfehlungen <u>Fluoreszenzspektroskopie</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ W. Parson, Modern Optical Spectroscopy, Springer, Berlin Heidelberg 2015</li> </ul>

- J. R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, 3rd Ed., 2006, Springer
- P.J. Walla: *Modern Biophysical Chemistry*, 2nd Ed. 2014, Wiley-VCh, Weinheim

Literatureempfehlungen Photochemie:

- N. Turro, V. Ramamurthy, J. Scaiano, *Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules* (3<sup>rd</sup> ed.), Univ. Science Books **2010**.
- P. Klán, J. Wirz; *Photochemistry of Organic Compounds*, Wiley **2009**.
- G. von Büнау, T. Wolff, *Photochemie*, Verlag Chemie (VCH), Weinheim **1987**.
- V. Balzani, P. Ceroni, A. Juris, *Photochemistry and Photophysics*, Wiley-VCH **2014**

Literatureempfehlungen Modellierung von Moleküleigenschaften:

- *Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, E. I. Solomon, R. A. Scott, R. B. King, Wiley-VCH **2009**.
- C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry*, 2<sup>nd</sup> Ed., Wiley-VCH **2006**.
- B. O. Roos et al., *Multiconfigurational Quantum Chemistry*, Wiley-VCH, **2016**.

Modul					Abkürzung
Naturwissenschaften I					NaWil
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	WS + SS	1-3 Sem.	4V	6

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender
Dozierende	Dozenten des Masterstudiengangs Chemie
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtbereich
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Je nach gewählten Veranstaltungen
Workload	Je nach gewählten Veranstaltungen Summe: 180 h (6 CP)
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Nach CP gewichteter Mittelwert der Teilprüfungen
Lernziele/Kompetenzen	Siehe betreffende Modulbeschreibungen der gewählten Veranstaltungen.
Inhalt(e)	Im Rahmen des Moduls Naturwissenschaften I können beliebige benotete Veranstaltungen des Wahlpflichtbereichs des Masterstudiengangs Chemie im Umfang von 6 CP kombiniert werden.
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch, Englisch  Literaturhinweise: siehe betreffende Modulbeschreibungen der gewählten Veranstaltungen.

Modul					Abkürzung
Naturwissenschaften II					NaWill
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	WS + SS	1-3 Sem.	4V	6

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender
Dozierende	Dozenten aus den naturwissenschaftlich-technischen Fächern
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtbereich
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Je nach gewählten Veranstaltungen
Workload	Je nach gewählten Veranstaltungen Summe: 180 h (6 CP)
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Unbenotet
Lernziele/Kompetenzen	Siehe betreffende Modulbeschreibungen der gewählten Veranstaltungen.
Inhalt(e)	Im Rahmen des Moduls Naturwissenschaften II können beliebige Veranstaltungen des aus den naturwissenschaftlich-technischen Fächern im Umfang von 6 CP kombiniert werden, z.B. auch <ul style="list-style-type: none"> <li>- Industriepraktikum mit Bericht</li> <li>- Auslandspraktikum mit Bericht</li> <li>- Besuch von 15 wissenschaftlichen Vorträgen in der Chemie mit Kurzprotokoll</li> </ul>
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch, Englisch Literaturhinweise: siehe betreffende Modulbeschreibungen der gewählten Veranstaltungen.

Modul					Abkürzung
Vertiefungspraktikum I					VPI
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	WS + SS	1 Sem.	8	6

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender
Dozierende	Dozenten der Fachrichtung Chemie
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtbereich
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Praktikumsprotokolle
Workload	Praktikum zu 3 Wochen à 40 h                      120h (alternativ 6 Wochen halbtags) Nachbereitung    60 h Summe:    180 h (6 CP)
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Unbenotet
Lernziele/Kompetenzen	In 3 Vertiefungspraktika (VPI-III) können die Studenten in Forschungsprojekten in 3 Arbeitsgruppen der Fachrichtung Chemie mitarbeiten und so ihre theoretischen Kenntnisse durch Mitarbeit an der aktuellen Forschung vertiefen.
Inhalt(e)	Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt in drei aus folgenden Arbeitskreisen: Andrada, Del Campo, Gallei, Gulner, Jauch, Jung, Kautenburger, Kay, Kazmaier, Kickelbick, Kraus, Munz, Scheschkewitz, Speicher, Stopkowicz, Titz (3 Wochen ganztags oder 6 Wochen halbtags).
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>UnterrichtsspracheGgf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch Literaturhinweise: durch den anleitenden Dozenten

Modul					Abkürzung
Vertiefungspraktikum II					VPII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	WS + SS	1 Sem.	8	6

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender
Dozierende	Dozenten der Fachrichtung Chemie
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtbereich
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Praktikumsprotokolle
Workload	Praktikum zu 3 Wochen à 40 h                      120h (alternativ 6 Wochen halbtags) Nachbereitung    60 h Summe:    180 h (6 CP)
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Unbenotet
Lernziele/Kompetenzen	In 3 Vertiefungspraktika (VPI-III) können die Studenten in Forschungsprojekten in 3 Arbeitsgruppen der Fachrichtung Chemie mitarbeiten und so ihre theoretischen Kenntnisse durch Mitarbeit an der aktuellen Forschung vertiefen.
Inhalt(e)	Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt in drei aus folgenden Arbeitskreisen: Andrada, Del Campo, Gallei, Gulner, Jauch, Jung, Kautenburger, Kay, Kazmaier, Kickelbick, Kraus, Munz, Scheschkewitz, Speicher, Stopkowicz, Titz (3 Wochen ganztags oder 6 Wochen halbtags).
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch Literaturhinweise: durch den anleitenden Dozenten

Modul					Abkürzung
Vertiefungspraktikum III					VPIII
Studiensemester	Regelstudiensemester	Turnus	Dauer	SWS	CP
1-3	1-3	WS + SS	1 Sem.	8	6

Modulverantwortliche*r	Prüfungsausschussvorsitzender
Dozierende	Dozenten der Fachrichtung Chemie
Zuordnung zum Curriculum <i>Pflichtmodul, Wahlmodul, etc.</i>	Wahlpflichtbereich
Zulassungsvoraussetzungen <i>Voraussetzung(en) für die Teilnahme (an Prüfungen)</i>	Keine
Leistungskontrollen <i>Leistungspunkte und Noten Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten</i>	Praktikumsprotokolle
Workload	Praktikum zu 3 Wochen à 40 h                      120h (alternativ 6 Wochen halbtags) Nachbereitung    60 h Summe:    180 h (6 CP)
Zusammensetzung der Modulnote <i>(vgl. Paragraph 14 der Prüfungsordnung)</i>	Unbenotet
Lernziele/Kompetenzen	In 3 Vertiefungspraktika (VPI-III) können die Studenten in Forschungsprojekten in 3 Arbeitsgruppen der Fachrichtung Chemie mitarbeiten und so ihre theoretischen Kenntnisse durch Mitarbeit an der aktuellen Forschung vertiefen.
Inhalt(e)	Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt in drei aus folgenden Arbeitskreisen: Andrada, Del Campo, Gallei, Gulner, Jauch, Jung, Kautenburger, Kay, Kazmaier, Kickelbick, Kraus, Munz, Scheschkewitz, Speicher, Stopkowicz, Titz (3 Wochen ganztags oder 6 Wochen halbtags).
Weitere Informationen <i>Verwendbarkeit des Moduls</i> <i>Unterrichtssprache</i> <i>Ggf. Literatur</i>	Unterrichtssprache: Deutsch oder Englisch Literaturhinweise: durch den anleitenden Dozenten