

Modulhandbuch
für den
Bachelorstudiengang Chemie
(B. Sc.)
PO 2012

(Stand: 03.04.2024)

Inhaltsverzeichnis

Studienverlaufsplan Bachelor	1
Mit Start im Wintersemester	1
Mit Start im Sommersemester	3
Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie	5
Pflichtmodule	5
Einführung in die Allgemeine und Anorganische Chemie (C1)	5
Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie (C1-P)	7
Chemie der Elemente (C2)	8
Praktikum zur Chemie der Elemente (C2-P).....	9
Elementorganische und Bioanorganische Chemie (EOC).....	10
Analytische Methoden in der Chemie: Bestimmungsanalytik (ANA).....	12
Qualifizierungsmodule (QM).....	14
Moderne Anorganische Chemie (MAC).....	14
Kristallstrukturbestimmung (Krist).....	16
Anorganische Photoaktive Materialien I - Grundlagen (PhotMat I)	18
Module des Instituts für Biochemie	20
Pflichtmodul	20
Grundlagen der Biochemie (GBC)	20
Qualifizierungsmodul	22
Biochemie des Stoffwechsels (QM-BC)	22
Module des Instituts für Bioorganische Chemie	24
Qualifizierungsmodul	24
Qualifizierungsmodul Bioorganische Chemie (QualiBioOC).....	24
Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie	26
Pflichtmodule	26
Prinzipien der Makromolekularen Chemie (PMC)	26
Prinzipien der Organischen Chemie (POC)	28
Einführung in synthetische und analytische Methoden (SAM).....	30
Vertiefte Organische Chemie (VOC).....	32
Organisch-Chemisches Synthesepraktikum (VOC-P).....	34
Qualifizierungsmodule	35
Angewandte Organische Chemie (AOC).....	35
Module des Instituts für Physikalische Chemie	37
Pflichtmodule	37
Mathematische Methoden in der Chemie I (MMC I).....	37
Mathematische Methoden in der Chemie II (MMC II).....	39
Einführung in die Physikalische Chemie (PCO)	41
Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC).....	43
Praktikum Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC-P)	45

Fortgeschrittene Physikalische Chemie (FPC)	47
Qualifizierungsmodule	49
Experimentelle Methoden in der Physikalischen Chemie (QM-PC)	49
Theorie und Simulation chemischer Reaktionen (TSCR)	51
Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.....	52
Pflichtmodule	52
Einführung in die Quanten- und Computerchemie (QCCC)	52
Qualifizierungsmodule	54
Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)	54
Simulation von Biomolekülen (BioSim)	56
Module der Wissenschaftlichen Einrichtung Physik	58
Pflichtmodule	58
Experimentalphysik (Phys)	58
Experimentalphysik Praktikum (Phys-P).....	60
Weitere Pflichtmodule	61
Pflichtmodul	61
Rechtskunde (ReKu)	61
Modul des freien Wahlbereiches	63
Aktuelle Chemie (Akt-Che)	63
Wirkstoffe im modernen Pflanzenschutz.....	64
Moderne Synthesemethoden	65
Medizinische Chemie	66
Namensreaktionen.....	67
Nachhaltigkeit in der Chemie (SUST).....	68
Bachelormodul.....	70
Bachelormodul	70

Studienverlaufsplan Bachelor

Mit Start im Wintersemester

1. Semester	2. Semester	3. Semester	4. Semester	5. Semester	6. Semester
<u>Allgemeine und Anorganische Chemie C1</u> (8 CP)	<u>Mathematische Methoden II MMCI</u> (5 LP)	<u>Einführung in synthetische und spektroskopische Methoden SAM</u> (6 LP)	<u>Grundlagen der Physikalischen Chemie GPC</u> (10 LP)	<u>Fortgeschrittene Physikalische Chemie FPC</u> (10 LP)	Qualifizierungsmodul QM (8 LP)
<u>Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie C1-P</u> (7 LP)	<u>Chemie der Elemente C2</u> (8 LP)	<u>Praktikum Experimentalphysik Phy-P</u> (3LP)	<u>Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum GPC-P</u> (5 LP)	<u>Einführung in die Quanten- und Computerchemie QCCC</u> (8 LP)	
<u>Mathematische Methoden I MMCI</u> (5 LP)	<u>Praktikum zur Chemie der Elemente C2-P</u> (8 LP)	<u>Vertiefte Organische Chemie VOC</u> (8 LP)	<u>Elementorganische und Bioorganische Chemie EOC</u> (8 LP)	<u>Prinzipien der Makromolekularen Chemie PMC</u> (9 LP)	Bachelorarbeit (12 LP)
<u>Einführung in die Physikalische Chemie PCO</u> (4 LP)	<u>Prinzipien der Organischen Chemie POC</u> (8 LP)	<u>Organisch Chemisches Synthesepraktikum VOC-P</u> (8 LP)	<u>Analytische Methoden ANA</u> (6 LP)		
<u>Experimentalphysik Phys</u> (4 LP)		<u>Grundlagen der Biochemie GBC</u> (8 LP)			
Wahlmodul (<u>Freier Wahlbereich</u> und <i>Studium Universale</i>) (8 LP)					
Rechtskunde ReKu (3 LP)					
Σ: 28 LP 4 Prüfungen	Σ: 29 LP 3 Prüfungen	Σ: 33 LP 2 Prüfungen	Σ: 29 LP 3 Prüfungen	Σ: 27 LP 3 Prüfungen	

Legende:

	Vorlesungsmodulare		Praktikumsmodulare
	Wahlmodulare		Masterarbeit

Modul	Semester	Vorlesung	Übung	Praktikum	Summe Modul	ECTS	benotet	Notengewichtung
		SWS	SWS	SWS	SWS			
Einführung in die Allgemeine + Anorganische Chemie (C1)	1	4	2		6	8	ja	10
Praktikum Allgemeine + Anorganische Chemie (C1-P)	1			5+7	12	7	nein	
Mathematische Methoden in der Chemie I (MMC I)	1	3	1		4	5	ja	5
Einführung in die Physikalische Chemie (PCO)	1	2	1		3	4	ja	4
Experimentalphysik (Phys)	1	3			3	4	ja	8
			Teilsomme			28		27
Mathematische Methoden in der Chemie II (MMC II)	2	3	1		4	5	ja	5
Chemie der Elemente (C2)	2	4	2		6	8	ja	15
Praktikum zur Chemie der Elemente (C2-P)	2			12	12	8	nein	
Prinzipien der Organischen Chemie (POC)	2	4	2		6	8	ja	10
			Teilsomme			29		30
Experimentalphysik Praktikum (Phys-P)	3			4	4	3	nein	
Vertiefte Organische Chemie (VOC)	3	4	2		6	8	ja	15
Organisch-Chemisches Synthesepraktikum (VOC-P)	3			12	12	8	nein	
Grundlagen der Biochemie (GBC)	3	2	1	6	9	8	ja	10
Einführung in synthetische und analytische Methoden (SAM)	3	1	2	4	7	6	nein	
			Teilsomme			33		25
Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC)	4	6	2		8	10	ja	10
Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum (GPC-P)	4			7	7	5	Nein	
Elementorganische Chemie (EOC)	4	2	1	6	9	8	ja	10
Analytische Methoden (ANA)	4	2	2	2	6	6	Ja	10
			Teilsomme			29		30
Fortgeschrittene Physikalische Chemie (FPC)	5	3	1	7	11	10	ja	10
Einführung in die Quanten- und Computerchemie (QCCC)	5	3	1	4	7	8	ja	10
Prinzipien der Makromolekularen Chemie (PMC)	5	2	1	7	10	9	ja	10
			Teilsomme			27		30
Wahlmodul (Freier Wahlbereich + <i>Studium Universale</i>)	1-5					8	nein	
Rechtskunde	2-6	2			2	3	nein	
Qualifizierungsmodul (QM)	6	2	1	6	9	8	ja	8
Bachelor-Modul (Arbeit)	6					12	ja	30
Bachelor-Modul (Vortrag)	6					3	nein	
			Teilsomme			180		180

Mit Start im Sommersemester

1. Semester	2. Semester	3. Semester	4. Semester	5. Semester	6. Semester
AOC für Biologen (11 LP)	<u>Mathematische Methoden I</u> MMCI (5 LP)	<u>Chemie der Elemente C2</u> (SBR, 8 LP)	<u>Vertiefte Organische Chemie VOC</u> (nur S+R, 5 LP)	<u>Elementorganische und Bioorganische Chemie EOC</u> (8 LP)	<u>Grundlagen der Biochemie GBC</u> (nur P, 5 LP)
<u>Mathematische Methoden II</u> MMCI (5 LP)	<u>Allgemeine und Anorganische Chemie C1</u> (8 CP)	<u>Praktikum zur Chemie der Elemente C2-P</u> (8 LP)	<u>Grundlagen der Biochemie GBC</u> (nur VI, 3 LP)	<u>Analytische Methoden ANA</u> (6 LP)	<u>Qualifizierungsmodul QM</u> (8 LP)
<u>Rechtskunde ReKu</u> (3 LP)	<u>Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie C1-P</u> (7 LP)	<u>Grundlagen der Physikalischen Chemie GPC</u> (10 LP)	<u>Prinzipien der Makromolekularen Chemie PMC</u> (nur VI, 3 LP)	<u>Einführung in synthetische und spektroskopische Methoden SAM</u> (nur P, 3 LP)	<u>Bachelorarbeit</u> (12 LP)
<u>Wahlmodul (Freier Wahlbereich und Studium Universale)</u> (8 LP)	<u>Einführung in die Physikalische Chemie PCO</u> (4 LP)	<u>Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum GPC-P</u> (5 LP)	<u>Fortgeschrittene Physikalische Chemie FPC</u> (10 LP)	<u>Organisch Chemisches Synthesepraktikum VOC-P</u> (8 LP)	
<u>Chemie der Elemente C2</u> (nur VL)	<u>Experimentalphysik Phys</u> (4 LP)		<u>Einführung in die Quanten- und Computerchemie QCCC</u> (8 LP)	<u>Prinzipien der Makromolekularen Chemie PMC</u> (nur P, 6 LP)	
	<u>Einführung in synthetische und spektroskopische Methoden SAM</u> (nur VI, 3 LP)		<u>Praktikum Experimentalphysik Phy-P</u> (3LP)		<u>Bachelor-Vortrag</u> (3 LP)
Σ: 27 LP 3 Prüfungen	Σ: 31 LP 4 Prüfungen	Σ: 31 LP 2 Prüfungen	Σ: 32 LP 3 Prüfungen	Σ: 31 LP 3 Prüfungen	Σ: 28 LP 3 Prüfungen

Legende:

	Vorlesungsmodule		Praktikumsmodule
	Wahlmodule		Masterarbeit

Die bei den einzelnen Modulbeschreibungen angegebenen Studiensemester beziehen sich auf einen Studienbeginn in einem Wintersemester!

Vorbemerkung: Bei bestimmten Modulen wird als Zulassungsvoraussetzung die erfolgreiche Teilnahme an Modulen gefordert, die gem. Musterstudienplan zeitlich vorher zu absolvieren sind. Um diese Zulassungsvoraussetzungen kenntlich zu machen, werden im Rahmen dieses Modulhandbuches dazu die HHU-Modulkürzel genannt.

Gem. §9 der Prüfungsordnung werden hierbei selbstverständlich auch Studien- und Prüfungsleistungen berücksichtigt, die nicht an der HHU erbracht worden sind, sofern eine Gleichwertigkeit festgestellt worden ist.

Für die rechtzeitige Beantragung der Gleichwertigkeitsprüfung und die Vorlage von entsprechenden Ausbildungsbelegen sind die Studierenden verantwortlich.

Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie

Pflichtmodule

Einführung in die Allgemeine und Anorganische Chemie (C1)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Allg. und Anorg. Chemie		V	4	150	60	250
C1-Übungen		Üb	2	90	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Janiak					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	B. Sc. Wirtschaftschemie				Pflichtmodul	
	B. Sc. Biochemie				Pflichtmodul	
	B. Sc. Physik/ med. Physik				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die grundlegenden allgemein-chemischen Konzepte wiedergeben und erläutern, • allgemein-chemische Konzepte für die Erklärung stofflicher Eigenschaften anwenden, • grundlegende stoffchemische und strukturelle Fragestellungen bearbeiten. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Atome, Moleküle, Ionen. Daltons Atomtheorie. • Stoffmenge, Substanzformel, Molekularformel, Stöchiometrie. • Atommodelle, Aufbau des Periodensystems, Elektronenkonfigurationen der Atome und Ionen, Atomeigenschaften. • Kovalente Bindung: Oktettregel, Lewis-Formeln, VSEPR-Regeln, Molekülorbitale. • Ionische Bindung: Elektronegativität, Struktur kristalliner Festkörper, Born-Haber-Kreisprozess, Gitterenergie. • Grundbegriffe der Komplexchemie (Zentralion, Liganden, Koordinationszahl und -geometrie). • Metallische Bindung. • Intermolekulare Bindungskräfte, Wasserstoffbrückenbindung. • Energieänderungen bei chemischen Reaktionen und chemisches Gleichgewicht, Massenwirkungsgesetz, Lösungsgleichgewichte, Löslichkeitsprodukt, Komplexbildungsgleichgewichte, Temperatur- und Druckabhängigkeit von Gleichgewichten, Prinzip von Le Châtelier, Katalysatoren. • Säure-Base-Reaktionen, pH-Wert, Puffer, Titrationskurven. • Redoxreaktionen, Nernst-Gleichung, Elektrolyse, Batterien, Brennstoffzellen. • Elementare Chemie der Halogene sowie der Elemente H, O, S, N, P, C. 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Teilnahme an Vorlesung und Übungen, Bearbeitung von Übungsaufgaben.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Keine					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
C. E. Mortimer, U. Müller, <i>Chemie. Das Basiswissen der Chemie</i> , Thieme, 13. vollständig überarbeitete Aufl., Stuttgart, 2019 .			
E. Riedel, C. Janiak, <i>Anorganische Chemie</i> , De Gruyter, 8. Aufl., Berlin/New York, 2011 .			
M. Binnewies, M. Flinze, M. Jäckel, P. Schmidt, H. Willner, G. Rayner-Canham, <i>Allgemeine und Anorganische Chemie</i> , Springer Spektrum, 3., vollständig überarbeitete Aufl., Berlin, 2016 .			
T. L. Brown, H. E. LeMay, B. E. Bursten, C. J. Murphy, P. M. Woodward, M. W. Stoltzfus, <i>Chemie. Studieren kompakt</i> , Pearson Studium, 14., aktualisierte Aufl., München, 2011 .			

Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie (C1-P)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	1 Semester	WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
C1-Praktikum		PExp	12	210	180	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Janiak					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> Vorschriften für den sicheren Umgang mit Gefahrstoffen benennen und sicher mit Laborausrüstung und Chemikalien umgehen, grundlegende Laboroperationen mit wässrigen Lösungen durchführen, analytische Verfahren wie Titrimetrie, Photometrie und Gravimetrie anwenden und bewerten. 						
Inhalte						
Einführende Versuche:						
<ul style="list-style-type: none"> Gerätehandhabung. Trennoperationen. Volumenmessung und Konzentration. Entsorgung. 						
Praktikumsaufgaben:						
<ul style="list-style-type: none"> Analytische Bestimmungen mit titrimetrischen, gravimetrischen, potentiometrischen und photometrischen Methoden. Herstellung von einfachen anorganischen Präparaten. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul C1.					
Studienleistungen	Erfolgreiche Bearbeitung der Praktikumsaufgaben, Anfertigen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
E. Riedel, C. Janiak, <i>Anorganische Chemie</i> , De Gruyter, 8. Aufl., Berlin/New York, 2011 .						
E. Schweda, <i>Jander/Blasius – Anorganische Chemie I. Theoretische Grundlagen und Qualitative Analyse</i> , Hirzel Verlag, 19., völlig neu bearbeitete Aufl., Stuttgart, 2021 .						
Praktikumsskript.						

Chemie der Elemente (C2)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Struktur, Bindung, Reaktivität		V	2	90	30	250
Chemie der Elemente		V	2	90	30	250
C2-Übungen		Üb	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r	N.N.					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	B. Sc. Wirtschaftschemie				Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> einen repräsentativen Überblick der Chemie der praxisrelevanten Haupt- und Nebengruppenelemente geben, Grundprozesse und Prinzipien der anorganischen Chemie erläutern und anwenden, Grundlegende stoffchemische und strukturelle Fragestellungen bearbeiten. 						
Inhalte						
<p><i>1. Struktur, Bindung, Reaktivität:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Elektronegativitätsskalen und Bindungsarten. Struktur und Bindung bei Metallen und ionischen Verbindungen, Symmetrie und Punktgruppen, Kristallsysteme, elektrische und magnetische Eigenschaften von Feststoffen. Darstellung der Elemente durch Redoxreaktionen. Übergangsmetallionen in wässriger Lösung, Grundbegriffe der Komplexchemie, Redoxstabilitäten von Metallionen, Latimer-, Frost- und Pourbaix-Diagramme. <p><i>2. Chemie der Elemente:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Synthesen, Strukturen, Reaktionen und technische Anwendungen von Hauptgruppen-Elementen und -Verbindungen aufbauend auf den Inhalten der Grundvorlesung aus Modul C1. <p>In den <i>Übungen</i> werden die Themen der Vorlesungen eingeübt.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Teilnahme an Vorlesung und Übungen, Bearbeitung von Übungsaufgaben.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				15/180		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
<p>E. Riedel, C. Janiak, <i>Anorganische Chemie</i>, De Gruyter, 8. Aufl., Berlin/New York, 2011.</p> <p>C. Janiak, <i>Nichtmetallchemie. Grundlagen und Anwendungen</i>, Shaker Verlag, 4. Aufl., Aachen, 2012.</p> <p>A. F. Holleman, E. Wiberg, N. Wiberg, <i>Lehrbuch der Anorganischen Chemie</i>, Verlag de Gruyter, 102., stark umgearbeitete und verbesserte Aufl., Berlin/New York, 2008.</p> <p>D. F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford, <i>Anorganische Chemie</i>, Wiley-VCH, 2. Aufl., Weinheim, 1997.</p>						

Praktikum zur Chemie der Elemente (C2-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
C2-Praktikum		PExp	12	240	180	15
Modulverantwortliche:r	N.N.					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Reaktivität der repräsentativen Elemente erläutern und einen Überblick zu den charakteristischen Reaktionen und der praktischen Verwendung ihrer wichtigen Verbindungen geben, die grundlegenden Aspekte der Reaktivität der Elemente der 3d-Reihe an Hand charakteristischer Reaktionen erläutern, einfache Synthese- und Analyseverfahren anwenden. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Chalkogene (Redoxreaktionen: Sauerstoff, Oxide, Wasserstoffperoxid, Schwefelmodifikationen, H₂S, SO₂, SO₃, Thiosulfat). Pnicogene (Ammoniak, Ammoniumsalze, Salpetersäure, NO_x (Smog), Phosphorpentoxid, Phosphorsäure, Polyphosphate). Kohlenstoffgruppe (Carbonate, Hydrogencarbonat, CO₂, CO, Boudouard-Gleichgewicht, Kieselsäuren, Sol-Gel-Prozess, Silicone, Zinn, Blei). Borgruppe (Borsäure (Titroprozessor), Borax, Perborat (NIR-Produktkontrolle), Aluminium, Aluminiumhydroxid, Alaune, Aluminothermie). Übergangsmetalle - Typische Reaktionen von d-Block-Metallsalzen: Titan (TiO₂-Modifikationen, Weißpigmente, röntgenogr. Phasenanalytik), Vanadium, Wolfram (Wolframbronzen), Eisen, Kobalt (Komplexisomerie), Nickel, Kupfer, Silber. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen C1 und C1-P.					
Studienleistungen	Erfolgreiche Bearbeitung der Praktikumsaufgaben, Anfertigen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
E. Riedel, C. Janiak, <i>Anorganische Chemie</i> , De Gruyter, 8. Aufl., Berlin/New York, 2011 .						
E. Schweda, <i>Jander/Blasius – Anorganische Chemie I. Theoretische Grundlagen und Qualitative Analyse</i> , Hirzel Verlag, 19., völlig neu bearbeitete Aufl., Stuttgart, 2021 .						
Praktikumsskript.						

Elementorganische und Bioorganische Chemie (EOC)					Stand: 30.01.2024	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Elementorganische Chemie (EOC)		V	2	60	30	250
EOC-Übungen		Üb	1	30	15	30
EOC-Praktikum		PExp	6	150	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Ganter				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. L. Daumann, Prof. Dr. C. Ganter				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die grundlegenden Konzepte der elementorganischen und bioorganischen Chemie wiedergeben, • die Grundprinzipien der Strukturlehre und der chemischen Bindung anwenden, • grundlegende elementorganische Substanzklassen bezeichnen, • elementorganischen Substanzklassen ihre typischen Reaktionsmöglichkeiten zuordnen, • Mechanismen grundlegender Reaktionen formulieren und anwenden, • Rollen verschiedener Metalle in Medizin und Natur erkennen, • Laborsynthesen unter Inertgasbedingungen durchführen, • analytische Methoden zum Konstitutionsbeweis elementorganischer und bioorganischer Verbindungen auswählen und Spektreninformationen (NMR, IR, ESR und MS) interpretieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> Grundzüge der elementorganischen und bioorganischen Chemie:						
a) bioorganische Chemie der Übergangsmetalle und Lanthanoide						
<ul style="list-style-type: none"> • Einführung in die Bioorganische Chemie. • Medizinische Bioorganische Chemie (Chelattherapie, Kontrastreagenzien, Platinkomplexe). • Katalyse durch ausgewählte Metalloenzyme. 						
b) elementorganische Chemie der Übergangsmetalle:						
<ul style="list-style-type: none"> • Metallcarbonyle (Geschichte, Synthesen, Strukturen, typische Reaktionen, Bindungsverhältnisse, 18-Elektronen-Regel). • Cyclopentadienylkomplexe (Übersicht; Metallocene und Derivate: Synthesen, Eigenschaften, Anwendungen). • metallorganische Elementarreaktionen (Substitution, Addition/Eliminierung, Insertion/Extrusion). 						
<i>Übung:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Synthesen und typische Reaktionen von Metallcarbonylen und Metallocenen. • Anwendung spektroskopischer Methoden zur Produktcharakterisierung (NMR, IR, MS, ESR, Röntgenbeugung). • Synthesen und spektroskopische Untersuchungen von biomimetischen Komplexen und Metalloenzymen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme am Modul C2.				

Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des EOC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>Lehrbücher der fortgeschrittenen Anorganischen Chemie, z.B.</p> <p>C. Janiak, H.-J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, <i>Moderne Anorganische Chemie</i>, De Gruyter, 5. Auflage, Berlin/Boston, 2018.</p> <p>C. Elschenbroich, <i>Organometallchemie</i>, Teubner, 6. Auflage, Wiesbaden, 2008.</p> <p>A. F. Hill, <i>Organotransition Metal Chemistry</i>, Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2002.</p> <p>S. Herres-Pawlis, P. Klüfers, <i>Bioanorganische Chemie. Metalloproteine, Methoden und Konzepte</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 2017.</p> <p>W. Kaim, B. Schwederski, <i>Bioanorganische Chemie. Zur Funktion chemischer Elemente in Lebensprozessen</i>, Springer Fachmedien, Wiesbaden, 2005.</p> <p>Praktikumsskript.</p>			

Analytische Methoden in der Chemie: Bestimmungsanalytik (ANA)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
6	180	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Analytische Methoden		V	2	90	30	250
ANA-Übungen		Üb	2	50	30	30
ANA-Praktikum		PExp	2	40	30	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Janiak				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Chemie.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Bedeutung analytischer Methoden in Labor, Technik und Alltag beschreiben, verschiedene Methoden der Bestimmungsanalytik erläutern, eine geeignete Methode für ein gegebenes analytisches Problem auswählen, analytische Messwerte und den analytischen Prozess bewerten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Der Analytische Prozess: Probennahme, Probenvorbereitung, Messung (Standards, Kalibrierung), Auswertung (Fehlerquellen), (statistische) Bewertung und Interpretation der Analyseergebnisse (Genauigkeit, Richtigkeit, Zufallsfehler, systematische Fehler, Chemometrie), Nachweisgrenzen, Selektivität, Matrix und Matrixeffekte, Empfindlichkeit, Qualitätssicherung (DIN EN ISO Normen), Validierung von analytischen Methoden; Beispiele instrumenteller analytischer Methoden: potentiometrische Titrations (mit Karl-Fischer-Titration), Atomemissionsspektroskopie (AES), Photoelektronenspektroskopie (PES), Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA, TRFA) und Röntgendiffraktometrie, Auger-Elektronenspektroskopie, Elektronenstrahl-Mikrosonde (ESCA, ESMA, EDX), Atomabsorptionsspektroskopie (AAS), UV/VIS-Absorptionsspektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie, Fließinjektionsanalyse (FIA), Thermochemische Methoden (TG, DTA, DSC), Polarographie und Voltammetrie, Chromatographie (GC, HPLC, GPC, SFC), Ionenchromatographie (IC), Neutronenaktivierungsanalyse, (NAA), Massenspektrometrie (ICP-MS) 						
<i>Übung:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Durchführung analytischer Bestimmungen unter Anwendung einer Auswahl der o.g. Methoden. Diskussion der Ergebnisse. Anfertigen von Protokollen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen C1 oder C2 und MMC1 oder MMC2 und PC0 oder Phys.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben. Erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsaufgaben. Erstellen von Protokollen.				

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des ANA-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
K. Cammann (Hrsg.), <i>Instrumentelle Analytische Chemie. Verfahren, Anwendungen, Qualitätsicherung</i> , Springer, Heidelberg/Berlin, 2001 .			
M. Otto, <i>Analytische Chemie</i> , Wiley-VCH, 5. Aufl., Weinheim, 2019 .			
G. Schwedt, Torsten C: Schmidt, O. J. Schmitz, <i>Analytische Chemie. Grundlagen, Methoden und Praxis</i> , Wiley VCH, 3. Aufl., Weinheim, 2016 .			
Praktikumsskript und Arbeitsunterlagen.			

Qualifizierungsmodule (QM)

Moderne Anorganische Chemie (MAC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Moderne Anorganische Chemie		V	2	90	30	250
Übung		Üb	1	30	15	30
Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Janiak				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Janiak, Prof. Dr. C. Ganter				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> das Konzept der Nano-Chemie und poröser Materialien anhand von Beispielen erläutern und Anwendungsbereiche solcher Materialien benennen, analytische Methoden zur Charakterisierung von Nano-Materialien und porösen Materialien beschreiben und problemorientiert auswählen, Elementarreaktionen der metallorganischen Katalyse beschreiben und Katalysezyklen verschiedener Reaktionen aufstellen, Vor- und Nachteile homogener und heterogener katalytischer Verfahren diskutieren, die Bedeutung katalytischer Prozesse in der chemischen Industrie erklären. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Nanochemie: Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von Nanomaterialien. poröse Materialien: Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von porösen Materialien am Bsp. der Metall-organischen Netzwerke (MOFs). Katalyse: Grundlagen der homogenen Katalyse, Katalysezyklen und relevante metallorganische Elementarreaktionen, Steuerung von Aktivität, Produktivität und Selektivität. Ausgewählte Beispiele aus Labor und Produktion. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen ANA und EOC.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben und aller Praktikumsaufgaben. Erstellen von Protokollen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des MAC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
C. Janiak, H.-J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, <i>Moderne Anorganische Chemie</i> , De Gruyter, 5. Auflage, Berlin/Boston, 2018 .						
C. Elschenbroich, <i>Organometallicchemie</i> , Teubner, 6. Auflage, Wiesbaden, 2008 .						
D. Steinborn, <i>Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse</i> , Vieweg+Teubner, 2. Aufl., Wiesbaden, 2010 .						

Kristallstrukturbestimmung (Krist)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Theorie und Praxis der Kristallstrukturanalyse		V	2	90	30	250
Krist-Übungen		Üb	1	30	15	30
Krist-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Dr. G. J. Reiß					
Beteiligte Dozierende	Dr. G. J. Reiß					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)				Qualifizierungsmodul	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die theoretischen Grundlagen der Kristallstrukturanalyse erläutern, • einen Überblick über die experimentellen Möglichkeiten zur Charakterisierung von Einzelkristallen mittels Röntgenbeugung geben, • eine Kristallstrukturanalyse im Routinefall durchführen und dokumentieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Erzeugung von Röntgenstrahlen und Strahlenschutz. • Kristallgitter und Symmetrie. • Wellenkinematische Theorie der Röntgenbeugung, die Deutungen des Beugungsphänomens von Laue und Bragg. • das Reziproke Gitter, die Ewald-Konstruktion, Atomformfaktoren und Strukturfaktoren • Translationenbehaftete Symmetrieelemente. • Systematische Auslösungen und die Bestimmung von Raumgruppen. • Fourier-Reihen in der Kristallographie. • Optische Diffraktometrie. • Experimentelle Methoden (Kristallzucht und -auswahl, kurze Einführung in die klassischen Filmmethoden, Vierkreisdiffraktometer, Imaging Plate- und CCD-Diffraktometer, Intensitätsdatensammlung). • Datenreduktion. • Strukturlösung mit direkten Methoden bzw. Pattersonfunktion. • Strukturverfeinerung und Qualitätsindikatoren. • kritische Beurteilung der Ergebnisse von Kristallstrukturanalysen. • Kristallographische Datenbanken und Crystallographic Information Files. • Pseudosymmetriephänomene. • Aperiodische Kristallstrukturen. • Durchführung einer Kristallstrukturbestimmung und Erstellung einer CIF-Publikation. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul ANA.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben. Erstellen von Protokollen.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Krist-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
W. Massa, <i>Kristallstrukturbestimmung</i> , Teubner, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden, 2007 .			
W. Borchardt-Ott, H. Sowa, <i>Kristallographie. Eine Einführung für Studierende der Naturwissenschaften</i> , Springer, 9. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2018 .			
C. Giacovazzo (Hrsg.), <i>Fundamentals of Crystallography</i> , Oxford University Press, 3., rev. Ed., Oxford, 2011 .			

Anorganische Photoaktive Materialien I - Grundlagen (PhotMat I)					Stand: 20.03.2024	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Qualifizierung	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung Anorgan. Photoaktive Mat.		V	2	90	30	30
PhotMat-Übung		Ü	4	90	60	30
PhotMat-Seminar		Sem	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r		Jun. Prof. Dr. Markus Suta				
Beteiligte Dozierende		Jun. Prof. Dr. Markus Suta				
Sprache		deutsch, auf Wunsch englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B.Sc. Wirtschaftschemie			Qualifizierungsmodul	
		M.Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Absorption und Lumineszenz typischer anorganischer photoaktiver Verbindungen sowie Einflussmöglichkeiten darauf erkennen, differenzieren, und bewerten, die Eignung experimenteller Untersuchungstechniken der Lumineszenzspektroskopie auf eine Problemstellung hin beurteilen und anwenden, und die Daten auswerten die verschiedenen Hierarchien der atomaren Zustände benennen, differenzieren und beurteilen, den Einfluss externer Stimuli auf die optischen Eigenschaften photoaktiver Materialien erläutern, und ihre Bedeutung für strahlende und strahlungslose Übergänge bewerten 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Grundbegriffe optischer Übergänge (Absorption, Emission, Stokes-Verschiebung) Experimentelle Techniken der Absorptions- und Lumineszenzspektroskopie an Lösungen und Festkörpern (steady-state und zeitaufgelöst) Hierarchie atomarer Zustände (Elektronenrepulsion, Spin-Bahn-Kopplung, Ligandenfeld) Anwendungen der Gruppentheorie für Ligandenfeldzustände, Kramersches Theorem Auswahlregeln und Einfluss auf Abklingzeiten Einstein-Koeffizienten, spontane & stimulierte Emission Photonische Effekte (lokale Feldverstärkung, Purcell-Effekt) Unterschiede zwischen nanokristallinen und mikrokristallinen Leuchtstoffen Einfluss äußerer Stimuli wie Druck und Temperatur auf die Lumineszenz Vibronische Kopplung Energietransfer und Energiemigration Strahlungslose Übergänge 						
<i>Übung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Vertiefung der Vorlesungsinhalte 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Präsentation aktueller Fachpublikationen durch die Studierenden im Rahmen des Mitarbeitenseminars 						

Teilnahmevoraussetzungen	Grundkenntnisse der Koordinationschemie und Quantenmechanik sind hilfreich.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übung.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Prüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>B. Henderson, G. Imbusch, <i>Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i>, Oxford University Press, Oxford/New York, 1989. G. Blasse, B. C. Grabmaier, <i>Luminescent Materials</i>, Springer, Berlin/Heidelberg/New York, 1994. J. García Solé, L. E. Bausá, D. Jaque, <i>An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i>, John Wiley & Sons, Chichester, 2005. J. Lakowicz, <i>Principles of Fluorescence Spectroscopy</i>, Springer, 3. Ed., New York, 2006. C. Ronda, <i>Luminescence – From Theory to Applications</i>, Wiley, 2. Ed., Oxford/New York, 2010. M. Fox, <i>Optical Properties of Solids</i>, Oxford University Press, 2. Ed., Oxford/New York, 2010. R.-S. Liu, X.-J. Wang, <i>Phosphor Handbook – Fundamentals of Luminescence</i>, 3. Ed., CRC Press, Boca Raton, 2022. Ausgewählte (Review-)Artikel aus der Fachliteratur.</p>			

Module des Instituts für Biochemie

Pflichtmodul

Grundlagen der Biochemie (GBC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Biochemie		V	2	90	30	250
GBC-Übungen (Präsenz optional)		Üb	1	30	15	250
Methoden der Biochemie		PExp & Sem	7	120	90	15 & 30
Modulverantwortliche:r		Dr. M. Girhard; Dr. J. Stindt.				
Beteiligte Dozierende		Die Dozierende des Instituts für Biochemie.				
Sprache		Deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> Eigenschaften und Reaktionen biologischer Makromoleküle beschreiben, die Grundprinzipien von Stoffwechselfvorgängen erklären, Proteine und Nukleinsäuren handhaben und charakterisieren, sowie die experimentellen Daten auswerten und dokumentieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Aufbau und Eigenschaften biologischer Makromoleküle (Kohlenhydrate, Lipide, Nukleinsäuren, Proteine). Strukturbiologie von Nukleinsäuren und Proteinen, Membranen und Zellen. Prinzipien des Stoffwechsels (Redoxreaktionen in Glykolyse und Citratzyklus, Mechanismus und Thermodynamik der oxidativen Phosphorylierung). Anabolismus (Glucogenese, Fettsäuresynthese, Mechanismus der ATP-Kopplung). Fluss der genetischen Information (Replikation, Transkription, Translation). Grundlagen von Regulation und Signalübertragung (Rückkopplung, allosterische Enzyme, Hormone). Methoden der Biochemie (Proteinisolierung, Proteincharakterisierung, Enzymkinetik, Gentechnik). Anwendungen der Biochemie (Wirkstoffe, Immunanalytik, Technische Anwendung von Enzymen). 						
<i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Isolierung und Charakterisierung der Glutamat-Oxalacetat-Transaminase aus Schweineherzen. Enzymkinetik der Alkoholdehydrogenase. Klonierung und heterologe Expression des Gens für das Grün-Fluoreszierende Protein in <i>Escherichia coli</i>. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an dem Modul C1 oder C2 oder POC.				
Studienleistungen		Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum, Berichte zu den Praktikumsversuchen, Abschlusskolloquien zum Praktikum.				

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Methoden der Biochemie“.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	100	benotet
Stellenwert der Note für die Endnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Lehrbücher der Biochemie z.B.: P. Karlson, D. Doenecke, J. Koolman, <i>Kurzes Lehrbuch der Biochemie für Mediziner und Naturwissenschaftler</i> , Thieme, 14. Neubarb. Aufl., Stuttgart, 1994 .			

Qualifizierungsmodul

Biochemie des Stoffwechsels (QM-BC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Stoffwechselbiochemie		V	4	120	60	30
Methoden der Proteincharakterisierung		PExp & Sem	7	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. L. Schmitt				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Biochemie				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Zusammenhänge von Stoffwechselprozessen und den resultierenden physiologischen oder pathologischen Auswirkungen erklären, wesentliche Eigenschaften von Proteinen und Membranen bestimmen, bioanalytische Daten auswerten und dokumentieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Glycolyse Substratketten-Phosphorylierung Citronensäurezyklus Aufbau biologischer Membranen Gegenüberstellung von Oxidativer Phosphorylierung und Photophosphorylierung Abbau und Synthese von Triacylglycerol und deren hormonelle Steuerung Harnstoffzyklus Pentosephosphat-Weg in Tieren und Calvin-Zyklus in Pflanzen Oxygenasen und Desaturasen Milchsäure- und Ethanol-Gärung Pyruvatdehydrogenase Oxidative Phosphorylierung Grundlagen der Bioenergetik Gluconeogenese und Glykogenstoffwechsel und ihre hormonelle Steuerung Aminosäure-Abbau Stickstoffkreislauf Steroid- und Isoprenoidsynthese 						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Enzymatische Glucosebestimmung Proteinsequenzierung durch Edman-Abbau von Insulin. Erzeugung und Quantifizierung von Membranpotentialen. Quantifizierung von IgG durch ELISA. Darstellung von Proteinstrukturen mit Hilfe von Standardprogrammen und der Brookhaven Protein Data Base. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme am Modul GBC.				
Studienleistungen		Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum, Berichte zu den Praktikumsversuchen, Abschlusskolloquien zum Praktikum.				

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Methoden der Proteincharakterisierung“.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Lehrbücher der Biochemie z.B.: J. M. Berg, J. L. Tymoczko, G. J. Gatto jr., L. Stryer, <i>Biochemie</i> , Springer Spektrum, 8. Aufl., Berlin, 2018 .			

Module des Instituts für Bioorganische Chemie

Qualifizierungsmodul

Qualifizierungsmodul Bioorganische Chemie (QualiBioOC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Qualifizierung	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der bioorganischen Chemie		V	1	30	15	30
Einführung in die wissenschaftliche Arbeit		Sem/Üb	2	75	30	30
Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. J. Pietruszka				
Beteiligte Dozierende		Dr. Sonja Meyer zu Berstenhorst				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
	B. Sc. Biochemie			Wahlmodul		
	B. Sc. Biologie			Wahlmodul		
B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> Die Studierenden können die Grundbegriffe der bioorganischen Chemie einordnen. Die Studierenden sind in der Lage, ihre Bachelorarbeit größtenteils eigenständig durchzuführen und die Ergebnisse fachgerecht auszuwerten und zu präsentieren. Die Studierenden kennen die Grundzüge guter wissenschaftlicher Praxis und wenden diese bei der eigenen Arbeit an. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Grundlagen der Molekularbiologie (Replikation, Transkription, Translation, Proteinbiochemie, PCR, Mutagenese) und Enzymologie (Kinetik, Thermodynamik, Enzymdesign, Screening). Retrosynthese. NMR-Spektroskopie. MS-Spektrometrie. 						
<i>Seminar/Übung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Gliederung einer wissenschaftlichen Arbeit. Einführung in MS Word (Formatierungen, Querverweise). Literaturrecherche, wissenschaftliches Zitieren, Einführung in das Literaturverwaltungsprogramm Endnote. Spektrenauswertung mit MestReNova. Grafikdesign (Farbraum, Auflösung, Bildformate, ChemDraw, PowerPoint). wissenschaftliches Präsentieren (Motivation, Gliederung, Foliendesign, Übungen zur Körpersprache). 						
<i>Praktikum:</i> Einführung in die für die Bachelorarbeit wichtige Methodik.						

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen VOC und VOC-P.		
Studienleistungen	Regelmäßige, aktive Teilnahme an den Übungen im Seminar, Teilnahme am Institutsseminar mit eigener Präsentation.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QualiBioOC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie unter http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre			
Literatur			
K. Hien, S. Rümpler, <i>Grafische Gestaltung in Naturwissenschaften und Medizin</i> , Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2008 . S. Bienz, L. Bigler, T. Fox, H. Meier, <i>Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie. Hesse–Meier–Zeeh</i> , Thieme, 9. Aufl., Stuttgart/New York, 2016 .			

Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie

Pflichtmodule

Prinzipien der Makromolekularen Chemie (PMC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
9	270	1 Semester	WiSe	5.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Prinzipien der Makromolekularen Chemie		V	2	75	30	250
PMC-Übung		Üb	1	45	15	30
PMC-Praktikum		PExp	7	150	150	15
Modulverantwortliche		N.N.				
Beteiligte Dozierende		Dr. M. Tabatabai, Dozierende der Makromolekulare Chemie.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
		B. Sc. Biochemie			Wahlmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Grundlage der makromolekularen Chemie wiedergeben, • grundlegende Polymerklasse bezeichnen, • Mechanismen grundlegender Polymerisationsreaktionen formulieren und anwenden, • Polymersynthese planen, durchführen und die Eigenschaften von Polymeren in Lösungen und Feststoffen untersuchen, • Methoden zum Strukturnachweis hochmolekularer Verbindungen auswählen und die Messdaten interpretieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> Grundlagen der Polymerchemie						
<ul style="list-style-type: none"> • Aufbau und Struktur von Polymeren, deren Eigenschaften und Charakterisierung. • Ionische und radikalische Polymerisationen. • Polyadditionen. • Polykondensationen. • Emulsionspolymerisation. • Suspensionspolymerisation und Copolymerisationsreaktion. • Polymere und Umwelt. 						
<i>Übung:</i> In den Übungen werden die Themen der Vorlesung und des Praktikums in 2er Gruppen vertieft.						
<i>Praktikum:</i>						
Anwendung von literaturbekannten Polymerisationsverfahren für die Herstellung von Polymeren und anschließenden Charakterisierung der hergestellten Polymere, z.B.						
<ul style="list-style-type: none"> • Versuche zur radikalischen, anionischen und kationischen Polymerisation von Styrol, α-Methylstyrol • kinetische Untersuchungen. • Polykondensation. 						

<ul style="list-style-type: none"> • PU-Schaum Herstellung. • Emulsionspolymerisation. • Methoden zur Charakterisierung von Polymeren, wie z. B. DSC. • Molekulargewichtsbestimmung, wie z. B. GPC. • Bestimmung der Copolymerisationsparameter. • Herstellung von Plexiglas. • Vernetzung von ungesättigten Polyestern. 			
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul VOC-P. Die vorherige Teilnahme am Modul GPC-P wird empfohlen.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übungen und erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsversuche. Erstellen von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des PMC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
S. Koltzenburg, M. Maskos, O. Nuyken, <i>Polymere. Synthese, Eigenschaften und Anwendungen</i> , Springer Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2014 .			
B. Tieke, <i>Makromolekulare Chemie. Eine Einführung</i> , Wiley-VCH, 3. Auflage, Weinheim, 2014 .			
J. M. G. Cowie, <i>Chemie und Physik der synthetischen Polymeren. Ein Lehrbuch</i> , Vieweg, 2000 .			
D. Braun, H. Cherdrón, M. Rehahn, H. Ritter, B. Voit, <i>Polymer Synthesis. Theory and Practice</i> , Springer, 5. Ed., Berlin/Heidelberg, 2013 .			
H.-G. Elias, <i>Makromoleküle</i> , Band 1-4, Wiley-VCH, 6., vollständig übera. Aufl., Weinheim, 1999 .			
G. Odian, <i>Principles of Polymerization</i> , Wiley-Interscience, 3. Ed., Hoboken, 1991 .			
Praktikumsskript.			

Prinzipien der Organischen Chemie (POC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Prinzipien und Mechanismen der Organischen Chemie		V	4	150	60	250
POC-Übungen		Üb	2	90	30	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, Dozierende der Organischen Chemie.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie			Pflicht	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflicht	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Organischen Chemie wiedergeben, • die Grundprinzipien der Strukturlehre, der Stereochemie und der Nomenklatur anwenden, • grundlegende Substanzklassen bezeichnen, • funktionelle Gruppen identifizieren und ihnen grundlegende Eigenschaften und Reaktionsmöglichkeiten zuordnen, • Mechanismen grundlegender Reaktionen formulieren und anwenden. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Bindungsverhältnisse. • Strukturen. • Stereochemie. • Nomenklatur. • Funktionelle Gruppen und Stoffklassen. • grundlegende Reaktionstypen (Autoxidation, S_{Rad}, S_N1, S_N2, Additionen an olefinische C=C-Bindungen, β-Eliminierungen, S_EAr, Carbonylchemie, Redox-Reaktionen). • bedeutende Industrieverfahren. <p><i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen		keine				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		<p>Im Rahmen der POC-Übungen werden im wöchentlichen Turnus 8 Pflichtaufgaben gestellt. Die Lösung jeder Pflichtaufgabe muss frist- und formgerecht eingereicht werden und wird unabhängig vom Schwierigkeitsgrad der Aufgabe bepunktet.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Studierende, deren Lösung zwar Mängel aufweist, aber den Mindestanforderungen entspricht, erhalten einen Übungspunkt. • Studierende, deren Lösung den Mindestanforderungen uneingeschränkt entspricht, erhalten zwei Übungspunkte. • Studierende, deren Lösung erheblich über den Mindestanforderungen liegt, erhalten drei Übungspunkte. <p>Durch Bearbeitung der Pflichtaufgaben können so maximal 24 Übungspunkte erworben werden. Zur Zulassung zur Modulprüfung müssen mindestens 14 Übungspunkte erworben werden.</p>				

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Klausur	120
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Interaktive Lernmodule finden Sie unter folgender Webadresse: https://schelm.hhu.de//			
Literatur			
K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore, <i>Organische Chemie</i> . Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, 2020 . N. E. Schore, <i>Arbeitsbuch Organische Chemie</i> . Wiley-VCH, 5. Aufl., Weinheim, 2012 . J. McMurry, <i>Organic Chemistry</i> , Cengage Learning Services, 9. Ed., Boston, 2016 . J. McMurry, <i>Study Guide with Solutions Manual for McMurry's</i> . Brooks/Cole, 7. Ed., Florence, 2010 . K. Schwetlick, <i>Organikum</i> . Wiley-VCH, 24. Aufl., Weinheim, 2015 .			

Einführung in synthetische und analytische Methoden (SAM)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
6	180	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in synthetische und analytische Methoden		V	1	30	15	250
SAM-Übungen		Üb	2	60	30	30
Organisch-Chemisches Grundpraktikum		PExp	4	90	60	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. Klaus Schaper, Dr. S. Beutner.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Vorschriften für den sicheren Umgang mit Gefahrstoffen benennen und befolgen, • Versuchsapparaturen zur Durchführung präparativ-organischer Synthesen aufbauen und betreiben, • geeignete Methoden zur Aufarbeitung und Reinigung von Substanzgemischen auswählen, einsetzen und dokumentieren, • physikalische Grundlagen spektroskopischer Methoden beschreiben, • Spektren (NMR, IR und MS) bekannter Verbindungen analysieren und interpretieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Destillation. • Umkristallisation. • Trennung von Substanzgemischen. • Sachgerechte Planung und Durchführung organisch-chemischer Synthesen. • Analyse und Interpretation von IR-, MS- und NMR-Spektren. • Extraktion. • Chromatographie. • Aufbau von Versuchsapparaturen. • Physikalische Grundlagen. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul POC.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben. Erfolgreiche Bearbeitung von Basisversuchen und Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]		benotet/unbenotet	
					unbenotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Interaktive Lernmodule finden Sie unter folgender Webadresse: https://schelm.hhu.de//						
Literatur						
K. Schwetlick, <i>Organikum</i> . Wiley-VCH, 24. Aufl., Weinheim, 2015.						

S. Hünig, G. Märkl, J. Sauer, P. Kreitmeier, Ledermann, J. Podlech, *Arbeitsmethoden in der organischen Chemie*, Lehmanns Media, 3., übera. Aufl., Berlin, **2014**.

S. Bienz, L. Bigler, T. Fox, H. Meier, *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie. Hesse–Meier–Zeeh*, Thieme, 9. Aufl., Stuttgart/New York, **2016**.

Skriptum zum Praktikum.

Vertiefte Organische Chemie (VOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Struktur und Reaktivität		V	2	75	30	250
Naturstoffe		V	2	75	30	250
VOC-Übungen		Üb	2	90	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. Klaus Schaper, Dr. S. Beutner.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflicht		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> organisch-chemische Reaktionen mechanistisch klassifizieren und dabei thermodynamische und kinetische Aspekte angemessen berücksichtigen, erlernte Reaktionsmechanismen zur Beantwortung neuer Fragestellungen anwenden, die strukturellen und synthetischen Grundprinzipien der Naturstoffchemie verstehen, Struktur-Eigenschaftsbeziehungen bei biologisch relevanten Moleküle erkennen und die Bedeutung chemischer Prozesse für biologische Vorgänge beurteilen, Sachdiskussionen auch in größeren Gruppen folgen und sich daran durch angemessene mündliche Beiträge beteiligen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Vertiefter Einblick in die Chemie der reaktiven Zwischenstufen. Konzertierte Reaktionen. Einführung in die Organometallchemie. Nutzung der Chemie funktioneller Gruppen. Einführung in die Chemie biologisch relevanter Moleküle (Terpene und Steroide, Kohlenhydrate, Nucleinsäuren, Alkaloide, Aminosäuren und Peptide, Lipide und Eicosanoide, Porphyrine). 						
<i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesungen und Präsentation der Lösungen.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, die Kenntnis der Themen des Moduls POC wird empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesungen und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben, Beteiligung an Sachdiskussionen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				15/180		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Interaktive Lernmodule finden Sie unter folgender Webadresse: https://schelm.hhu.de//						
Literatur						
F. A. Carey, R. J. Sundberg, <i>Organische Chemie – Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995.						

- F. A. Carey, R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry – Part A: Structure and Mechanisms*, Springer, 5. Ed., New York, **2007**.
- M. B. Smith, *March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure*, J. Wiley & Sons, 7. Ed., New York, **2013**.
- R. Brückner, *Reaktionsmechanismen. Organische Reaktionen, Stereochemie, Moderne Synthesemethoden*, Springer Spektrum, 3. Aufl., Berlin/Heidelberg, **2015**.
- H. Maskill, *Structure and Reactivity in Organic Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, **1999**.
- T. Schirmeister, C. Schmuck, P. R. Wich, *Beyer/Walter. Organische Chemie*, Hirzel Verlag, 25., völlig neu bearb. Aufl., Stuttgart, **2016**.
- G. Habermehl, P. Hammann, H. C. Krebs, *Naturstoffchemie: Eine Einführung*, Springer, 2., völlig neu bearb. Aufl., Berlin/Heidelberg, **2002**.
- E. Breitmaier, *Alkaloide. Betäubungsmittel, Halluzinogene und andere Wirkstoffe, Leitstrukturen aus der Natur*, Vieweg + Teubner Verlag, 3., überarb. u. erw. Aufl., Wiesbaden, **2008**.
- B. Fugmann, S. Lang-Fugamnn, W. Steglich, *Römpf Lexikon. Naturstoffe*, Thieme, Stuttgart, **1997**.

Organisch-Chemisches Synthesepaktikum (VOC-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Organisch-Chemisches Synthesepaktikum		PExp	11	240	160	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, Dr. M. Tabatabai, PD Dr. K. Schaper, Dr. S. Beutner.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die handwerklichen Grundlagen des organisch-chemischen Experimentierens anwenden, • sachgerecht mit Gefahrstoffen umgehen, • ein- und zweistufige Synthesen planen, durchführen und angemessen dokumentieren, • analytische Methoden zum Strukturbeweis niedermolekularer Verbindungen auswählen und Spektreninformationen (NMR, IR und MS) interpretieren, • Reaktionsmechanismen im Gespräch erläutern und den Erfolg von Synthesen bewerten. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Planung und Durchführung individuell vorgegebener Lehrbuchsynthesen. • Nutzung analytischer Methoden zum Nachweis des Syntheseerfolges. • Diskussion versuchsbezogener Themen mit den Praktikumsbetreuern. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul POC.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme Praktikum, erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsynthesen. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Interaktive Lernmodule finden Sie unter folgender Webadresse: https://schelm.hhu.de//						
Literatur						
K. Schwetlick, <i>Organikum</i> . Wiley-VCH, 24. Aufl., Weinheim, 2015 .						
S. Hünig, G. Märkl, J. Sauer, P. Kreitmeier, Ledermann, J. Podlech, <i>Arbeitsmethoden in der organischen Chemie</i> , Lehmanns Media, 3., übera. Aufl., Berlin, 2014 .						
R. Brückner, H.-D. Beckhaus, S. Braukmüller, J. Dirksen, D. Goepfel, M. Oestreich, <i>Praktikum Präparative Organische Chemie. Organisch-Chemisches Grundpraktikum</i> , Spektrum, Heidelberg, 2008 .						
Skript zum Praktikum.						

Qualifizierungsmodule

Angewandte Organische Chemie (AOC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Qualifizierung	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1 Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppen- größe
Syntheseplanung		V	2	60	30	30
AOC-Seminar		Sem	1	45	15	30
AOC-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Czekelius, PD Dr. Klaus Schaper, Dr. S. Beutner.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie (anteilig) M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • einfache und komplexe Moleküle retrosynthetisch analysieren, • einfache und komplexe Reaktionssequenzen zur Synthese von Zielmolekülen planen, • Vor- und Nachteile unterschiedlicher Synthesewege identifizieren und differenziert erläutern, • mehrstufige Synthesen durchführen und angemessen dokumentieren, • analytische Methoden zum Strukturbeweis niedermolekularer Verbindungen auswählen und Spektreninformationen (NMR, IR und MS) interpretieren, • aktuelle Fachthemen beurteilen sowie angemessen zusammenfassen und präsentieren. <p>Durch den Erwerb der o.g. Kompetenzen werden die Studierenden zur Durchführung einer präparativ-organisch ausgerichteten Bachelorarbeit befähigt.</p>						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Synthesestrategien. • Retrosynthetische Analyse. • Syntheseplanung. • wichtige Transformationen von funktionellen Gruppen. <p><i>Praktikum:</i></p> <p>Am Beispiel ausgewählter Laborsynthesen von interessanten und relevanten Verbindungen werden Stoffklassen und Funktionalitäten mit Reaktionstypen und Mechanismen verknüpft. Hierzu werden auch mehrstufige Reaktionssequenzen und Mikrowellen-unterstützte Synthesen genutzt sowie die Möglichkeiten und Grenzen moderner analytischer Methoden bei der Identifizierung und Reinheitskontrolle der Syntheseprodukte aufgezeigt.</p> <p>Abschließend in einer Arbeitsgruppe Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt</p> <p>Im <i>Seminar</i> werden relevante Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche diskutiert.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen VOC und VOC-P.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum. Erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsaufgaben. Erstellen von Versuchsprotokollen. Beteiligung an Sachdiskussionen.				

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des AOC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			08/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>S. Warren, <i>Organische Retrosynthese</i>, Teubner, Stuttgart, 1997.</p> <p>S. Warren, P. Wyatt, <i>Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i>, Wiley, 2. Ed., New York, 2008</p> <p>S. Warren, <i>Workbook for Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i>, John Wiley & Sons, 2. Ed., New York, 2009.</p> <p>F. A. Carey, R.J. Sundberg, <i>Organische Chemie. Ein weiterführendes Lehrbuch</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1995, (Kap. 26).</p> <p>J. Fuhrhop, G. Penzlin, <i>Organic Synthesis. Concepts and Methods</i>, Wiley-VCH, 2., rev. and enl. Ed., Weinheim, 1994.</p> <p>K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1996.</p> <p>K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 2003.</p> <p>E.J. Corey, X.-M. Cheng, <i>The Logic of Chemical Synthesis</i>, John Wiley & Sons, New York, 1989.</p> <p>C.L. Willis, M. Wills, <i>Syntheseplanung in der Organischen Chemie</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1997.</p> <p>T. Wirth, <i>Syntheseplanung – aber wie?</i>, Spektrum, Heidelberg, 1998.</p> <p>T.-L. Ho, <i>Symmetry. A Basis for Synthesis Design</i>, John Wiley & Sons, New-York, 1995.</p> <p>Praktikumsskript.</p>			

Module des Instituts für Physikalische Chemie

Pflichtmodule

Mathematische Methoden in der Chemie I (MMC I)				Stand: 04.06.2021		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
5	150	1 Semester	WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Mathematische Methoden i. d. Chemie I		V	3	90	45	250
MMC I - Übungen		Üb	1	60	15	50
Modulverantwortliche:r	Jun. Prof. Dr. J. Meisner					
Beteiligte Dozierende	Jun. Prof. Dr. J. Meisner					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie			Pflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden sollen nach Besuch der Veranstaltung						
<ul style="list-style-type: none"> • ein Verständnis zu den grundlegenden mathematischen Konzepten besitzen, die im Chemiestudium höherer Semester (z.B. Vorlesungen und Praktika GPC I und II, FPC und QCCC) und im Modul PC0 (1. Semester) benötigt werden, beherrschen • die Eigenschaften und Rechenregeln von elementaren Funktionen einer Variablen kennen, • die Bedeutung von Ableitung und Integral verstehen und auf Anwendungsbeispiele übertragen können, • Funktionen mehrerer Variablen ableiten und integrieren können, • die wichtigsten Anwendungen mathematischer Konzepte in der Chemie mitgeteilt bekommen haben. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Wiederholung der wichtigsten elementaren Rechenregeln. • Logarithmen, Exponentialfunktionen. • trigonometrische Funktionen und deren Additionstheoreme. • kartesische Koordinaten, Vektoren, Skalar- und Vektor-Produkt. • Funktion u. Umkehrfunktion. • Stetigkeit und Differenzierbarkeit von Funktionen einer Veränderlichen. • Taylorreihenentwicklung von Funktionen einer Variablen. • Ableitungsregeln, Kurvendiskussion, l'Hospitalsche Regeln. • Integration stetiger Funktionen durch partielle Integration, Integration durch Partialbruchzerlegung. • Differentialrechnung und Integralrechnung für Funktionen mehrerer Veränderlicher. • Partielle Differentiation, vollständiges Differential, Extrema. • Kurvenintegrale, Bereichsintegrale, Volumen- bzw. Dichteintegrale auch in Polarkoordinaten 						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Keine.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				05/180		

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.

Literatur

A. Jünger, H. G. Zachmann, *Mathematik für Chemiker*, Wiley-VCH, 7. Aufl., Weinheim, **2014**.

L. Papula, *Mathematik für Chemiker. Ein Lehrbuch für Studenten der Chemie und anderer Naturwissenschaften*, Enke, 2. Überarb. u. erw. Aufl., Stuttgart, **1982**.

E.-A. Reinsch, *Mathematik für Chemiker. Methoden, Beispiele, Anwendungen und Aufgaben*, Teubner Verlag, Wiesbaden, **2004**.

I. N. Bronstein, H. Mühlig, G. Musiol, K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Europa-Lehrmittel, 11. Aufl., Haan-Gruiten, **2020**.

Mathematische Methoden in der Chemie II (MMC II)				Stand: 04.06.2021		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
5	150	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Mathematische Methoden i. d. Chemie II		V	3	90	45	250
MMC II - Übungen		Üb	1	60	15	50
Modulverantwortliche:r		Jun. Prof. Dr. J. Meisner				
Beteiligte Dozierende		Jun. Prof. Dr. J. Meisner				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden sollen nach Besuch der Veranstaltung						
<ul style="list-style-type: none"> • die Mathematik zu den physikochemischen und theoretischen Konzepten, die im Chemiestudium höherer Semester (z.B. Vorlesungen und Praktika GPC I und II, FPC und QCCC) benötigt werden, beherrschen, • sicher im die komplexen Zahlenraum rechnen können, • Anwendung von Matrizen und Determinanten im Zusammenhang mit Gleichungssystemen und Eigenwertproblemen beherrschen, • die Grundzüge der Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik verstehen und anwenden können, • homogene und inhomogene Differentialgleichungen erkennen, verstehen und lösen können. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Komplexe Zahlen, Eulersche Formel; Gaußsche Zahlenebene, Wurzeln. • Das Prinzip der Fourier-Transformation. • Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Satz von Bayes, statistische Wahrscheinlichkeit. • Wahrscheinlichkeitsverteilungen; Binomial-/Multinomialverteilung, Poisson-Verteilung, Normalverteilung. • Zufallsvariablen, Erwartungswert, Varianz, Standardabweichung. • Lineare Abbildungen, Matrizenrechnung, Determinantenrechnung. • homogene und inhomogene Gleichungssysteme. • Eigenwert- und Eigenvektor-Probleme. • Homogene und inhomogene Differentialgleichungen erster Ordnung; Separation der Variablen, Variation der Konstanten. • Spezielle Differentialgleichungen höherer Ordnung; Exponentialansatz, Störgliedansatz. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, die Kenntnis der Inhalte von MMC I wird empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Keine.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					05/180	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
A. Jüngel, H. G. Zachmann, <i>Mathematik für Chemiker</i> , Wiley-VCH, 7. Aufl., Weinheim, 2014 .						

L. Papula, *Mathematik für Chemiker. Ein Lehrbuch für Studenten der Chemie und anderer Naturwissenschaften*, Enke, 2. Überarb. u. erw. Aufl., Stuttgart, **1982**.

E.-A. Reinsch, *Mathematik für Chemiker. Methoden, Beispiele, Anwendungen und Aufgaben*, Teubner Verlag, Wiesbaden, **2004**.

I. N. Bronstein, H. Mühlig, G. Musiol, K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Europa-Lehrmittel, 11. Aufl., Haan-Gruiten, **2020**.

Einführung in die Physikalische Chemie (PC0)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
4	120	1 Semester	WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die Physikalische Chemie		V	3	120	45	300
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. M. Schmitt				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. M. Schmitt				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> Die Studierenden erwerben ein Verständnis für grundlegende Zusammenhänge bei physikalisch-chemischen Prozessen durch Vorlesungsversuche mit Auswertung der gemessenen Zusammenhänge in Formelbeziehungen. Sie sind in der Lage physikalische Ansätze auf Problemstellungen in der Chemie anzuwenden. Sie verstehen die das Verhalten von Stoffen bei Zustandsänderungen und wenden gelernte Zusammenhänge in den Übungen und in der Diskussion der Modellkonzepte an. Die Studierenden können Modelle zur Lösung von grundlegenden Problemen der Reaktionskinetik anwenden. Die Studierenden können das Konzept des Welle-Teilchen Dualismus auf verschiedene Fragestellungen des Aufbaus der Materie anwenden. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Von der Messung zur Formel und zum Modell, SI-Einheiten. Gasgesetze: Empirische Gasgesetze und das ideale Gas, Boltzmann-Gesetz, Molwärme und Freiheitsgrade, der Gleichverteilungssatz, Wärmeleitung, Äquivalenz von Energieformen. Chemische Gleichgewichte, Massenwirkungsgesetz. Formale Reaktionskinetik: Reaktionsgeschwindigkeit und Geschwindigkeitsgleichung, grundlegende Messmethoden, Ordnung und Molekularität. Komplexere Reaktionsmechanismen, Quasistationarität. Grundlagen der Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten. Grundlegende Experimente zum Aufbau der Materie. Atome, Moleküle und ihre Bausteine. Das Konzept der Wellenfunktion und die Unschärferelation. Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Atomen und Molekülen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		keine				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		keine				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					04/180	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						

Literatur

P.W. Atkins, J. De Paula, J. J. Keeler, *Physikalische Chemie*, Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, **2022**.

H.-J. Freund, G. Wedler, *Lehrbuch der Physikalischen Chemie*, Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, **2012**.

W.J. Moore, D.O. Hummel, *Physikalische Chemie*, de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, **1986**.

G.M. Barrow, G.W. Herzog, *Physikalische Chemie I-III*, Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, **1984**.

H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, *Principles of Physical Chemistry*, John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, **2009**.

Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Pflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
10	300	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
GPC I		V	3	90	45	250
GPC II		V	3	90	45	250
GPC-Übungen		Üb	2	120	30	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. M. Karg / Prof. Dr. C. Seidel				
Beteiligte Dozierende		Die Dozierende der Physikalischen Chemie im Wechsel.				
Sprache		Deutsch (Fachwörter: englisch)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie			Pflichtmodul	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die experimentellen und theoretischen Grundlagen der Physikalischen Chemie in den Bereichen Spektroskopie und Thermodynamik wiedergeben, die erarbeiteten physikalischen Konzepte auf Probleme in der Chemie anwenden, thermodynamische Kenngrößen errechnen und verstehen die Zusammenhänge bei Phasenübergängen von Stoffen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung GPC I:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Motivation und historische Einleitung: Entdeckung der Elementarteilchen, Bestimmung von q/m und der Elementarladung, Anschauung zu Atomkern und Elektronenhülle. Teilchen- und Wellennatur von Materie und elektromagnetischer Strahlung: Compton-Effekt, photoelektrischer Effekt, Impuls von Lichtquanten, Lichtbeugung, De-Broglie-Beziehung, Elektronenbeugung an Kristallen, Beugung am Einfachspalt, Heisenbergsche Unschärferelation. Schrödinger-Gleichung: Teilchen im Potentialkasten, der Tunneleffekt harmonischer und anharmonischer Oszillator, interne Rotation und starrer Rotator, Art und Zahl der Freiheitsgrade. Wasserstoffatom mit empirischer Beschreibung, Bohr'sches Atommodell und quantenmechanische Behandlung. Aufbau des Periodensystems und Atomspektren: Elektronenspin und Pauli Prinzip, Termsymbole, der Grundzustand von Atomen. Intra- und intermolekulare Bindungen: Kovalente Bindung, H_2^+, Born-Oppenheimer Näherung, Hückelmodell, chemische Struktur von Molekülen, Hybridisierung und Bindungswinkel, Ionische und Metallische Bindung, Van der Waals-Bindung, reales Gases, Wasserstoffbrückenbindung, Flüssigkeit, Übergang zum Festkörper. Spektroskopie: Wechselwirkung von Materie mit elektromagnetischer Strahlung: permanentes Dipolmoment, Polarisierbarkeit. Nicht-resonante Anregung: der Raman-Effekt. Bohr'sche Frequenzbedingung. Übergangswahrscheinlichkeiten. Rotations-, Schwingungs- und elektronische Übergänge, das Franck-Condon-Prinzip. Verbotene Übergänge, Chromophore. 						
<i>Vorlesung GPC II:</i>						
Grundlagen der Thermodynamik						
<ul style="list-style-type: none"> Rekapitulation chemische Gleichgewichte, Massenwirkungsgesetz. Bezug zwischen kinetischen und thermodynamischer Definition. 						

- Die drei Hauptsätze der Thermodynamik: Zustandsfunktionen (innere Energie, Enthalpie, Entropie, freie Energie/Enthalpie), Arbeit, Wärme, Kreisprozesse, Wirkungsgrad.
- Chemische Reaktionsthermodynamik, Standardreaktionsenthalpie, Verbrennungsenthalpie, Satz von Hess.

Phasenübergänge und Mischphasenthermodynamik:

- Vom idealen zum realen Gas, kinetische Gastheorie, van der Waals Gleichung, kritischer Punkt, Lennard-Jones Potential, Joule-Thompson Effekt.
- Reinstoffphasengleichgewichte, Zustandsdiagramme, Phasenübergänge, Klassifikation nach Ehrenfest, Gibbs'sche Phasenregel, Anomalie des Wassers.
- Chemisches Potential, Aktivitäten.
- Henry- und Raoult'sches Gesetz.
- Kolligative Eigenschaften, Gefrierpunktniedrigung, Siedepunkterhöhung, osmotischer Druck, Destillation.

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC1 und PC0.		
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Vorlesungen und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Weitere Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html			
Literatur			
P.W. Atkins, J. De Paula, J. J: Keeler, <i>Physikalische Chemie</i> , Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, 2022 .			
P. W. Atkins, R. Friedman, <i>Molecular quantum mechanics</i> , Oxford University Press, 5. Ed., Oxford, 2011 .			
H.-J. Freund, G. Wedler, <i>Lehrbuch der Physikalischen Chemie</i> , Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, 2012 .			
W.J. Moore, D.O. Hummel, <i>Physikalische Chemie</i> , de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, 1986 .			
G.M. Barrow, G.W. Herzog, <i>Physikalische Chemie I-III</i> , Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, 1984 .			
H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, <i>Principles of Physical Chemistry</i> , John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, 2009 .			

Praktikum Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
5	150	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
GPC-Praktikum im Semester		PExp	7	150	80	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. M. Karg / Prof. Dr. C. Seidel				
Beteiligte Dozierende		Dozierende des Instituts Physikalische Chemie im Wechsel.				
Sprache		deutsch (Fachwörter: englisch)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		B. Sc. Biochemie B. Sc. Wirtschaftschemie		Pflichtmodul Pflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • physikalisch-chemische Grundlagen experimentell und theoretisch anwenden und beschreiben, • grundlegende Konzepte der Thermodynamik experimentell anwenden, • grundlegende Konzepte der Kinetik experimentell anwenden, • grundlegende Konzepte der Spektroskopie experimentell anwenden, • komplexe Datensätze erfassen, auswerten und interpretieren. 						
Inhalte						
1. Simulation von formalen Gesetzen zu den Themen der Vorlesung mit dem Programm MathCAD experimentelle Übungen am PC.						
2. Experimentelle Übungen zur Spektroskopie, Thermodynamik und Kinetik.						
7 ausgewählte Versuche aus einem Pool von Versuchen. Beispielhaft Versuche wie:						
<ul style="list-style-type: none"> • UV Spektroskopie • IR Spektroskopie • Kinetik der Hydrolyse von Malachitgrün • Lösungsenthalpie • Dissoziationskonstante • Atom-Absorptionsspektroskopie • Ramanspektroskopie • Temperaturabhängigkeit der Molwärme • Verbrennungsenthalpie 						
sowie weitere Versuche, die sich eng an den Stoff der Vorlesung anlehnen.						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC1 und PC0.				
Studienleistungen		Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum: vor Versuchsbeginn Kolloquium zum Experiment, Seminarvortrag, Anfertigung von Protokollen, die testiert werden.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		entfällt				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Weitere Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html						
Literatur						
P.W. Atkins, J. De Paula, J. J: Keeler, <i>Physikalische Chemie</i> , Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, 2022 .						
P. W. Atkins, R. Friedman, <i>Molecular quantum mechanics</i> , Oxford University Press, 5. Ed., Oxford, 2011 .						
H.-J. Freund, G. Wedler, <i>Lehrbuch der Physikalischen Chemie</i> , Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, 2012 .						

W.J. Moore, D.O. Hummel, *Physikalische Chemie*, de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, **1986**.

G.M. Barrow, G.W. Herzog, *Physikalische Chemie I-III*, Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, **1984**.

H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, *Principles of Physical Chemistry*, John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, **2009**.

Fortgeschrittene Physikalische Chemie (FPC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
10	300	1 Semester	WiSe	5.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Fortgeschrittene Physikalische Chemie		V	3	90	45	250
FPC-Übungen		Üb	1	60	15	30
FPC-Praktikum mit Seminar		PExp	7	150	80	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. P. Gilch				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Physikalischen Chemie im Wechsel				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • grundlegende Prinzipien der Transportprozesse verstehen und anwenden, • grundlegende thermodynamische und kinetische Prinzipien der Elektrochemie in Theorie und Anwendung (z. B. Korrosion und Energiespeicherung) wiedergeben. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung FPC:</i>						
Kinetik und Transportprozesse:						
<ul style="list-style-type: none"> • Rekapitulation der formalen Kinetik einfacher und zusammengesetzter Reaktionen. • Phänomenologie der Temperaturabhängigkeit von Geschwindigkeitskonstanten; Arrhenius-Gleichung. • Elementare Aspekte der statischen Thermodynamik im Zusammenhang mit der Theorie des Übergangszustands. • Verknüpfung kinetischer und thermodynamischer Größen; Marcus-Theorie. • Wärme- und Stofftransport; Diffusion. • Diffusionskontrollierte Reaktionen. 						
Thermodynamische und kinetische Aspekte der Elektrochemie:						
<ul style="list-style-type: none"> • Wissenschaftliche und technische Bedeutung der Elektrochemie. • Rekapitulation Elektrizitätslehre. • Elektrochemisches Potenzial. • Typen von Elektroden, Spannungsreihe, Nernstsche Gleichung. • Potentiale: Elektrodenpotentiale, Temperaturabhängigkeit von Zellspannungen, Flüssigkeitspotentiale, Diffusionspotentiale, Membranpotentiale. • Elektrische Leitfähigkeit. Transportprozesse: Diffusion, Beweglichkeit, Migration, Ficksche Gesetze, Messmethoden. Leitwert, Überföhrungszahlen. • Debye-Hückel-(Onsager)-Theorie. • Elektrische Doppelschicht, Coulomb-Wechselwirkung, Screening, Zeta-Potential. • Kinetik in Elektrochemie; Butler-Volmer-Gleichung. • Cyclovoltammetrie. • Elektrochemie des Lithium-Ionen-Akkus. • Aktuelle wissenschaftliche Aspekte der Elektrochemie (externer Sprecher). 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen PC0, MMC1 und MMC2 sowie GPC-P.				

Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	80	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>P.W. Atkins, J. De Paula, J. J. Keeler, <i>Physikalische Chemie</i>, Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, 2022.</p> <p>H.-J. Freund, G. Wedler, <i>Lehrbuch der Physikalischen Chemie</i>, Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, 2012.</p> <p>C.H. Hamann, W. Vielstich, <i>Elektrochemie</i>, Wiley-VCH, 4. Aufl., Weinheim, 2005.</p> <p>W.J. Moore, D.O. Hummel, <i>Physikalische Chemie</i>, de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, 1986.</p> <p>G.M. Barrow, G.W. Herzog, <i>Physikalische Chemie I-III</i>, Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, 1984.</p> <p>H.-D. Dörfler, <i>Grenzflächen und kolloid-disperse Systeme</i>, Springer, Berlin, 2002.</p> <p>H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, <i>Principles of Physical Chemistry</i>, John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, 2009.</p>			

Qualifizierungsmodule

Experimentelle Methoden in der Physikalischen Chemie (QM-PC)				Stand: 25.02.2019		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1 Semesterhälfte	SoSe	6		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Experimentelle Methoden in der PC		V	2	45	30	30
Praktikum		PExp	6	150	90	15
Seminar		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. P. Gilch					
Beteiligte Dozierende	Alle Dozierenden der Physikalischen Chemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Konzeption und Umsetzung eines Forschungsprojekts der PC. Umgang mit modernen Messmethoden der PC. Datenerfassung und -auswertung sowie Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen. Graphische und schriftliche Darlegung der Ergebnisse. Wissenschaftliches Vortragen.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> Allgemeiner Teil (alle Teilnehmer) <ul style="list-style-type: none"> • Themenfindung in der PC und Literaturarbeit • Dokumentation von Messergebnissen • Messungen und Datenerfassung (Dynamikumfang, Kalibrierungen etc.) • Statistische und systematische Fehler • Umgang mit Darstellungs- und Auswertungssoftware am Beispiel von ORIGIN. Spezieller Teil (durchgeführt vom jeweiligen Praktikumsbetreuer) Es sollen relevante Themenbereiche in Bezug zum Thema der Bachelorarbeit vertieft und instrumentelle sowie theoretische Methoden des betreuenden Arbeitskreises kennengelernt werden. Dieser Teil dient der speziellen Vorbereitung zur geplanten Bachelorarbeit. <i>Übung/Seminar:</i> Praktischer Umgang mit ORIGIN. Vortrag über das Forschungsprojekt. <i>Praktikum:</i> ein experimentelles Forschungsprojekt in der Arbeitsgruppe, in der die Bachelorarbeit angefertigt werden soll.						
Teilnahmevoraussetzungen	Kenntnisse mathematischer Methoden und Grundkenntnisse der Physikalischen Chemie aus den Modulen GPC und GPC-P.					
Studienleistungen	Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Veranstaltungen. Anfertigung eines Berichts.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QM-PC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Vortrag über das Praktikum, bewertete Ausarbeitung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		
Sonstige Informationen						

http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Physikalische_Chemie

Literatur

Allgemeiner Teil: Vorlesungsskript.

Spezieller Teil: Original- und Übersichtsarbeiten.

Theorie und Simulation chemischer Reaktionen (TSCR)				Stand: 03.04.2024		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
TSCR-Vorlesung		V	2	60	30	250
TSCR-Praktikum		PExp	6	135	90	15
TSCR-Seminar		Sem	1	45	15	15
Modulverantwortliche:r		Jun.-Prof. Dr. Jan Meisner				
Beteiligte Dozierende		Jun.-Prof. Dr. Jan Meisner				
Sprache		Deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden						
<ul style="list-style-type: none"> verstehen die physikalischen Grundlagen zur theoretischen Beschreibung von molekularen Systemen sowie die Grenzen der erlernten Methoden, verstehen quantitative Zusammenhänge zwischen Moleküleigenschaften und makroskopischen Eigenschaften, können computerchemische Methoden selbständig durchführen und evaluieren sowie die in der modernen Literatur präsentierten Ergebnisse einschätzen., können die hier erlernten Methoden verwenden, um eine Bachelorarbeit anzufertigen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Hartree-Fock, LCAO-Näherung, Semiempirische Verfahren, Korrelationsmethoden, Dichtefunktionaltheorie Grundlagen der statistischen Theorie der Materie, Mikro- und Makrozustände, Verbindung von einfachen quantenmechanischen Modellen mit thermodynamischen Eigenschaften, Grundlagen der Übergangszustandtheorie Thermodynamische und kinetische Untersuchung von Reaktionsmechanismen im elektronischen Grundzustand und unter Einwirkung externer Stimuli Automatisierte Erkundung des chemischen Raums, Reaktionsnetzwerke und kinetische Modelle Grundlagen und Anwendungen von maschinellem Lernen in der theoretischen Chemie: Einsatz von künstlichen neuronalen Netzwerken zur Modellierung von Potentialenergiehyperflächen und deren Dynamik. Einsatz von neuronalen Netzwerken zum Lernen von Energien und Gradienten. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen QCCC und GPC.				
Studienleistungen		Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Praktikums und des Seminars.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/180	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , Wiley-VCH, 3. Aufl., Weinheim, 2017 .						
C. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry. Theories and models</i> , Wiley, 2. Ed., Chichester, 2004 .						

Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie

Pflichtmodule

Einführung in die Quanten- und Computerchemie (QCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	5.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
QCCC Vorlesung		V	3	90	45	250
QCCC Seminar		Sem	1	30	15	30
QCCC Praktikum		PExp	4	120	60	15
Modulverantwortliche:r	N.N.					
Beteiligte Dozierende	Dozentinnen und Dozierende der Theoretischen Chemie					
Sprache	Deutsch (Fachwörter Englisch)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
	B. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Quantenchemie wiedergeben, • Energieniveaus und Wellenfunktionen der exakt lösbaren Modellsysteme skizzieren, • die Hückeltheorie sicher anwenden, • Molekülorbitalschemata konstruieren, • chemische Bindungen klassifizieren, • Moleküleigenschaften im elektronischen Grundzustand mit Standardprogrammpaketen berechnen und interpretieren, • Auswahlregeln für IR- und Ramanübergänge anwenden. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Observable und Operatoren: Was ist ein Operator? Eigenfunktionen und Eigenwerte, Eigenschaften quantenmechanischer Operatoren, Spektrum, Korrespondenzprinzip, zeitabhängige und zeitunabhängige Schrödingergleichung, Energiequantelung. • Erwartungswerte und Varianz: Erwartungswerte, Varianz und Standardabweichung, Ehrenfesttheorem, Vertauschbarkeit von Operatoren, Unschärfe, Variationsprinzip für die Energie, Übergangswahrscheinlichkeiten. • Das Hückel-Orbital-Modell: Näherungen im HMO-Modell, Ladungsordnung, Bindungsordnung, freie Valenz. • Separation von Variablen: zweidimensionaler Kasten, Abseparation der Schwerpunktsbewegung, Wasserstoffatom, Wasserstofforbitale. • Mehrelektronenatome: Näherung der unabhängigen Teilchen, Orbitale, Hartree-Näherung, Teilchenvertauschung, Slaterdeterminante, Hartree-Fock-Ansatz. • Moleküle: Molekularer Hamiltonoperator, Born-Oppenheimer-Näherung, Elektronische Schrödingergleichung, LCAO-MO-Modell, gebräuchliche Basisfunktionen. • Potentialhyperflächen: Stationäre Punkte, Koordinatenwahl, Geometrieoptimierung, Molekülschwingungen. • Chemische Bindung: Eielektronenbindung, kovalente Bindung, delokalisierte Bindung, ionische 						

Bindung, polare Bindung, intermolekulare Wechselwirkungen (statische, induzierte), Wasserstoffbrückenbindung, eindimensionaler Festkörper.

- Kraftfelder und Molekülmechanik.
- Elektronenkorrelation (qualitativ):
 - a) Definition, Fermi-/Coulomb-Loch;
 - b) Wellenfunktionsmethoden zur Beschreibung der Elektronenkorrelation: Multikonfigurationsansatz (CASSCF), Konfigurationswechselwirkung (CI), Møller-Plesset-Störungstheorie (MP2);
 - c) Dichtefunktionaltheorie: Hohenberg-Kohn-Theorem, Kohn-Sham-Gleichungen, Austauschkorrelationsfunktionale.
- Symmetrie in der Chemie: Klassifikation von Symmetrieeigenschaften, Richtung des Dipolmoments, Chiralität, reduzible und irreduzible Darstellungen, Ausreduzieren, Symmetrieeigenschaften von Schwingungsmoden, Auswahlregeln für Infrarot- und Ramanübergänge.

Seminar:

Seminarvortrag über ein Thema aus Vorlesung oder Praktikum.

Computerpraktikum:

- Literaturrecherche und Chemiedatenbanken im Internet.
- Computergestützte Lösung von Übungen zur Vorlesung am PC unter Windows und Linux: Wellen und Interferenz, Aufenthaltswahrscheinlichkeit, Erwartungswerte, Wasserstoffatom
- Berechnung von Moleküleigenschaften mit Standardquantenchemieprogrammen:
 - a) Elektronische Schrödingergleichung (Teilchen im Kasten, Hückeltheorie, Restricted Hartree-Fock-Verfahren, Kohn-Sham-Verfahren),
 - b) Geometrieoptimierung; Konstitutionsisomere,
 - c) Molekülschwingungen und Kraftkonstanten, Übergangswahrscheinlichkeiten.

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC1 und MMC2.		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anwesenheitsaufgaben, Protokolle, Seminarvortrag		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QCCC-Praktikums und des QCCC-Seminars.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			10/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Skript zur Vorlesung. Fachbücher: J. Reinhold, <i>Quantentheorie der Moleküle. Eine Einführung</i> , Springer Spektrum, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden, 2015 . W. Kutzelnigg, <i>Einführung in die Theoretische Chemie</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2002 . N. J. B. Green, <i>Quantum Mechanics 1: Foundations (Oxford chemistry primers)</i> , Oxford University Press, Oxford, 2001 . G.H. Grant, W.G. Richards, <i>Computational Chemistry (Oxford chemistry primers)</i> , Oxford University Press, Oxford, 2004 .			

Qualifizierungsmodule

Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
AnQCCC-Vorlesung		V	2	60	30	250
AnQCCC-Seminar		Sem	1	45	15	30
AnQCCC-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	N.N.					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig) B. Sc. Informatik M. Sc. Chemie M. Sc. Wirtschaftschemie			Qualifizierungsmodul Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die wichtigsten Methoden der Computerchemie anwenden, • der Problemstellung angemessene Methoden und Basisätze auswählen, • selbständig Geometrieoptimierungen an Molekülen durchführen und beurteilen, • elektronische Anregungsspektren berechnen und interpretieren, • eine Bachelorarbeit in der Theoretischen Chemie anfertigen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Quantenchemische Methoden für Eigenschaften von Molekülen im elektronischen Grundzustand (Hartree-Fock, Dichtefunktionaltheorie, Møller-Plesset-Störungstheorie, semiempirische Verfahren). • Grundzüge der statistischen Thermodynamik, Zustandssummern für Translation, Rotation, Schwingungs- und elektronische Energien. • Einschätzen der Leistungsfähigkeit der quantenchemischen und semiempirischen Methoden. • Interpretation der Ergebnisse von MO-Rechnungen. • Suche nach Minima und Übergangszuständen, Reaktionswärmen (Wahl von Atomorbitalbasen, Bedeutung der Nullpunktsschwingungsenergie, Temperaturabhängigkeit, Lösungsmittelleffekte). • Berechnung elektronischer Anregungsspektren mit DFT/MRCI. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul QCCC.					
Studienleistungen	Teilnahme an Vorlesung und Praktikum, Auswertung der Praktikumsaufgaben, Seminarvortrag.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des AnQCCC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.
Literatur
Skript zur Vorlesung. C. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry. Theories and models</i> , Wiley, 2. Ed., Chichester, 2004 .

Simulation von Biomolekülen (BioSim)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen (März)	WiSe	5.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Simulation von Biomolekülen		V	2	60	30	250
BioSim-Seminar		Sem	1	45	15	30
BioSim-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. B. Strodel				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. B. Strodel				
Sprache		deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Qualifizierungsmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		B. Sc. Biochemie			Qualifizierungsmodul	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Proteine und andere Biomoleküle mit der Software VMD visualisieren, • die Theorie hinter Molekulardynamik(MD)-Simulationen nachvollziehen, • MD-Simulationen von Proteinen mit der Software GROMACS durchführen und diese auswerten, • englischsprachige Publikationen über biomolekulare Simulationen verstehen und diese in einem Vortrag vorstellen. 						
Inhalte						
Vorlesung:						
<ul style="list-style-type: none"> • Biomolekulare Kraftfelder. • Berechnung nichtkovalenter Wechselwirkungen. • Geometrieoptimierung. • Molekulardynamik (MD)-Simulationen: Theorie, MD mit dem Programm GROMACS, Auswertung von MD-Simulationen, Methoden zur Berechnung von freien Energien (z.B. Replica-Exchange-MD und Umbrella-Sampling-MD). • Monte-Carlo-Simulationen, inklusive globaler Optimierung. • QM/MM-Simulationen, mit Anwendungen auf Enzyme. 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Analyse einer Publikation zum Thema biomolekulare Simulation und eigene Simulationen zu dieser Publikation. • Vorstellen der Publikation und der eigenen Simulationsergebnisse in einem Seminarvortrag (30 Minuten, Powerpoint). 						
<i>Computerpraktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS, des QM/MM-Programms ChemShell und des Programms VMD zur Darstellung von Biomolekülen. • Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux. Die Übungsaufgaben werden selbstständig bearbeitet. • Protokolle zu den Übungen. Die Protokolle werden korrigiert und besprochen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen PC0 und QCCC.				

Studienleistungen	Bearbeitung von Übungen im Rahmen des Computerpraktikums inklusive Protokolle, Seminarvortrag.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des BioSim-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts. Wenn das Modul bereits als Qualifikationsmodul im Bachelorstudiengang gewählt wurde, ist eine Belegung als Wahlpflichtmodul im Masterstudiengang ausgeschlossen.			
Literatur			
Skript zur Vorlesung Fachbücher: T. Schlick, <i>Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide</i> , Springer, 2. Ed., New York, 2010 . A. R. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i> , Prentice Hall, 2. Ed., Harlow, 2011 . D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i> , Academic Press, 2. Ed., San Diego, 2002 . Spezialliteratur zu Seminarthemen wird ausgegeben.			

Module der Wissenschaftlichen Einrichtung Physik

Pflichtmodule

Experimentalphysik (Phys)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
4	120	1 Semester	WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Experimentalphysik		V	3	120	45	250
Modulverantwortliche:r	Dr. F. Platten					
Beteiligte Dozierende	Dr. F. Platten					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	B. Sc. Biochemie				Pflichtmodul	
	B. Sc. Wirtschaftschemie				Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • grundlegende Konzepte der klassischen Physik und ihre modernen Anwendungen verstehen sowie ihre Bedeutung für die Naturwissenschaften einschätzen; • physikalische Phänomene beschreiben und Naturgesetze mathematisch formulieren; • und einfache physikalische Probleme lösen. 						
Inhalte						
<i>Einführung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Physik als experimentelle und exakte Naturwissenschaft. • der mathematische Werkzeugkasten. • Physikalische Größen: Angabe physikalischer Größen, Messung und Messfehler. 						
<i>Mechanik:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Kinematik: Längen- und Zeitmessung, der Massenpunkt, Bewegung in einer Raumrichtung, Überlagerung von Bewegungen im Raum. • Dynamik: Kraft und Masse, statisches Gleichgewicht und Stabilität, die Newton-Gesetze und ihre Anwendungen (Reibung, Kreisbewegung, Gravitation). 						
<i>Energie- und Impulserhaltung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Arbeit und Leistung, Energie und Energieerhaltung, Stöße und Impulserhaltung; Schwingungen: harmonische, gedämpfte und erzwungene Schwingungen. 						
<i>Optik:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Licht: Lichtwellen und Lichtstrahlen, Lichtgeschwindigkeit. • Geometrische Optik: Fermat-Prinzip, Reflexion und Brechung, optische Abbildung, optische Instrumente (Lupe, Fernrohr und Mikroskop), Abbildungsfehler. • Wellenoptik: Interferenz, Beugung, Polarisation. 						
<i>Elektrizität und Magnetismus:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Elektrizität: elektrische Ladung und elektrisches Feld, elektrisches Potenzial, Dipol und Kondensator, Materie im elektrischen Feld, elektrischer Strom und Stromkreise. • Magnetismus: Magnete und Magnetfelder, Kräfte auf bewegte Ladungen, Anwendungen (Wien-Filter, Hall-Effekt, Massenspektrometer), Erzeugung von Magnetfeldern, Materie im Magnetfeld. 						

- Elektromagnetismus: elektromagnetische Induktion und ihre Anwendungen, Stromkreise mit variierendem Strom (RC- und RL-Kreis, Wechselstromgrößen, Schwingkreis, Transformator), Hertz-Dipol und elektromagnetische Strahlung.

Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an der Vorlesung		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	90	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Anerkannte Lehrbücher zur Physik für Naturwissenschaftler (z.B. Tipler/Mosca, Giancoli, Halliday).			

Experimentalphysik Praktikum (Phys-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
3	90	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Experimentalphysik Praktikum		PExp	4	90	60	20
Modulverantwortliche:r	Dr. Götz Lehmann					
Beteiligte Dozierende	Dr. Götz Lehmann, Prof. Dr. D. Schumacher, Assistenten der Physik.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie			Pflicht		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • grundlegende physikalische Phänomene deuten, • einfache physikalische Experimente durchführen und diese rechnerisch auswerten. 						
Inhalte						
<i>Fehlerrechnung und Statistik:</i> Auswertung statistisch verteilter Messgrößen.						
<i>Mechanik:</i> Ausflussviskosimeter, Federwaage, Federpendel, Schall, Bestimmung der Wellenlänge durch Phasenvergleich, Amplitudenverteilung einer stehenden Welle, Bestimmung des Elastizitätsmoduls im Biegeversuch.						
<i>Wärmelehre:</i> Mischungskalorimeter, spezifische Wärmekapazität fester Körper, Zustandsgleichung idealer Gase.						
<i>Elektrizitätslehre:</i> Kennlinien elektrischer Leiter, Potentiometerschaltung, Wheatstonesche Brückenschaltung, Wechselstromwiderstände bei der Serienschaltung von R, L und C, R-C-Kombination als Hoch- und Tiefpass, Versuche mit dem Oszillographen.						
<i>Optik:</i> Brennweite dünner Linsen, sphärische und chromatische Abberation, Polarimeter, Malussches Gesetz, Saccharimetrie, Beugung und Interferenz am Gitter, Aufbau eines Mikroskopmodells.						
<i>Ionisierende Strahlung:</i> Nachweis und Schwächung von Röntgenstrahlung.						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul Phys.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Praktikum, erfolgreiche Durchführung aller Praktikumsversuche. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet			
			unbenotet			
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. http://www.gpphy.uni-duesseldorf.de/						
Literatur						
Dieter Geschke (Hrsg.), <i>Physikalisches Praktikum</i> , Spektrum, 10. Aufl., Wiesbaden, 1994 . H.J. Eichler, H.D. Kronfeldt, J. Sahn, <i>Das Neue Physikalische Grundpraktikum</i> , Springer, Berlin/Heidelberg, 2001 .						

Weitere Pflichtmodule

Pflichtmodul

Rechtskunde (ReKu)				Stand: 08.08.2022		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
3	90	1 Semester	WiSe/SoSe	1. - 6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Rechtskunde		V	2	90	30	250
Modulverantwortliche:r	Dr. M. Renner-Koch					
Beteiligte Dozierende	Dr. M. Renner-Koch					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie B. Sc. Biochemie			Pflichtmodul Pflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Grundlagen des Chemikaliengesetzes, der Gefahrstoffverordnung, der Chemikalienverbotsverordnung und der GHS-CLP-Verordnung einordnen und wiedergeben, grundlegende Verhaltensregeln zum sicheren Arbeiten im Labor anwenden, die Grundsätze der „Guten Wissenschaftlichen Praxis“ benennen und erläutern, wissenschaftliches Fehlverhalten identifizieren und vermeiden, erste wissenschaftliche Recherchen durchführen und Zitationsregeln anwenden. 						
Inhalte						
Gefahrstoffrecht:						
<ul style="list-style-type: none"> Gefahrstoffrecht in Europa und Deutschland. Chemikaliengesetz. Gefahrstoffverordnung. Chemikalienverbotsverordnung. GHS-CLP-Verordnung: Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung. Gefährdungsbeurteilung. Grundbegriffe der Toxikologie. Erste Hilfe bei Vergiftungen. 						
Gute Wissenschaftliche Praxis						
<ul style="list-style-type: none"> Wissenschaftssystem (in Deutschland). Normen und Werte der Guten Wissenschaftlichen Praxis. Qualitätskriterien für gute Wissenschaftliche Praxis. Wissenschaftliches Fehlverhalten. Literatursuche- und arbeit. Zitationsregeln. Umgang mit Daten und Quellen. 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an der Vorlesung. Erfolgreiche Teilnahme an den vier vorlesungsbegleitenden Ilias-Tests, welche innerhalb eines Semesters zu absolvieren sind.					
Zulassungsvoraussetzung	keine					

zur Modulprüfung			
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
			unbenotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>Rechtstexte.</p> <p>A. Schulz, Hörath. <i>Gefährliche Stoffe und Gemische</i>, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart, 8. Aufl., Stuttgart, 2015.</p> <p>H.F. Bender, <i>Das Gefahrstoffbuch. Sicherer Umgang mit Gefahrstoffen nach REACH und GHS</i>, Wiley VCH, 4. Aufl., Weinheim, 2013.</p> <p>L. Roth, M. Daunderer, <i>Erste Hilfe bei Chemikalienunfällen</i>, Ecomed Sicherheit, 9. erw. und aktual. Aufl., Heidelberg, 2012.</p> <p>Deutsche Forschungsgemeinschaft, <i>Leitlinien zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis</i>, 2019, https://zenodo.org/record/3923602#.YjSQezUxID9 (zuletzt abgerufen am 18.03.2022).</p> <p>Heinrich-Heine-Universität, <i>Ordnung über die Grundsätze zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf vom 30. Oktober 2020</i>, 2020, https://www.forschung.hhu.de/fileadmin/redaktion/ZUV/Dezer-nat_4/05_Wissenschaftliche_Integritaet/201030_GWP_Ordnung_2020.pdf (zuletzt abgerufen am 14.03.2022).</p>			

Modul des freien Wahlbereiches

Aktuelle Chemie (Akt-Che)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
1-2	30-60	1 Semester	WS/SS	3. - 6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Fachvorträge aus der Chemie		V		30-60	10-20	250
Modulverantwortliche:r	PA-Vorsitzende(r), Prof. Dr. C. Ganter					
Beteiligte Dozierende	Dozierende der WE Chemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Bedeutung des im Studium erworbenen Grundlagenwissens für aktuelle Forschungsthemen einschätzen, die Breite aktueller chemischer Forschungsthemen erkennen, persönliche Interessensgebiete innerhalb der Chemie besser identifizieren. 						
Inhalte						
Fachvorträge von Industrievertretern und Wissenschaftlern, die im Rahmen von Instituts- oder Fachgruppenvortragsreihen aktuelle Aspekte der Chemie vorstellen und erläutern.						
Teilnahmevoraussetzungen	Grundkenntnisse in anorganischer, organischer und physikalischer Chemie. Studierende sollten das 3. Fachsemester erreicht und mindestens 40 Leistungspunkte erworben haben.					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an Fachvorträgen. Für den Erwerb von einem Leistungspunkt muss <ul style="list-style-type: none"> der aktive Besuch von 5 Fachvorträgen testiert worden sein. UND zudem muss zu einem dieser Vorträge mit Textverarbeitung eine Zusammenfassung angefertigt werden, die beim jeweils Einladenden zur Kontrolle vorgelegt wird. Der Umfang der Zusammenfassung darf eine DIN-A4-Seite nicht unter- und 4 Seiten nicht überschreiten. Insgesamt können nicht mehr als 2 Leistungspunkte im Modul Aktuelle Chemie erworben werden.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Vortragsankündigungen finden sich auf den Internet-Seiten der Chemie.						
Literatur						

Wirkstoffe im modernen Pflanzenschutz				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
2	60	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Wirkstoffe im modernen Pflanzenschutz		V	2	60	24	24
Exkursion		Ex				
Modulverantwortliche:r		Hon.-Prof. Dr. P. Jeschke (Bayer CropScience AG)				
Beteiligte Dozierende		Hon.-Prof. Dr. P. Jeschke				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
Lernziele und Kompetenzen		Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls				
		<ul style="list-style-type: none"> • zu aktuellen Aspekten modernen Pflanzenschutzes sachkundig Stellung beziehen, • gebräuchliche Substanzklassen von Wirkstoffen im modernen Pflanzenschutz benennen. 				
Inhalte		<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Allgemeine Einführung in den Pflanzenschutz und Grüne Biotechnologie. • Insektizide Substanzklassen und deren Targets. • Fungizide Substanzklassen und deren Targets. • Herbizide Substanzklassen und deren Targets. • Chirale Wirkstoffe im Pflanzenschutz. • Patentschutz. <p><i>Exkursion nach Bayer-Forschungszentrum Monheim:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Vortrag: Moderne Strategien zur Auffindung neuer Wirkstoffe. • Besichtigung: ASV, HTS Analytics, Biologie Insecticides. 				
Teilnahmevoraussetzungen		Bestandene POC-Modulprüfung.				
Studienleistungen		Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		entfällt				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen		Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.				
Literatur						

Moderne Synthesemethoden				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
2	60	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Moderne Synthesemethoden		V	2	60	24	24
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. J. Pietruszka					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
•						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Teilnahmevoraussetzungen	Bestandene POC-Modulprüfung.					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						

Medizinische Chemie				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
2	60	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Medizinische Chemie		V	2	60	30	30
Exkursion		Ex				
Modulverantwortliche:r		Hon.-Prof. Dr. B. Riedl (Bayer AG, Bayer AG Drug Discovery)				
Beteiligte Dozierende		Hon.-Prof. Dr. B. Riedl				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
Lernziele und Kompetenzen		Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls				
		<ul style="list-style-type: none"> zu aktuellen Aspekten der industriellen Pharmaforschung sachkundig Stellung beziehen. 				
Inhalte		<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Wirkstoff-Forschung historisch betrachtet. Der Forschungs- und Entwicklungsprozess in der Pharmaindustrie. Target-Findung und Validierung. Leitstruktur-Identifizierung. <ul style="list-style-type: none"> a) HTS und Hit-to-lead Prozess. b) Alternative Ansätze zur Leitstrukturfindung. Leitstruktur-Optimierung. <ul style="list-style-type: none"> a) -Targetinteraktionen – Bioisostere – Prodrugs. b) -Pharmakokinetik und Wirkstoff-Metabolismus. c) -Patente. Klinische Entwicklung. <p><i>Exkursion zu Bayer HealthCare in Wuppertal</i></p>				
Teilnahmevoraussetzungen		Bestandene POC-Modulprüfung.				
Studienleistungen		Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		entfällt				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen		Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.				
Literatur						

Namensreaktionen				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
2	60	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Namensreaktionen		V	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Czekelius					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius					
Sprache	englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
•						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Teilnahmevoraussetzungen	Bestandene POC-Modulprüfung.					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						

Nachhaltigkeit in der Chemie (SUST)				Stand: 24.03.2021		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Freier Wahlbereich		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
4	120	1 Semester	WiSe	flexibel		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Nachhaltigkeit in der Chemie		V	2	60	30	30
SUST Praktikum		PExp	2	60	30	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. M. Schmitt					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. M. Schmitt					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie			Wahlpflichtbereich		
	B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden erwerben ein Verständnis für den Begriff der Nachhaltigkeit. • Sie lernen die Nachhaltigkeitsziele der UN kennen. • Nachhaltigkeitsinitiativen der chemischen Industrie werden in Beziehung zum Begriff der Nachhaltigkeit im Alltagsleben gesetzt. • Die Studierenden lernen Emissionen nach Scope 1 bis 3 zu bewerten. • Die Studierenden lernen die relevanten nationalen Gesetzgebungen zur Nachhaltigkeit kennen. • Sie diskutieren moderne Syntheseplanung anhand von Nachhaltigkeitsaspekten. • Sie lernen Nachhaltigkeitsaspekte der Polymere in Forschung und Anwendung. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Was verstehen wir unter Nachhaltigkeit? • Die globalen Nachhaltigkeitsziele der UN. • Initiativen der Industrie zur Nachhaltigkeit (Chemie3, HOCHN, Allianz für Entwicklung und Klima). • Erste Beispiele für Nachhaltigkeit aus unserem Alltagsleben. • Begrifflichkeiten aus dem Bereich der Abfallwirtschaft (Vermeidung, Wiederverwendung, Recycling, Verwertung, Deponierung), Darstellung am Beispiel der Polymere • Abfallpyramide, Abfallvermeidungsstrategien der EU. • Bewertung von Emissionen in der Industrie nach Scope 1 bis Scope 3. • Nationale Gesetzgebung (Kreislaufwirtschaftsgesetz, Bundesimmissionsschutzgesetz, Arbeitsschutzgesetz), Europäische Gesetzgebung, Direktiven der EU. • Was ist green chemistry? • Prinzipien der Circular Economy, Darstellung am Beispiel der Polymere • Syntheseplanung unter dem Aspekt der Nachhaltigkeit. • Begrifflichkeit der Atomeffizienz beziehungsweise Atomökonomie. • Nachhaltigkeit in der aktuellen Forschung an der HHU. • Beispiele für Nachhaltigkeit in Prozessen der chemischen Industrie, Gastvortrag aus der Industrie. 						
<i>Praktikum</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Chemisches Recycling von PET • Sammeln und Analyse von Mikroplastik • Trennung und Recycling von Lösungsmittelgemischen zur Rückgewinnung für den Laborgebrauch • Hydrolyse von Kunststoffen • Synthese von Treibstoffen und Polymeren aus nachwachsenden Rohstoffen 						

Teilnahmevoraussetzungen	Keine		
Studienleistungen (ggf. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung)	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur zum Gesamtmodul	90	unbenotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			
Sonstige Informationen			
Dieses Modul des freien Wahlbereichs kann durch ergänzende experimentelle Arbeiten im Bereich der makromolekularen Chemie oder der physikalischen Chemie zu einem Qualifizierungsmodul mit 8 LP erweitert werden. Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
https://www.chemiehoch3.de https://www.vci.de/themen/nachhaltigkeit/sustainable-development-goals/uebersicht.jsp https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/publikation/long/3734.pdf			

Bachelormodul

Bachelormodul				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
15	450	10 Wochen	jedes Semester	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Bachelorarbeit				360		
Bachelorvortrag				90		
Modulverantwortliche:r	Betreuer:in der Bachelorarbeit					
Beteiligte Dozierende	Hauptamtlich im Studiengang Chemie in Forschung oder Lehre tätige Mitglieder der Gruppe der Hochschullehrer:innen der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf; andere Personen benötigen die vorherige Zulassung durch den Prüfungsausschuss Chemie.					
Sprache	deutsch oder englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Mit der Bachelorarbeit belegen Studierende die Fähigkeit, innerhalb einer vorgegebenen Frist unter Anleitung der Betreuerin oder des Betreuers der Bachelor-Arbeit ein eng abgegrenztes chemisches Problem selbständig nach wissenschaftlichen Methoden zu bearbeiten, wissenschaftlich zu dokumentieren und öffentlich zu vertreten.						
Inhalte						
Die Inhalte der Bachelorarbeit sind abhängig vom gewählten Thema.						
Teilnahmevoraussetzungen	14 benotete Module des Curriculums B.Sc. Chemie müssen abgeschlossen sein.					
Studienleistungen	<p>Bachelorarbeit (benotet): Einarbeitung in ein eng abgegrenztes fachwissenschaftliches Problem inkl. Literaturrecherche, Anfertigung der schriftlichen Bachelorarbeit im Umfang von max. 40 Seiten.</p> <p>Bachelorvortrag (unbenotet): Präsentation der Ergebnisse der Bachelorarbeit im Rahmen eines Arbeitskreisminutens (ca. 20 Min.) mit anschließender Diskussion (ca. 10 Min.).</p>					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	schriftliche Abschlussarbeit			benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				30/180		
Sonstige Informationen						
Literatur						
Die verwendete Literatur ist abhängig vom gewählten Thema.						