

Wahlpflichtmodule des M. Sc. Chemie

Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie	1
Chemische Kristallographie (ChemKrist)	1
Festkörperchemie (FKC)	3
Supramolekulare Chemie (SupChem)	4
Vertiefte Aspekte aus Carben-Chemie und NMR-Spektroskopie (NHC-NMR).....	5
Nanochemie (NanoChem)	7
Anorganische Photoaktive Materialien (PhotMat)	8
Forschungsmodul in Anorganischer Chemie (FAC)	10
Module des Instituts für Biochemie	11
Proteinkatalysierter Membrantransport (MT)	11
From gene to in silico structure – the use of protein data bases (ISS).....	13
Physics and Biology of Protein Folding in Cellular Membranes	15
Vom Gen zum biotechnologischen Produkt (GenProd)	17
Molekulare Enzymologie (ME)	19
Biogenesis and Transport of Membrane Proteins (BTMP).....	21
Module des Instituts für Bioorganische Chemie.....	23
Biochemie der Naturstoffe (NatStoff-BC).....	23
Optimierungsverfahren in der Proteinherstellung (OptiProt)	25
Naturstoffsynthese I (NATSY 1)	26
Naturstoffsynthese II (NATSY 2)	27
Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie	28
Sequenzkontrollierte Polymere (SeqPol)	28
Angewandte Makromolekulare Chemie: a) großtechnische Prozesse b) Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe.....	30
Multikomponenten- und Dominoreaktionen (MCR).....	32
Synthese und Katalyse (SynKat)	34
Angewandte Organische Chemie (AOC).....	36
Wahlpflichtmodul in Organischer Chemie (WOC).....	38
Elektrosynthese (EISyn)	39
Enantioselektive Katalyse (EnKat)	41
Stereoselektive Synthese (SSSyn).....	43

Module des Instituts für Physikalische Chemie	45
Grundlagen der Umweltchemie (GUC)	45
Laserspektroskopische Techniken (LST)	47
Grundlagen der Nanooptik (GNO).....	49
Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden (SSPK)	51
Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)	53
Präperative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)	55
Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie (FMPC)	57
Numerische Methoden in der Chemie (NUM)	59
Forschungsmodul Physikalische Chemie (FoPC)	61
Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.....	62
Angewandte Quanten- und Computerchemie (AnQCCC)	62
Fortgeschrittene Quantenchemie (FQC)	64
Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela)	66
Wahlpflichtmodul Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn).....	68
Simulation von Biomolekülen (BioSim)	70

Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie

Chemische Kristallographie (ChemKrist)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 6 Wochen	SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Chemische Kristallographie		V	3	105	45	30
ChemKrist-Übung		Ü	1	45	15	30
ChemKrist-Praktikum		PExp	4	90	60	15
Modulverantwortliche:r	Dr. G. J. Reiß					
Beteiligte Dozierende	Dr. G. J. Reiß					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • vertiefende theoretischen Grundlagen der Kristallstrukturanalyse beschreiben. • einen umfassenden Überblick über die experimentellen Möglichkeiten zur Charakterisierung von Einzelkristallen und Kristallpulvern mittels Röntgenbeugung geben. • eine Kristallstrukturanalyse durchführen und dokumentieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Erzeugung von Röntgenstrahlen und Strahlenschutz. • Wellenkinematische Theorie der Röntgenbeugung, die Deutungen des Beugungsphänomens von Laue und Bragg. • Translationenbehaftete Symmetrieelemente. • Fourier-Reihen in der Kristallographie. • Experimentelle Methoden (Kristallzucht und -auswahl, kurze Einführung in die klassischen Filmmethoden, Vierkreisdiffraktometer, Imaging Plate- und CCD-Diffraktometer, Intensitätsdatensammlung). • Strukturlösung mit direkten Methoden bzw. Pattersonfunktion. • kritische Beurteilung der Ergebnisse von Kristallstrukturanalysen. • Pseudosymmetriephänomene. • Durchführung einer Kristallstrukturbestimmung und Erstellung einer CIF-Publikation. • Kristallgitter und Symmetrie. • Das Reziproke Gitter, die Ewald-Konstruktion, Atomformfaktoren und Strukturfaktoren • Systematische Auslösungen und die Bestimmung von Raumgruppen. • Optische Diffraktometrie. • Datenreduktion. • Strukturverfeinerung und Qualitätsindikatoren. • Kristallographische Datenbanken und Crystallographic Information Files. • Aperiodische Kristallstrukturen. • Grundlagen der Pulverdiffraktometrie und ihrer Meßmethoden, allgemeiner Informationsgehalt eines Röntgen-Pulverdiagramms. 						

<ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der Rietveld-Methode zur Kristallstrukturverfeinerung. • Peakprofilfunktionen, Korrekturfaktoren. • Fortschritt einer Rietveld-Verfeinerung (R-Faktoren). • Methoden der Datenreduktion eines Röntgen-Pulverdiagramms. • Modellierung eines Pulverdiagramms ohne Strukturmodell („LeBail Fit“). • Quantitative Phasenanalyse mit der Rietveld-Methode. 			
Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des ChemKrist-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
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 .			
H. Krischner, B. Koppelhuber-Bitschnau, <i>Röntgenstrukturanalyse und Rietveld-Methode</i> , Vieweg, 5., Neubearb. Aufl., Braunschweig, 1994 .			

Festkörperchemie (FKC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Spezielle Festkörperchemie		V	2	90	30	30
FKC-Seminar		Sem	1	30	15	30
FKC-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. W. Frank				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. W. Frank				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> aktiv mit den grundlegenden Aspekten der Vorlesung umgehen, ausgewählte Synthesemethoden der Festkörperchemie anwenden, spektroskopische und röntgenanalytische Analysen bei konkreten Fragestellungen anwenden. 						
Inhalte						
Vorlesung:						
<ul style="list-style-type: none"> Ausgewählte Substanzklassen aus dem Bereich der ionischen Verbindungen und der intermetallischen Systeme. Schichtmaterialien und partiell ungeordnete Festkörper. Keramische und „neue“ Syntheseverfahren. Festkörperanalytische Verfahren. 						
Praktikum:						
<ul style="list-style-type: none"> Synthese neuer Verbindungen aus der aktuellen Forschung. Röntgenographische und festkörperspektroskopische Charakterisierung. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC und AC-P.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FKC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Klausur	120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
1. U. Müller, <i>Anorganische Strukturchemie</i> , Vieweg+Teubner, 6., aktual. Aufl., Wiesbaden, 2008 . A. R. West, <i>Grundlagen der Festkörperchemie</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1992 . L. Smart, E. Moore, <i>Einführung in die Festkörperchemie</i> , Springer, Berlin/ Heidelberg, 1997 . C. Janiak, H. –J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, <i>Riedel. Moderne Anorganische Chemie</i> ; De Gruyter, 5. Aufl., Berlin/Boston, 2018 . 2. W. Massa, <i>Kristallstrukturbestimmung</i> , Teubner, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden 2007 . Aktuelle Literatur (Zeitschriften).						

Supramolekulare Chemie (SupChem)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Supramolekulare Chemie und Nicht-kovalente Bindung		V	2	90	30	20
SupChem-Seminar		Sem	1	30	15	20
SupChem-Praktikum		PExp	6	120	90	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. W. Frank				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. W. Frank				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Wirtschaftschemie		Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die unterschiedlichen Formen Nichtkovalenter Bindung erkennen und an Hand ihrer charakteristischen Geometrien und der Hierarchie ihrer Gitterenthalpiebeiträge in Feststoffen differenzieren und bewerten, die Bedeutung supramolekularer Assoziation für die Strukturen, Eigenschaften und Reaktivitäten ausgewählter Verbindungsklassen aus allen Bereichen der Chemie erkennen und erläutern. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Varianten der Nichtkovalenten Bindung (Bindungsgeometrien, Bindungsenthalpien, Bindungsordnungen von Wasserstoffbrückenbindungen, Sekundäre Element-Element-Bindungen; Metallion-Aromat-Wechselwirkungen, δ-δ-Stapelwechselwirkungen; Hydrophobe Wechselwirkungen). Molekulare Selbstorganisation. Crystal Engineering, Wirt-Gast-Systeme. Kationen- und Anionenselektive Rezeptoren. Chlathrate. Spezies-Engineering. Supramolekulare Assoziation als Hilfsmittel der Reaktionssteuerung. Einsatz des Crystal Engineering bei der Herstellung Anorganisch-Organischer Hybridmaterialien. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC und AC-P.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des SubChem-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Klausur	120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
J. W. Steed, J. L. Atwood, <i>Supramolecular Chemistry</i> , John Wiley & Sons, 3. Ed., Chichester, 2022 .						
G. R. Desiraju, <i>The Crystal as a Supramolecular Entity</i> , Wiley, Chichester/ New York, 1996 .						

Vertiefte Aspekte aus Carben-Chemie und NMR-Spektroskopie (NHC-NMR)				Stand: 13.01.2022		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 2 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
NHC-NMR		V	3	90	45	20
NHC-NMR-Seminar		Sem	2	60	30	20
NHC-NMR-Übung		Ü	4	90	60	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Ganter, PD Dr. K. Schaper				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Ganter, PD Dr. K. Schaper				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Wirtschaftschemie		Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Bedeutung und historische Entwicklung von Carbenen in der organischen und metallorganischen Chemie erläutern, • die unterschiedliche Stabilität und Reaktivität von Carbenen anhand ihrer chemischen Strukturen ableiten, • Beispiele für die Nutzung von Carbenen in organischen und metallorganischen Reaktionen geben, • die theoretischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie erläutern, • die Prozessierung von Messdaten beschreiben und anwenden, • NMR-Spektren, inkl. komplexer Spinsysteme, auswerten, • Komplexe NMR-Experimente beschreiben. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Singulett- und Triplett-Carbene. • Historische Entwicklung der Carbenchemie. • Frühe Versuche zur Isolierung von stabilen N-heterocyclischen Carbenen (NHCs), Wanzlick und Arduengo. • Stabilisierung, Charakterisierung und Bindungsverhältnisse von NHCs. • Mit NHCs verwandte Systeme (CAACs, PHCs). • Reaktivität von NHCs. • Anwendungen von NHCs in der Organo- sowie der metallorganischen Katalyse. • Theoretische Grundlagen der NMR-Spektroskopie. • Wichtige Messparameter in der NMR-Spektroskopie. • Prozessierung von Messdaten. • Auswertung von NMR-Spektren und komplexen Spinsystemen. • Theorie von komplexen NMR-Experimenten. 						
Teilnahmevoraussetzungen		BSc in Chemie; sinnvoll ist die vorherige Teilnahme am Master-Pflichtmodul AC.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übung. Seminarvortrag				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Seminarvortrags.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	

Stellenwert der Note für die Gesamtnote	8/135
Sonstige Informationen	
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.	
Literatur	
S. P. Nolan, <i>N-Heterocyclic Carbenes. Effective tools for organometallic synthesis</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2014 . Div. Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten.	

Nanochemie (NanoChem)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Nanochemie		V	1	40	15	20
NanoChem-Seminar		Sem	1	35	15	20
NanoChem-Praktikum		PExp	8	165	120	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Janiak					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Janiak					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> erworbene Kenntnisse und Methodenkompetenz auf dem Gebiet der nanoporösen und nanopartikulären Materialforschung anwenden, Synthese und Charakterisierung neuer nanoporöser und nanopartikulärer Materialien planen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Nanoporöse Materialien am Beispiel der Metall-organischen Netzwerke (MOFs): <ul style="list-style-type: none"> Einführung zu MOFs im Vergleich mit anderen porösen Materialien. Grundlegende MOF-Strukturen und deren Aufbau. Syntheserouten zu MOFs Materialien mögliche Anwendungen von MOFs. Nanopartikuläre Materialien: <ul style="list-style-type: none"> Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von Nanomaterialien. Methoden zur Visualisierung von Nanoteilchen. Metall-Nanopartikel in der Katalyse. 						
<i>Praktikum:</i> jeweils ausgewählte Reaktionen bzw. Versuche, die die Prinzipien der Vorlesungsinhalte verdeutlichen.						
Teilnahmevoraussetzungen	Studierende, die das Spezialisierungspflichtmodul AdMat besucht haben, können das Modul NanoChem nicht belegen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des NanoChem-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
VL-Präsentationen. Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten.						

Anorganische Photoaktive Materialien (PhotMat)				Stand: 01.02.2022		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung Anorgan. Photoaktive Mat.		V	2	90	30	30
Phot-Seminar		Sem	1	30	15	30
Phot-Praktikum*		PExp	6	120	90	15
*Anmerkung: Das Praktikum wird vsl. in der vorlesungsfreien Zeit als Blockpraktikum stattfinden.						
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	
		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 verschiedenen emittierenden Zentren in anorganischen Verbindungen differenzieren und beurteilen (Übergangsmetall-Ionen, s²-Ionen, Lanthanoide und Actinoide, Exzitonen), • die Funktion optischer Bauelemente und Voraussetzungen anorganischer photoaktiver Materialien für die Anwendung in diesen Elementen 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) • Einfluss äußerer Stimuli wie Druck und Temperatur auf die Lumineszenz • Vibronische Kopplung • Lumineszenz gängiger Übergangsmetalle (V³⁺, Cr³⁺, Mn^{2+/4+}, Fe^{2+/3+}, Co²⁺, Ni²⁺) • Lumineszenz der Lanthanoide und Actinoide • Lumineszenz der s²-Ionen (In⁺, Ga⁺, Sn²⁺, Pb²⁺, Sb³⁺, Bi³⁺) • exzitonische Lumineszenz in halbleitenden Nanokristallen und 2D-Schichtmaterialien (Binäre und ternäre Chalkogenide und Pnictide; Halogenidoperowskite und – elpasolite) • Lumineszenz von Farbzentren und Defekten (z.B. F-Zentren in Alkalihalogeniden, NV-Zentren in Diamanten) • Multiphotonenkonversion (Aufkonversion, Quanten-Cutting) • Nichtlineare optische Effekte (Frequenzvervielfachung und -mischung) und Voraussetzungen kristalliner Verbindungen dafür • Energietransfer und Energiemigration • Modellierung und theoretisches Verständnis optischer Übergänge • Moderne Anwendungen optischer Materialien mit Fokus auf Anforderungen: Phosphorkonvertierte LEDs & Farbd Displays, medizinische Bildgebung, optische Manometrie & Thermometrie, optische Informationsspeicher & Logikgatter, Festkörper-Laser und Laser-kühlung, 						

Photovoltaik, Photonik und Einzelphotonenquellen, zirkular polarisierte Lumineszenz (CPL) zur Charakterisierung chiraler Koordinationsverbindungen.

Praktikum:

- Synthese und optische Untersuchung ausgewählter, etablierter anorganischer Leuchtstoffe (mikro- und nanokristallin).
- Analyse und Vergleich der spektroskopischen Daten (steady-state, zeitaufgelöst) ausgewählter Leuchtstoffe.
- Leistungsabhängige Intensitätsbetrachtung eines Multiphotonenkonversions-Materials.
- Untersuchung und Modellierung eines einfachen Energietransfer-Prozesses.
- Evaluierung eines optischen Thermometers.

Seminar: Präsentation aktueller Fachpublikationen durch die Studierenden, ausgewählte Übungen zu vereinzelt Vorlesungsinhalten.

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Pflichtmodul AC und am Pflichtpraktikum AC oder äquivalente Studienleistung. Grundkenntnisse der Koordinationschemie und Quantenmechanik sind hilfreich.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
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 . Ausgewählte (Review-)Artikel aus der Fachliteratur.			

Forschungsmodul in Anorganischer Chemie (FAC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3,5 Wochen	WiSe/SoSe	2. oder 3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul in Anorganischer Chemie		Sem	2	60	30	20
FAC-Praktikum		PExp	7	180	105	10
Modulverantwortliche:r		Dozierende der Anorganischen Chemie.				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Anorganischen Chemie.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Wirtschaftschemie		Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen Anorganischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten. • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren. • für das Projekt relevante Fragestellungen formulieren. • geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten. • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters. Mögliche Themenbereiche sind:						
<ul style="list-style-type: none"> • MOFs und andere poröse Materialien. • Nanopartikel. • Carbenchemie. • Lumineszente Metallkomplexe. • Strukturchemie amphiphiler Verbindungen. • Aromat-Metall-Komplexe. • Crystal Engineering. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC und AC-P.				
Studienleistungen		Teilnahme am Seminar, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FAC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/135	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.						

Module des Instituts für Biochemie

Proteinkatalysierter Membrantransport (MT)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Membrantransport		V	3	120	45	30
Transporter und Carrier		PExp	7	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. L. Schmitt					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. L. Schmitt					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Biochemie				Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> wichtige zelluläre Membrantransportprozesse erklären, Struktur-/Funktionsbeziehung von stofftransportierenden Membranproteinen beschreiben, Membrantransportproteine isolieren, rekonstituieren und ihre katalytischen Eigenschaften bestimmen, wissenschaftliche Fragestellungen formulieren und Strategie zur Klärung entwickeln. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Primär/sekundär aktive Membrantransporter:						
<ul style="list-style-type: none"> Vorkommen und physiologische Bedeutung in Pro- und Eukaryoten, Mechanismen auf der Grundlage der Protein(kristall)strukturen. Funktion und physiologische Bedeutung von Ionenkanälen. Strukturelle Grundlagen für ihre Aktivität, Selektivität und Regulation, Signalübertragung durch membranständige Rezeptoren. Proteintransportsysteme in Pro- und Eukaryoten (Sec, Proteinsekr. Typ I-IV). Proteinfaltung und Chaperone. 						
<i>Praktikum:</i>						
Drogenresistenz von ausgewählten Hefestämmen, Aufreinigung ausgewählter ABC-Transporter bzw. ihrer Domänen, Analyse der Kooperativität, Solubilisierungsstrategien, Charakterisierung der basalen und Substrat-stimulierten ATPase Aktivität in Detergenzlösung, Rekonstitution, qualitative und quantitative Charakterisierung von Proteoliposomen, Bestimmung der ATPase -Aktivität rekonstituierter ABC-Transporter.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, Grundkenntnisse in Biochemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum, Berichte zu den Praktikumsversuchen, Mündliche Präsentation.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Transporter und Carrier“					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		60	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
Aktuelle Reviews und Originalpublikationen nach Mitteilung.

From gene to in silico structure – the use of protein data bases (ISS)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
5*	150	Block, 2 Wochen	WiSe (Präsenz) SoSe (online)	3. oder 4.		
<i>Anmerkung:</i> Es besteht die Möglichkeit, dieses Wahlpflichtmodul auch für 8 LP durchzuführen, sodass es als vollwertiges Wahlpflichtmodul gerechnet werden kann. Wenden Sie sich dazu an den Modulverantwortlichen.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Protein Data Bases		V	2	70	30	30
From Gene to in silico structure		Üb	3	80	45	30
Modulverantwortliche:r		Dr. S. Smits				
Beteiligte Dozierende		Dr. S. Smits				
Sprache		englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang	Modus			
		M. Sc. Biochemie	Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Proteine mit Hilfe von Internetdatenbanken und darin implementierten Programmen analysieren, • die gängigen Algorithmen zur Sequenzanalysen erklären, • ihre Analyseergebnisse in Englisch präsentieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • DNA Sequenzierung (Methoden, Ansätze, Vor- und Nachteile). • Identifizierung von open reading frames. • Sequenzalignments und Datenbanken (Modelle, Vor- und Nachteile). • FASTA und BLAST. • Datenbanken für 1-, 2- und 3-dimensionales Suchen. • Literaturrecherchen. • Datenbanksuchen mit „Profilen“. • Spezialisierte Websites – Proteinidentifikation, -funktion und –aufbau. • Multiple Sequenzalignments. • In silico Proteinanalyse: Identifikation, Funktion, Targeting, Topologievorhersage, Posttranslationale Modifikationen, Transfer Sequenz/Struktur, Homologiesuche, Homologiemodellierung. 						
<i>Übungen:</i> Vom DNA-Segment zum Protein und dessen Funktion/Struktur; Präsentation der Resultate der Übungen						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, Grundkenntnisse in Biochemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Strukturvorhersage und -analyse eines Proteins basierend auf der Gensequenz, Mündliche Präsentation der Versuchsergebnisse.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		entfällt				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Diskussion zur Präsentation	30	unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Online-Anleitung wird bei Anmeldung zugänglich.						

Literatur

Aktuelle Reviews und Originalpublikationen nach Mitteilung.

Physics and Biology of Protein Folding in Cellular Membranes				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung		V	3	135	45	15
Praktikum		PExp	5	105	75	15
Modulverantwortliche:r		Jun.-Prof. Dr. A. Kedrov				
Beteiligte Dozierende		Jun.-Prof. Dr. A. Kedrov				
Sprache		englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Physikalische und biochemische Grundlagen von Membranproteinfaltung erklären, • Methoden in der Membranproteinfaltung und Stabilitätsforschung beschreiben, • Sec-Komponenten und Ribosomen isolieren, rekonstituieren und ihre funktionelle Eigenschaften bestimmen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Thermodynamics of MP folding • biophysical analysis of MP folding. • MP targeting in bacteria and eukaryotes. • folding in bacterial outer membranes. • folding in mitochondria and peroxisomes. • designing <i>de novo</i> membrane proteins, macromolecular crowding in membranes. • protein:protein and protein:lipid interactions. • spontaneous insertion in biology. • structure and dynamics of Sec and YidC-type insertases. • tail-anchored proteins. • membrane protein misfolding and degradation, ERAD. 						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Isolation and liposome/nanodisc reconstitution of the Sec:YidC machinery. • isolation of ribosome:nascent chain complexes (RNC). • analysis of nascent chain contacts by chemical cross-linking. • analysis of Sec-mediated protein translocation. • studying RNC:signal recognition particle or RNC:Sec/YidC interactions. • purification and analysis of MP intermediates. 						
Methods: bacterial cell culture, membrane isolation, chromatography-based purification, SDS-PAGE & western blotting, ATPase assay, ultra- and zonal centrifugation, fluorescence spectroscopy assays, incl. Förster's resonance energy transfer-based kinetic measurements, cell-free protein synthesis and assembly.						
<i>Seminar:</i>						
Preparing and presenting a publication on a relevant topic.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, Grundkenntnisse in Proteinbiochemie und Biophysik werden empfohlen.				

Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum; Anfertigung von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Schriftliche Abschlussprüfung	30	benotet (70 %)
	Mündliche Präsentation	30	benotet (30 %)
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Literatur			
Will be provided upon the registration and along the course.			

Vom Gen zum biotechnologischen Produkt (GenProd)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vom Gen zum biotechnologischen Produkt		V	2	75	30	30
GenProd-Seminar		Sem	1	45	15	30
GenProd-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. V. Urlacher					
Beteiligte Dozierende	Dr. K. Koschorreck, Dr. M. Girhard.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • den Einsatz von Enzymen in der Biotechnologie beschreiben, • Methoden zur Expression rekombinanter Proteine beschreiben und anwenden, • Methoden zur chromatographischen Aufarbeitung von Enzymen wiedergeben und anwenden, • Grundlegende Methoden zur Bestimmung enzymatischer Aktivität durchführen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Vergleich von verschiedenen prokaryotischen und eukaryotischen Expressionssystemen (<i>Escherichia coli</i>, <i>Bacillus</i>, <i>Pseudomonas</i>, <i>Streptomyces</i>, <i>Pichia</i>, <i>Saccharomyces</i>, Baculoviren, tierische und pflanzliche Zellen, zellfreie Expression). • Aufarbeitung von Proteinlösungen (Filtrations- und Fällungsmethoden). • Aufreinigung von Proteinen über chromatographische Methoden (Ionenaustausch, hydrophobe Interaktion, Affinität, Gelfiltration). • Methoden der Produktaufarbeitung. 						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Grundlegende Techniken und Methoden zur Herstellung rekombinanter Proteine. • Vergleich der Expression in pro- und eukaryotischen Mikroorganismen am Beispiel von Oxidoreduktasen. • Kultivierung von rekombinanten Mikroorganismen in Schüttelkolben und im 5 L-Fermenter. • Aufreinigung und Charakterisierung der Enzyme bezüglich Aktivität und Produktspektrum. • Enzymkatalysierte Oxidation von hydrophoben Substraten und phenolische C-C-Kopplung. • Produktaufarbeitung. 						
<i>Seminar:</i> Präsentation aktueller Publikationen zum Thema „Rekombinante Expression und Aufreinigung von Enzymen“ durch die Studierenden.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, Grundkenntnisse in Molekularbiologie, Mikrobiologie und Biochemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag im Seminar.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des GenProd-Praktikums.					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Mündliche Einzelprüfung	30-45
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Literatur			
Semesteraktuelle Skripte zur Vorlesung und zum Praktikum.			
Aktuelle Reviews und Originalpublikationen nach Mitteilung.			
G. Walsh, <i>Proteins: Biochemistry and Biotechnology</i> , Wiley-Blackwell, 2. Ed, Chichester, 2014 .			
R. D. Schmid, V. B. Urlacher, <i>Modern Biooxidation: Enzymes, Reactions and Applications</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2007 .			

Molekulare Enzymologie (ME)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Molekulare Enzymologie		V	2	75	30	30
ME-Seminar		PExp	6	120	90	15
ME-Praktikum		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortliche		Prof. Dr. V. Urlacher				
Beteiligte Dozierende		Dr. M. Girhard				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie (anteilig)			Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Mechanismen und die Kinetik enzymkatalysierter Reaktionen erklären, • Hintergründe enzymatischer Selektivität wiedergeben, • UV/VIS Spektrometrie zur Analyse enzymatischer Reaktionen anwenden, • GC/MS Spektren interpretieren, • eigene experimentelle Daten vor dem Hintergrund aktueller Literaturdaten beurteilen und bewerten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Reaktionsmechanismen und Kinetiken, sowie Struktur-Funktionsbeziehungen von biotechnologisch relevanten Enzymen. • Molekularer Hintergrund enzymatischer Regio-, Chemo- und Stereoselektivität. • Vertiefung in die Methoden der biochemischen Analytik. 						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Überblick über Methoden der Biotransformation und Biokatalyse. • Mutagenese (rationales Proteindesign) sowie Bestimmung enzymatischer Aktivität von freien und immobilisierten Oxidoreduktasen und Hydrolasen. • Ermittlung von kinetischen Konstanten. • Anwendung moderner analytischer Methoden (UV/VIS-Spektroskopie, Gaschromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie) zur quantitativen und qualitativen Bestimmung von Produkten enzymatischer Reaktionen. • Untersuchung der Regio-, Chemo- und Enantioselektivität von Enzymen. 						
<i>Seminar:</i> Vorstellung und Diskussion der wesentlichen Ergebnisse und der Methodik der einzelnen Versuche sowie Vergleich mit Literaturdaten in einem Ergebnisvortrag.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, Grundkenntnisse und experimentelle Fähigkeiten in Biochemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag im Seminar.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des ME-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		60	benotet	
Stellenwert der Note				8/135		

Literatur

Semesteraktuelle Skripte zur Vorlesung und zum Praktikum.

H. Bisswange, *Enzymkinetik: Theorie und Methoden*, Wiley-VCH, 3., völlig neu bearb. Aufl., Weinheim, **2000**.

A. S. Bommarius, B. Riebel-Bommarius, *Biocatalysis. Fundamentals and Applications*, Wiley-VCH, Weinheim, **2004**.

Biogenesis and Transport of Membrane Proteins (BTMP)				Stand: 01.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe*	3.		
<i>Anmerkung: Auf Anfrage können die Termine entsprechend angepasst werden und damit auch in das SoSe verschoben werden.</i>						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Function and intracellular transport of ion channels		V	2	90	30	
Functional expression and visualization of a voltage-activated calcium channel complex		PExp	5	150	90	6
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. P. Hidalgo					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. P. Hidalgo					
Sprache	Englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie; M.Sc. Biochemistry International			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Biologie; M.Sc. Biology International			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>After successful completion of the course, the students know</p> <ul style="list-style-type: none"> the theory and methods of membrane proteins biogenesis and intracellular transport, the importance of intracellular transport processes in health and disease, experimental strategies to study function and expression of ion channels, quantitative analysis of the protein movement inside the cell. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Structure and function of voltage-activated ion channels. Molecular mechanisms underlying biogenesis. Intracellular transport and function of calcium channels. <p><i>Praktikum:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Expression of ion channels and current recordings using the „whole-cell patch clamp technique“ in cultured cells. Fluorescence labelling of cytoskeletal filaments (tubulin and actin) and different components of the trafficking machinery. Fluorescence labelling of purified proteins for microscale thermophoresis studies. Live-cell imaging from cells expressing voltage-activated calcium channels using spinning-disc microscopy, and quantitative analysis of the intracellular movement of the channel complex. Detection of heterologously expressed channel subunits in cytosolic and membrane-associated fractions by electrophoresis and fluorescence scanning. <p><i>Seminar:</i> Oral presentations of experimental results.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	No previous knowledge is expected, but basic-knowledge in Cell Biology and sufficient command of English is recommended.					
Studienleistungen	Participation throughout the lectures and practical course, Oral presentation.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Successful completion of the practical course.					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Oral presentation	20	benotet (50%)
	Written Report	-	benotet (50%)
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Current information can be found at ILIAS and HIS-LSF.			
Literatur			
Actual reviews and original articles will be provided at the beginning of the course.			

Module des Instituts für Bioorganische Chemie

Biochemie der Naturstoffe (NatStoff-BC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die Naturstoffbiosynthese		V	1	25	15	30
Naturstoffisolation-Seminar		Sem	2	45	30	30
Naturstoffe-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozierende	Dr. Thomas Classen					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	B.Sc./M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
	B.Sc./M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Die Studierenden können die wichtigsten Naturstoffklassen der Sekundärmetabolite benennen und Schlüsselschritte der Biosynthese wiedergeben. Exemplarisch behandelte Naturstoffe können bezüglich ihrer biologischen sowie deren pharmakologische Funktionen eingeordnet werden. Die Studierenden können diverse Laborreinigungsoptionen technisch durchführen. Durch Abwägen der Vor- und Nachteile einer Reinigungsoperation für ein komplexes Stoffgemisch können die Studierende eine Isolationsstrategie konzeptionieren. Die Studierenden können die Identität der Isolate mithilfe physikalisch/chemischer Analyseverfahren nachweisen und den Reinheitsgehalt quantifizieren</p>						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Biosynthese wichtiger Naturstoffklassen. • Prinzipien der Biosynthese. • Vergleich zwischen Primär- und Sekundärmetabolismus. <p><i>Praktikum:</i> Isolation verschiedener Naturstoffe aus diversen Frisch- und Trockenpräparate mithilfe diverser Isolationstechniken. Die Identität der Isolate soll analysiert werden, sowie deren Gehalt quantifiziert werden.</p> <p><i>Seminar:</i> In Form von Praktikum begleitenden Kolloquien sollen die Studierenden sowohl die verwendeten Isolationstechniken als auch die Eigenschaften der behandelten Präparate den Kommilitonen vorstellen.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Grundkenntnisse der Biochemie sowie der organischen Chemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Vorbereitung eines Kolloquiums.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Naturstoffisolation“					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/135	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						

Literatur

J. McMurry, T. P. Begley, *Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, **2006**.

Skriptum zum Praktikum.

Optimierungsverfahren in der Proteinherstellung (OptiProt)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die biotechnologische Proteinproduktion		V	1	25	15	30
OptiProt-Seminar		Sem	2	45	30	30
OptiProt-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. J. Pietruszka				
Beteiligte Dozierende		Dr. S. Meyer zu Berstenhorst				
Sprache		deutsch, englisch (Seminarvortrag)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biologie			Wahlmodul	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden können Faktoren zur effizienten Erzeugung von Produktionsstämmen für Proteine benennen, kritisch evaluieren und eigenständig Strategien zur zielgerichteten Entwicklung von Produktionsstämmen anwenden. Die Studierenden wählen geeignete Analysemethoden, um die Qualität der einzelnen Proteinvarianten zu beurteilen. Diese Analysen werden eigenständig ausgewertet und kritisch reflektiert.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Erzeugung und Optimierung von prokaryotischen und eukaryotischen Produktionsstämmen. • Vergleich verschiedener Fermentationstechniken und Anwendung in der Biotechnologie. 						
<i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Erzeugung von Produktionsstämmen, vergleichender Fermentation und Funktionsanalyse der produzierten Proteine.						
<i>Seminar:</i> Besprechung von relevanten Originalpublikationen durch die Studierenden.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber praktische Fähigkeiten und Kenntnisse in Biochemie und Molekularbiologie werden empfohlen				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Seminarvortrag.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
H. Rehm, T. Letzel, <i>Der Experimentator - Proteinbiochemie/Proteomics</i> , Springer Spektrum Verlag, 7. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2016.						
H. Sahm, G. Antranikian, K-P. Stahmann, R. Takors, <i>Industrielle Mikrobiologie</i> , Springer Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2013.						

Naturstoffsynthese I (NATSY 1)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe und SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die Naturstoffsynthese		V	1	25	15	30
Naturstoffsynthese 1-Seminar		Sem	2	45	30	30
Naturstoffe-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r		Prof. J. Pietruszka				
Beteiligte Dozierende		Dr. S. Meyer zu Berstenhorst				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erkennen Schlüsselschritte für die Syntheseplanung von (einfachen) Naturstoffen. Die Schlüsselreaktionen werden von ihnen theoretisch verstanden und in der Laborpraxis umgesetzt.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Konzepte zur Retrosynthese. • Entwicklung von Synthesestrategien für einfache Naturstoffe (z. B. β-Lactam-Antibiotika). • Totalsynthese. • Physiologische Eigenschaften. • Schutzgruppenstrategien. • Schlüsselreaktionen. • Biosynthese. 						
<i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Synthese von Schlüsselbausteinen der organischen Synthese.						
<i>Seminar:</i> Vorträge zu den Projekten.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber praktische Fähigkeiten und Kenntnisse in der Synthesechemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.				
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1996 .						
K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2003 .						
J. McMurry, T. P. Begley, <i>Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege</i> , Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2006 .						

Naturstoffsynthese II (NATSY 2)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe und SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Naturstoffsynthese 2		V	1	25	15	30
Naturstoffsynthese 2 - Praktikum		PExp	6	170	90	12
Naturstoffe - Seminar		Sem	2	45	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozierende	Dr. S. Meyer zu Berstenhorst					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erwerben Kenntnisse und experimentelle Fähigkeiten zur (Bio)synthese und Retrosynthese von komplexen Naturstoffen. Die Studierenden wenden analytische Methoden (NMR, IR, MS, Enantiomerenanalytik) in der Praxisphase an Fallbeispielen an, werten die Spektren selbstständig aus und können eine Strukturzuordnung anhand der experimentellen Daten durchführen. Sie schätzen die analytischen Limitierungen kritisch ein.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> Besprechung ausgewählter komplexer Zielverbindungen (z.B. Polyketide):						
<ul style="list-style-type: none"> • Physiologisches Target • Synthesestrategien • Totalsynthese • Biosynthese • Erörterung mechanistischer und methodischer Details zu anspruchsvollen Syntheseschritten 						
<i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Synthese von Schlüsselbausteinen für die Naturstoffsynthese, Durchführung längerer Reaktionssequenzen.						
<i>Seminar:</i> Besprechung von aktuellen Originalarbeiten.						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an NATSY 1					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Seminarvortrag.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1996 .						
K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2003 .						
J. McMurry, T. P. Begley, <i>Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege</i> , Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2006 .						

Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie

Sequenzkontrollierte Polymere (SeqPol)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 7 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Sequenzkontrollierte Polymere - Synthese (A)		V	2	60	30	30
Sequenzkontrollierte Polymere - Anwendung (B)		V	2	60	30	30
SeqPol-Übung		Üb	2	120	30	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. L. Hartmann				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. Hartmann, Dr. M. Tabatabai, Dozierende der Makromolekularen Chemie.				
Sprache		deutsch/ggf. Englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Herausforderungen bei der Synthese und potenzielle Anwendungen von sequenzkontrollierten Polymeren benennen, • Methoden zur Synthese von sequenzkontrollierten Polymeren wiederholen und bewerten, • Synthesen und Anwendungen von sequenzkontrollierten Polymeren entwickeln. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Teil A: Einführung in das Thema						
<ul style="list-style-type: none"> • Definitionen. • Kurzer Rückblick auf die Entwicklung. • Synthetische Methoden zur Erzeugung sequenzkontrollierter Polymere, u.a. Insertionsreaktionen, <i>Templating Polymerizations</i>, Festphasensynthesen. 						
Teil B:						
<ul style="list-style-type: none"> • Anwendungsbereiche sequenzkontrollierter Polymere u.a. in Biomedizin, Datenspeicherung und Katalyse. • Methoden der Charakterisierung der Sequenz von Polymeren wie z.B. MS/MS und Chromatographie. 						
<i>Übung:</i> In den Übungen werden die Inhalte der Vorlesungen durch Präsentationen der Teilnehmer über aktuelle Forschungsthemen vertieft.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber solide Kenntnisse (Theorie und Praxis) in Organischer Chemie und Makromolekulare Chemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Vortrag über ein aktuelles Beispiel der Literatur und den theoretischen Hintergrund.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		keine				

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Klausur	120
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
J.-F. Lutz, T.Y. Meyer, M. Ouchi, M. Sawamoto (Eds.), <i>Sequence-controlled polymers: Synthesis, self-assembly, and properties</i> (ACS Symposium Series 1170), American Chemical Society, New York, 2014 .			

Angewandte Makromolekulare Chemie: a) großtechnische Prozesse b) Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Großtechnische Prozesse in der Organischen und Polymer-Chemie (GTS)		V	2	60	30	30
Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe (PoWW)		V	2	60	30	30
GTS-PoM-Übung		Üb	2	120	15	30
Modulverantwortliche:r	Dr. M. Tabatabai, Prof. Dr. S. Schmidt.					
Beteiligte Dozierende	Dr. M. Tabatabai, Prof. Dr. S. Schmidt.					
Sprache	Deutsch /ggf. englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> aktuelle Aufgaben der industriellen Synthese angeben, Prozesswege von niedermolekularem Ausgangsstoffe zur makromolekularen Produkt benennen, Materialeigenschaften von Commodity Polymeren und Blends und die Erzeugung gewünschter Eigenschaftsprofile benennen, molekulare Mechanismen der Interaktion von Makromolekülen mit biologischen Systemen identifizieren und wiedergeben, Synthesen und Anwendungen von Funktionspolymeren in der Biomedizin entwickeln. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung (GTS):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Stammbaum der chemischen Prozesse, von der Kohle bis zum Polymer, C1 bis C8 Chemie und Folgeprodukte. Herstellung von Arzneimitteln, Vitaminen und industrieller Polymere. 						
<i>Vorlesung (PoM):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Wirtschaftliche Bedeutung, physikalische Zustände und chemische Eigenschaften von Polymeren. Erzeugung spezifischer Eigenschaftsprofile für die Medizin (Mechanik, Responsivität und Interaktivität mit biologischer Materie). Polymere in der Medizin als Werkstoff (Medizintechnik, Implantat) und Wirkstoff (Wirkstoffvermittler, -transporter, Sequestrant, Inhibitor). 						
<i>Übung:</i> In den Übungen werden die Inhalte der Vorlesungen durch Präsentationen der Teilnehmer über aktuelle Forschungsthemen vertieft.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber solide Kenntnisse (Theorie und Praxis) in organischer Chemie und Makromolekulare Chemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übung.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		

Sonstige Informationen

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

Literatur

K. Weissermel, H.-J. Arpe, *Industrial Organic Chemistry*, Wiley-VCH, 4., completely rev. Ed., Weinheim, **2003**.

H. Domininghaus, *Kunststoffe. Eigenschaften und Anwendungen*, Springer, 8., neu bearb. und erw. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2012.

R. Satchi-Fainaro, R. Duncan (Eds.), *Polymer Therapeutics I and II. Polymers as Drugs, Conjugates and Gene Delivery Systems* (Advances in Polymer Science Vol. 192 and 193), Springer, Berlin/Heidelberg, **2006**.

F. Puoci, *Advanced Polymers in Medicine*, Springer, Cham, **2015**.

Multikomponenten- und Dominoreaktionen (MCR)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Multikomponenten- und Dominoreaktionen		V	2	75	30	30
MCR-Seminar		Sem	1	45	15	30
MCR-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Biochemie M. Sc. Wirtschaftschemie		Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> komplexe Synthesen unter Berücksichtigung diversitätsorientierter Aspekte planen und experimentell durchführen, Synthesestrategien und Synthesen komplexer Moleküle kompetent beurteilen und evaluieren, mechanistischen Diskussionen komplexer Synthesen folgen und sich daran mit angemessenen Beiträgen beteiligen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Begrifflichkeiten. Reaktive Funktionalitäten. Michael-Additionen. Cycloadditionen. Metallvermittelten und metallkatalysierten Reaktionen. Reaktivitätsbasierte Konzepte. Multikomponentenreaktionen auf Basis von Carbonylverbindungen, Iminen, Iminiumionen. Isonitrilen. Radikalreaktionen. Homo- und Hetero-Domino-Reaktionen. 						
<i>Praktikum:</i> Ausgewählte Literaturpräparate zu Multikomponenten- und Dominoreaktionen.						
<i>Seminar:</i> Diskussion relevanter Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche.						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen MoPoS und MoPoS-P. Kenntnis der Inhalte des Moduls MoBiCa wird empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag über ein bearbeitetes Projekt und dessen theoretischen Hintergrund.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des MCR-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]		benotet/unbenotet
		Mündliche Einzelprüfung		30-45		benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen.						

Literatur

Übersichtsartikel MCR:

- L. Levi, T. J. J. Müller, *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 2825.
S. Hassan, T. J. J. Müller, *Adv. Synth. Catal.* **2015**, *357*, 617.
T. J. J. Müller, *Top. Heterocycl. Chem.* **2010**, *25*, 25.
B. Willy, T. J. J. Müller, *Curr. Org. Chem.* **2009**, *13*, 1777.
J. D. Sunderhaus, S. F. Martin, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 1300.
B. B. Touré, D. G. Hall, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 4439.
N. Isambert, R. Lavilla, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 8444.
D. M. D'Souza, T. J. J. Müller, *Chem. Soc. Rev.* **2007**, *36*, 1095.
G. Guillena, D. J. Ramón, M. Yus, *Tetrahedron: Asymmetry* **2007**, *18*, 693.

Übersichtsartikel Dominoreaktionen:

- J. Muzart, *Tetrahedron* **2013**, *69*, 6735.
T. J. J. Müller, *Synthesis* **2012**, 159.
T. Vlaar, E. Ruijter, R.V. A. Orru, *Adv. Synth. Catal.* **2011**, *353*, 809.
A. de Meijere, P. von Zezschwitz, S. Bräse, *Acc. Chem. Res.* **2005**, *38*, 413.
G. Battistuzzi, S. Cacchi, G. Fabrizi, *Eur. J. Org. Chem.* **2002**, 2671.
L. F. Tietze, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 115.
L. F. Tietze, U. Beifuss, *Angew. Chem.* **1993**, *105*, 137.

Monographien

- J. Zhu, H. Bienaymé, (Hrsg.), *Multicomponent Reactions*, Wiley-VCH, Weinheim, **2005**.
J. Zhu, Q. Wang, M.-X. Wang (Hrsg.), *Multicomponent Reactions in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2015**.
L. F. Tietze, G. Brasche, K. M. Gericke, *Domino Reactions in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.
T. J. J. Müller (Hrsg.), *Multicomponent Reactions Vol. 1 und Vol. 2* (Science of Synthesis Series), Thieme Verlag, Stuttgart, **2014**.

Synthese und Katalyse (SynKat)				Stand: 15.05.2017		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Synthese und Katalyse		V	2	75	30	30
SynKat-Seminar		Sem	1	45	15	30
SynKat-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • katalytische Methoden bei der Syntheseplanung berücksichtigen und zielführend anwenden, • Reaktionssequenzen unter Beteiligung katalytischer Syntheseschritte durchführen, • katalytische Synthesestrategien und Synthesen komplexer Moleküle kompetent beurteilen und evaluieren, • mechanistischen Diskussionen komplexer Synthesesequenzen folgen und sich daran mit angemessenen Beiträgen beteiligen. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <p>Metallorganische Katalyse (keine Lewis-Säure-Katalyse, keine Hydrierungen):</p> <ul style="list-style-type: none"> • Kupplungsreaktionen jenseits des Palladiums (Fe, Cu, Rh, Ir). • Metathese (Ru, Mo, W). • Cyclooligomerisierung (Co, Rh, Pd, Au). • Cyclopropanierung (Rh, Cu). • CH-Aktivierung (Ru, Cu-Click). • Additionen (Pd, Ru, Au). <p>Organokatalyse</p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der metallfreien Katalyse. • Aldol-Reaktion, Mannich-Reaktion, Diels-Alder-Reaktion, Michael-Addition. • Stetter-Reaktion, Baylis-Hilman-Morita-Reaktion. <p><i>Praktikum:</i> Ausgewählte Literaturpräparate zur Metall- und Organokatalyse.</p> <p><i>Seminar:</i> Diskussion relevanter Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen MoPoS und MoPoS-P. Kenntnis der Inhalte des Moduls MoBiCa wird empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag über ein bearbeitetes Projekt und dessen theoretischen Hintergrund.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SynKat-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		

Sonstige Informationen

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

Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen

Literatur

L. S. Hegedus, *Organische Synthese mit Übergangsmetallen*, Wiley-VCH, Weinheim, **1995**.

A. Berkessel, H. Gröger, *Asymmetric Organocatalysis. From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2005**.

A. de Meijere, F. Diederich (Hrsg.), *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions*, Wiley-VCH, 2., completely rev. and enl. Ed., Weinheim, **2004**.

D. Steinborn, *Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse*, Springer, 3., überarb. und erw. Aufl., Berlin, **2019**.

O. M. Kuzmina, A. K. Steib, A. Moyeux, G. Cahiez, P. Knochel, *Synthesis* **2015**, 47, 1696.

F. Monnier, M. Taillefer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 6954.

J. F. Hartwig, L. M. Stanley, *Acc. Chem. Res.* **2010**, 43, 1461.

S. Hassan, T. J. J. Müller, *Adv. Synth. Catal.* **2015**, 357, 617.

D. L. J. Broere, E. Ruijter, *Synthesis* **2012**, 44, 2639.

E. Jiménez-Núñez, A. M. Echavarren, *Chem. Rev.* **2008**, 108, 3326.

Praktikumsskript.

Angewandte Organische Chemie (AOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	2.		
Anmerkung: Das Modul kann nur gewählt werden, wenn es noch nicht im Bachelorstudium als Qualifizierungsmodul belegt wurde. Zudem ist die Zahl der verfügbaren Plätze auf Grund der Qualifizierungsmodulteilnehmer begrenzt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
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)			Wahlpflichtmodul		
	B. Sc. Chemie			Qualifizierungsmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<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. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Synthesestrategien. • Retrosynthetische Analyse. • Syntheseplanung. • wichtige Transformationen von funktionellen Gruppen. 						
<i>Praktikum:</i>						
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.						
Abschließend in einer Arbeitsgruppe Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt						
Im <i>Seminar</i> werden relevante Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche diskutiert.						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen MoPoS und MoPoS-P. Kenntnis der Inhalte des Moduls MoBiCa wird empfohlen.					
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
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
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>			

Wahlpflichtmodul in Organischer Chemie (WOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe/SoSe	2. oder 3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
WOC-Seminar		Sem	2	90	30	20
WOC-Praktikum		PExp	6	150	90	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.				
Sprache		deutsch/ggf. englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang	Modus			
		M. Sc. Biochemie	Wahlpflichtmodul			
		M. Sc. Wirtschaftschemie	Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • ein kleineres Forschungsprojekt konzipieren und Projektziele definieren, • eine zielgerichtete Literaturrecherche unter Nutzung moderner Hilfsmittel durchführen, • notwendige Experimente durchführen und auswerten, • Projektergebnisse in angemessener Form verschriftlichen, • Projektergebnisse in einem öffentlichen Vortrag zusammenfassen und in einer Sachdiskussion erläutern. 						
Inhalte						
Planung und Durchführung eines Forschungsprojektes unter Anleitung eines/einer Doktoranden/Doktorandin:						
<ul style="list-style-type: none"> • Definition des Projektes. • Recherche der relevanten Literatur. • Planung und Durchführung der Experimente. • Spektroskopische Analyse der Produkte und Bewertung der Ergebnisse. • Planung des weiteren Projektverlaufs. • Anfertigung eines Abschlussberichts und Präsentation der Ergebnisse im Mitarbeiterseminar. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber solide Kenntnisse in organischer Synthesechemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme am AK-Seminar, sachgerechte Laborarbeit, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des WOC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Mündliche Einzelprüfung beim jeweiligen AK-Leiter	30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen.						
Literatur						
Übersichtsartikel und aktuelle Originalpublikationen zum Projektthema.						

Elektrosynthese (EISyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit Enantioselektiver Katalyse (EnKat) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Elektrosynthese		V	2	60	30	12
EISyn-Seminar		Üb	1	30	15	12
EISyn-Praktikum		PExp	6	150	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Czekelius					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> den Aufbau verschiedener Elektrosynthesezellen sowie den Einfluss von Elektrodenmaterialien, Leitsalz und Lösungsmitteln erklären, die mechanistischen Grundlagen der Elektrodenoberflächenprozesse erläutern, Cyclovoltammetrie-Messungen durchführen sowie die Ergebnisse mechanistisch interpretieren, Elektrosynthesen im präparativen Maßstab durchführen, Vorteile und Nachteile von Elektrosynthesen im industriellen Maßstab benennen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Redoxverhalten organischer Verbindungen, Redoxpotential, physikalische Grundlagen, Cyclovoltammetrie, reversible und irreversible Prozesse, Oberflächen- und Doppelschichtprozesse. Oxidationen und Reduktionen mit elektrischem Strom, Decarboxylierungen und Cyclisierungen. Zellaufbau, Elektrodenmaterial und -orientierung, Bedeutung von Lösungsmittel und Leitsalz. Verwendung von Modifiern, gekoppelte Katalysatorsysteme, Opferelektroden. Elektrosynthese in ungewöhnlichen Medien. Elektrosynthese im industriellen Maßstab. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von elektrochemischen Problemen und mechanistische Betrachtungen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Durchführung verschiedener oxidativer und reduktiver Elektrosyntheseverfahren. Evaluierung unterschiedlicher Elektrodenmaterialien. Verwendung wässriger und nichtwässriger Lösungsmittel. Cyclovoltammetriemessungen. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des EISyn-Praktikums.					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Mündliche Einzelprüfung	30-45
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
C.H. Hamann, W. Vielstich, <i>Elektrochemie</i> , Wiley-VCH, 4. Aufl., Weinheim, 2005 .			
W. Schmickler, <i>Grundlagen der Elektrochemie</i> , Vieweg, Berlin, 2000 .			
R. Holze, <i>Elektrochemisches Praktikum</i> , Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2001 .			

Enantioselektive Katalyse (EnKat)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Semester	WiSe	3.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit Elektrosynthese (EISyn) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Enantioselektive Katalyse		V	2	60	30	10
EnKat-Seminar		Sem	1	30	15	10
EnKat-Praktikum		PExp	6	150	90	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Czekelius					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die grundsätzlichen Probleme bei der mechanistischen Beschreibung enantioselektiver katalytischer Transformationen wiedergeben, die Möglichkeiten der Elektrophilaktivierung über chirale Lewissäuren beschreiben und auf verschiedene Substrate anwenden, mögliche Katalysatoren für eine Nucleophilaktivierung benennen, doppelte Nucleophil- und Elektrophilaktivierung mechanistisch erläutern, mehrere Methoden zur enantioselektiven Olefinoxidation benennen und erläutern. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Mechanistische Grundlagen der enantioselektiven Katalyse: Die Halpern-Studie. Aktivierung von Carbonylverbindungen durch chirale Lewissäuren. Aktivierungsmodi (Einpunkt- bzw. Zweipunktbindung), anwendbare Substrate, Einschränkungen. Nucleophilaktivierung durch chirale Übergangsmetallkomplexe. Doppelte Aktivierung von Nucleophil und Elektrophil, enthalpische und entropische Kontrolle, nichtlinearer Selektivitätsverlauf. Organokatalyse. Ausgewählte enantioselektive Oxidationsreaktionen von ungesättigten Kohlenwasserstoffen. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von stereochemischen Problemen anhand aktueller Naturstoffsynthesen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Darstellung und Anwendung chiraler Katalysatoren für enantioselektive Epoxidierungsreaktionen von Allylalkoholen und nichtaktivierten Olefinen. Enantioselektive Dihydroxylierungsreaktionen. Moderne Analysemethoden zur Bestimmung der Enantioselektivität. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen MoPoS und MoPoS-P.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des EnKat-Praktikums.					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Mündliche Einzelprüfung	30-45
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
F. A. Carey, R. J. Sundberg, <i>Organische Chemie – Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 .			
M. B. Smith, <i>March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure</i> , J. Wiley & Sons, 7. Ed., New York, 2013 .			
I. Ojima (Hrsg.), <i>Catalytic Asymmetric Synthesis</i> , J. Wiley & Sons, 3. Ed., Hoboken, 2010 .			
E. J. Corey, L. Kürty, <i>Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic, and Practice</i> , Elsevier Science, 2013 .			
H. Yamamoto (Hrsg.), <i>Lewis Acids in Organic Synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2000 .			

Stereoselektive Synthese (SSSyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Stereoselektive Synthese		V	2	60	30	15
SSSyn-Seminar		Sem	1	30	15	15
SSSyn-Praktikum		PExp	6	150	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Czekelius				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Czekelius				
Sprache		Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • diastereoselektive Reaktionen erkennen und mechanistisch erläutern, • den Einfluss von Stereozentren auf den stereochemischen Verlauf einer nucleophilen Carbonyladdition erkennen und anhand des Felkin-Anh-Modells erläutern, • den stereochemischen Verlauf der Enolatbildung und ihre Alkylierung erklären, • die Grundprobleme stereoselektiver Aldol-Reaktionen erläutern und beobachtete Produktselektivitäten nachvollziehen, • den Typus von Allylierungs- und Crotylierungsreagenzien erkennen und daraus die Produktselektivität ableiten, • den Einfluss dirigierender Gruppen auf den stereoselektiven Verlauf von Oxidationsreaktionen darstellen, • die Einflüsse mehrerer Stereozentren auf die Diastereoselektivität einer Reaktion abschätzen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Addition von Nucleophilen an Carbonylverbindungen mit α-Stereozentrum: Das Felkin-Anh-Modell. • Stereoselektivität der Enolatbildung und Selektivität der Enolat-Alkylierung. • Die Aldolreaktion: Probleme, Übergangszustände, chirale Auxiliare, syn- und anti-selektive Aldolreaktionen. • Stereoselektivität von Allylierungen und Crotylierungen, Typ I-III-Reagenzien. • Dirigierende Effekte und Diastereoselektivität in Epoxidierungen und Dihydroxylierungen sowie verwandten Oxidationsreaktionen. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von stereochemischen Problemen anhand aktueller Naturstoffsynthesen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Anwendung chiraler Auxiliare bei der stereoselektiven Allylierung von Propionsäure. • Stereoselektive Reduktionsverfahren von Ketonen. • Moderne Analysemethoden zur Verfolgung des stereochemischen Verlaufs von Reaktionen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen MoPoS und MoPoS-P.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen von Protokollen.				

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SSSyn-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
F. . A. Carey, R. J. Sundberg, <i>Organische Chemie – Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 .			
M. B. Smith, <i>March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure</i> , J. Wiley & Sons, 7. Ed., New York, 2013 .			
E. M. Carreira, L. Kvaerno, <i>Classics in Stereoselective Synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2009 .			
M. Braun, <i>Modern Enolate Chemistry. From Preparation to applications in asymmetric synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2016 .			
T.-L. Ho, <i>Stereoselectivity in Synthesis</i> , John Wiley & Son Inc., New York, 1999 .			

Module des Instituts für Physikalische Chemie

Grundlagen der Umweltchemie (GUC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Umweltchemie		V	2	60	30	50
GUC Seminar		Sem	1	45	15	30
GUC Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. M. Schmitt					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. M. Schmitt					
Sprache	Deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Eigenständige Anwendung von in den Grundvorlesungen der Physikalischen Chemie erworbenen Fähigkeiten in der Thermodynamik, Kinetik und Spektroskopie auf Fragestellungen in der Umweltchemie. Befähigung zur vernünftigen Abschätzung von Größenordnungen physikochemischer Prozesse in der Umwelt. Befähigung zur Beurteilung von Modellvorstellungen.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Aufbau der Atmosphäre. • Physik der Atmosphäre (Temperatur- und Druckverlauf, Chemie der Atmosphäre, Kinetische Modellierungen, der natürliche Treibhauseffekt, der anthropogene Treibhauseffekt, das stratosphärische Ozonloch, Emission und Verhinderung von Schadgasen durch Industrie, Emission und Verhinderung von Schadgasen durch Verkehr, Luftanalytik, Abfallbehandlung, Anreicherung von Schadstoffen). • Energieverbrauch/Energieerzeugung Prinzipien regenerativer Energiequellen. 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Umweltchemie. • Mathcad-Übungen zu ausgewählten Problemen der Umweltchemie. 						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Anwendung spektroskopischer Techniken zur Messung und Quantifizierung von Spurengasen. • Versuche zur Energieeffizienz. • Versuche zum Abbau von Schadstoffen. • Versuche zum Strahlungshaushalt der Erde 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen. Anfertigung von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des GUC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/135	

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
A. Heinz, G. A. Reinhard, Chemie und Umwelt. Ein Studienbuch für Chemiker, Physiker, Biologen und Geologen, Vieweg, 4., aktual. und erw. Aufl., Braunschweig, 1996 . K. Voß, <i>Umweltchemie. Eine Einführung für Studium und Praxis</i> , Springer, Berlin, 1997 .

Laserspektroskopische Techniken (LST)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.-4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Umweltchemie		V	2	60	30	50
LST Seminar		Sem	1	45	15	30
LST Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. M. Schmitt					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. M. Schmitt					
Sprache	Deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> • Kritisches Verständnis und Bewertung spektroskopischer Methoden • Theoretisches Design und Konzipieren von spektroskopischen Experimenten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Laser. • Polarisation. • Spektrometer und Interferometer Frequenzstabilisierung. • Absorptionsspektroskopie. • Optogalvanische Spektroskopie. • Raman-Spektroskopie. • Ionisationsspektroskopie Fluoreszenzspektroskopie. • Detektoren. • Interferenz. • Dopplerbegrenzte Spektroskopie mit Lasern Linienprofile. • Photoakustische Spektroskopie. • Cavity Ring Down Spectroskopie. • Nichtlineare Ramanspektroskopie. • Dopplerfreie Techniken. 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Spektroskopie. • Mathcad-Übungen. 						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Laserspektroskopie an düsenstrahlgekühlten Molekülen. • Ausgewählte Versuche zur Fluoreszenzspektroskopie (statisch, zeitaufgelöst). • Ausgewählte Versuche zur Ionisationsspektroskopie. 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen. Anfertigung von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des LSC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet			
	Klausur	45	benotet			
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
W. Demtröder, <i>Laserspektroskopie</i> , Springer, 6., aktualisierte Aufl., Berlin, 2011 .						
G. Herzberg, <i>Einführung in die Molekülspektroskopie. Die Spektren und Strukturen von einfachen freien Radikalen</i> , Steinkopf Verlag, Darmstadt, 1971.						

G. Herzberg, K.-P. Huber, *Molecular spectra and molecular structure 3. Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules*, D. van Nostrand Co. Inc., 2 Ed., New York, **1991**.

Grundlagen der Nanooptik (GNO)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Nanooptik		V	2	60	30	30
GNO-Seminar		Sem	1	45	15	30
GNO-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Matthias Karg					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Matthias Karg					
Sprache	Deutsch, englisch auf Wunsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen lokalisierter sowie koppelnder plasmonischer Resonanzen wiedergeben, • die Grundlagen excitonischer Zustände in Halbleiternanopartikeln wiedergeben, • Unterschiedliche Nah- und Fernfeldkopplungsereignisse nachvollziehen, • Experimentelle Spektren auswerten und interpretieren, • Struktur-/Eigenschaftsbeziehungen in plasmonischen Superstrukturen ableiten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Edelmetallnanopartikel. • Oberflächenpolaritonen. • Exctionische Zustände. • Drude-Modell. • Einführung in die optischen Eigenschaften von Edelmetallnanostrukturen. • Interferenzen. • Extinktionsspektroskopie. • Halbleiternanopartikel (Quantum dots). • Oberflächenplasmonen • Absorption und Streuung. • Resonanzkopplung. • Erzeugung von geordneten Nanostrukturen. • Gitterkopplung 						
<i>Seminar:</i> Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Nanooptik.						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
Es werden verschiedene Aspekte der Nanooptik an teilweise selbst-synthetisierten sowie, in Superstrukturen assemblierten, plasmonischen Nanopartikeln durch beispielhafte experimentelle und theoretische Versuche veranschaulicht. Einfache spektroskopische Verfahren werden zur Untersuchung angewandt und die Ergebnisse durch einfache theoretische Simulationen unterstützt.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Lehrveranstaltungen, Protokolle zum Praktikum, Seminarvortrag.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des GNO-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse:
<http://www.karg.hhu.de/unsere-lehre.html>

Literatur

- D. Vollath, *Nanomaterials. An introduction to synthesis, properties and applications*, Wiley-VCH, 2. Aufl., Weinheim, **2013**.
G. Schmid, *Nanoparticles. From theory to application*, Wiley-VCH, 2., completely rev. and updated Ed., Weinheim, **2010**.
S. V. Gaponenko, *Introduction to Nanophotonics*. Cambridge University Press, Cambridge, **2010**.
S. A. Maier, *Plasmonics – Fundamentals and Applications*, Springer, New York, **2007**.
D. Sarid, W. Challener, *Modern Introduction to Surface Plasmons. Theory, Mathematica Modeling, and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, **2010**.

Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden (SSPK)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden		V	2	60	30	30
SSPK-Seminar		Sem	1	45	15	30
SSPK-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Matthias Karg					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Matthias Karg					
Sprache	Deutsch, englisch auf Wunsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Polymer- und Kolloidchemie wiedergeben, • die Grundlagen der Wechselwirkung verschiedener Strahlungsformen mit Materie nachvollziehen, • die Grundlagen verschiedener Streumethoden wiedergeben, • Experimentelle Streukurven auswerten und interpretieren, • Strukturinformationen aus Streudaten ableiten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Einführung zu Polymeren und Kolloiden:						
<ul style="list-style-type: none"> • Definition, Herstellung, Stabilität, Anwendung. • Charakterisierungsmethoden. • Aufbau und Eigenschaften. 						
Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie:						
<ul style="list-style-type: none"> • Absorption, Streuung, Reflektion, Beugung. • Dynamische Lichtstreuung. • Kleinwinkellichtstreuung. • Statische Lichtstreuung. • Depolarisierte dynamische Lichtstreuung. 						
Neutronen- und Röntgen-Kleinwinkelstreuung:						
<ul style="list-style-type: none"> • Strahlungserzeugung. • Formfaktor. • Kontrastvariation. • Streuquerschnitt. • Strukturfaktor. • Zeitaufgelöste Experimente. 						
<i>Seminar:</i> Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Strukturaufklärung.						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
Es werden verschiedene Aspekte der Kolloid- oder Polymersynthese, der Lichtstreuung, der Mikroskopie und Bildauswertung sowie der Handhabung von Streudaten bzw. Realraumdaten durch beispielhafte experimentelle und theoretische Versuche veranschaulicht.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Lehrveranstaltungen, Protokolle zum Praktikum, Seminarvortrag.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SSPK-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse: http://www.karg.hhu.de/unsere-lehre.html			
Literatur			
H.-D. Dörfler, <i>Grenzflächen und kolloid-disperse Systeme</i> , Springer, Berlin, 2002 .			
H.-J. Butt, K. Graf, M. Kappl, <i>Physics and Chemistry of Interfaces</i> , Wiley-VCH, 3., rev. and enl. Ed., Weinheim, 2006			
W. Brown, <i>Dynamic Light Scattering. The Method and Some Applications</i> , Clarendon Press, Oxford, 1993 .			
M. Hendrix, A. Leipertz, <i>Photonenkorrelationsspektroskopie</i> , <i>Physik in unserer Zeit</i> , 1984 , 3, 68.			
J. S. Higgins, H. Benoit, <i>Polymers and Neutron Scattering</i> , Clarendon Press, Oxford, 1994 .			
D. S. Sivia, <i>Elementary Scattering Theory. For X-ray and neutron users</i> , Oxford University Press, Oxford, 2011 .			

Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)		V	2	60	30	30
FSCB-Seminar		Sem	1	45	15	30
FSCB-Praktikum		PEXP	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. Peter Gilch				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. Peter Gilch				
Sprache		Deutsch oder englisch nach Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biologie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Med. Physik			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Bedeutung zeitaufgelöster Verfahren in der modernen physikalisch-chemisch und bio-physikalischen Forschung; Laserbasierte Messtechnik insbesondere Femtosekunden-Techniken; Chemische und biologische Prozesse auf kurzen Zeitskalen; Einarbeitung in aktuelle wissenschaftliche Literatur; Konzeption, Durchführung und Dokumentation eines Forschungsprojekts.						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Zeitskalen physikalisch-chemischer Prozesse.						
2. Methoden der zeitaufgelösten Spektroskopie im Überblick.						
3. Messverfahren der Femtosekunden-Spektroskopie.						
<ul style="list-style-type: none"> • Funktionsprinzip des Lasers. • Titan-Saphir-Laser und Verstärker. • Frequenz-Konversion / Nicht-lineare Optik. • Modenkopplung. • Charakterisierung von Femtosekunden-Impulsen. • Verfahren der Detektion: Absorption, Fluoreszenz, IR, Raman, etc. 						
4. Physikalische Prozesse im Femtosekunden-Bereich.						
<ul style="list-style-type: none"> • Dynamik versus Kinetik. • Nicht-strahlende Prozesse. • Wellenpaketsbewegungen. • Dynamische Solvatation. 						
5. Chemische Prozesse im Femtosekunden-Bereich.						
<ul style="list-style-type: none"> • Elektrontransfer und Marcus-Theorie. • Isomerisierungen. • Proton- und Wasserstofftransfer. 						
6. Biologische Prozesse im Femtosekunden-Bereich.						
<ul style="list-style-type: none"> • Photosynthese. • DNA-Photoschäden. • Sehprozess. 						
<i>Seminar</i>						
In Zusammenarbeit mit dem Dozierende werden aktuelle Originalarbeiten aus dem Themenbereich der Vorlesung ausgewählt und von den Studierenden vorgestellt.						

Praktikum			
Im Praktikum (Block) wird ein ausgewähltes photo-reaktives Molekül zunächst von den Studierenden mit Verfahren der stationären Spektroskopie charakterisiert. Anschließend wird es unter enger Betreuung durch die Mitarbeiter des Arbeitskreises mit Femtosekunden-Methoden vermessen.			
Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen, Anfertigung von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des FSCB-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
C. Rullière (Hrsg.), <i>Femtosecond Laser Pulses. Principles and experiments</i> , Springer, 2. Aufl., New York, 2005 .			
J.-C. Diels, W. Rudolph, <i>Ultrashort Laser Pulse Phenomena. Techniques, and applications on a femtosecond time scale</i> , Academic Press, 2. Ed., Amsterdam, 2006 .			
D. Meschede, <i>Optik, Licht und Laser</i> , Vieweg+Teubner, 3. Aufl., Wiesbaden, 2008 .			
R. W. Boyd, <i>Nonlinear Optics</i> , Academic Press, 3. Ed., Amsterdam, 2008 .			
A. Nitzan, <i>Chemical Dynamics in Condensed Phases. Relaxation, Transfer, and Reactions in Condensed Molecular Systems</i> (Oxford Graduate Texts), Oxford University Press, Oxford, 2006 .			
P. Klán, J. Wirz, <i>Photochemistry of Organic Compounds. From Concepts to Practice</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009 .			
L. O. Björn (Hrsg.), <i>Photobiology: The Science of Life and Light</i> , Springer, 3. Ed., New York, 2009 .			
Ausgewählte Original- und Übersichtsarbeiten.			

Präperative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Präperative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)		V	2	60	30	30
PSP-Praktikum		PExp	6	135	90	15
PSP-Seminar		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Peter Gilch, PD Dr. Klaus Schaper					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Peter Gilch, PD Dr. Klaus Schaper					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wunsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Angeregte Zustände als elektronische Isomere erkennen; Bedeutung der Photochemie in Technologie und Industrie beschreiben; Photochemische Arbeitsweisen und Messtechniken erlernen; Sicherer Umgang mit aktueller wissenschaftlicher Literatur; Forschungsprojekt konzipieren, durchführen und dokumentieren.						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Absorption und Emission.						
2. Nicht-strahlende Prozesse.						
3. Ratenkonstanten und Quantenausbeuten.						
4. Magnetfeldeffekte.						
5. Methodische Aspekte der präparativen Photochemie.						
6. Transferprozesse.						
7. Woodward-Hoffmann-Regeln in der Photochemie.						
8. Photoreaktionen von Carbonylverbindungen.						
9. Industrielle Anwendungen.						
10. Photolithographie.						
11. Photolabile Schutzgruppen.						
<i>Seminar</i>						
In Zusammenarbeit mit dem Dozierende werden aktuelle Originalarbeiten aus dem Themenbereich der Vorlesung ausgewählt und von den Studierenden vorgestellt.						
<i>Praktikum</i>						
Das Blockpraktikum wird entweder mit präparativem Schwerpunkt in der AG Schaper oder mit spektroskopischem in der AG Gilch abgeleistet. Im präparativen Praktikum werden photochemische Synthesetechniken erlernt und angewandt. Im spektroskopischen Praktikum werden Moleküle hinsichtlich Quantenausbeuten und anderer photochemischen Parameter charakterisiert.						
Teilnahmevoraussetzungen	Studierende, die das Spezialisierungspflichtmodul MPESP besucht haben, können das Modul PSP nicht belegen.					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen, Anfertigung von Protokollen, Vortrag im Seminar.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des PSP-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Das Modul ist Teil der Forschungsschule MPESP, kann aber auch als eigenständiges Modul belegt werden.			
Literatur			
P. Klán, J. Wirz, <i>Photochemistry of Organic Compounds. From Concepts to Practice</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009 . N.J. Turro, V. Ramanurthy, J.C. Scaino, <i>Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules</i> , University Science Books, Sausalito, 2010 .			

Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie (FMPC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe/SoSe	2. oder 3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie		Sem	2	80	30	20
FMPC-Praktikum		PExp	8	160	120	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Claus Seidel					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Claus Seidel					
Sprache	Deutsch/ Englisch (nach Absprache)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen molekularen physikalischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten, • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren, • für das Projekt relevante Fragestellungen formulieren, • durch Kenntnisse in den theoretischen Grundlagen geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten, • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt in einem der verschiedenen Schwerpunktbereiche je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters.						
Mögliche Schwerpunktbereiche sind:						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Entwicklung und Charakterisierung von Fluoreszenzsonden. 2. Fluoreszenzspektroskopie zur Charakterisierung von Nanomaterialien und biologischen Systemen. 3. Höchst-aufgelöste Fluoreszenzmikroskopie zur Charakterisierung von Nanomaterialien und biologischen Systemen. 4. Biophysikalische Charakterisierung der Strukturbildung, Dynamik, und Stabilität von Biomolekülen (insbesondere Proteine und Nucleinsäuren). 						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber die Kenntnis von Themen, wie sie z.B. in den Modulen GPC und GPC-P vermittelt werden, wird vorausgesetzt.					
Studienleistungen	Teilnahme am Seminar, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des FMPC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						

Literatur

Grundlagenwissen aus von dem Dozierende benannten Lehrbüchern (Fluoreszenzspektroskopie, Mikroskopie und biophysikalischen Chemie / Biophysik), Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.

Numerische Methoden in der Chemie (NUM)				Stand: 17.07.2022		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung Numerische Methoden		V	3	135	45	30
Programmierübung		PExp	6	105	90	10
Modulverantwortliche:r		Jun. Prof.-Dr. Jan Meisner				
Beteiligte Dozierende		Jun. Prof.-Dr. Jan Meisner				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach Besuch der Veranstaltung die relevanten						
<ul style="list-style-type: none"> • physikalisch-chemische Fragestellungen selbständig mathematisch formulieren und eine geeignete Lösungsmethode wählen, • Grundlegende und fortgeschrittene numerische Methoden verstehen und implementieren, • die von ihnen erhaltenen Ergebnisse auswerten und visualisieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Programmieren (z.B. Fortran). • Least-Squares Fitting zur Lösung von linearen Gleichungssystemen. • Lösung von Eigenwertgleichungen. • Interpolation und Extrapolation von Daten • Bestimmung von Null- und Extremstellen. • Newton-Raphson-Verfahren. • Numerische Differentiation und Integration. • Lösung von Differentialgleichungen. • Visualisierung (Python, Matlab oder Mathematica). 						
Anwendungen auf molekulare Fragestellungen:						
<ul style="list-style-type: none"> • Geometrieoptimierung. • Molekulardynamik. • Minimum-Energiepfade. • Mikrokinetische Modellierung. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber fundierte Kenntnisse der „Mathematischen Methoden in der Chemie“ sind hilfreich.				
Studienleistungen		Bearbeitung von Übungen im Rahmen des Computerpraktikums inklusive Protokolle, Seminarvortrag.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen.				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Mündliche Einzelprüfung	45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						

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**.

Forschungsmodul Physikalische Chemie (FoPC)				Stand: 08.01.2019		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe/SoSe	2. oder 3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul Physikalische Chemie		Sem	2	60	30	20
FoPC-Praktikum		PExp	7	180	105	10
Modulverantwortliche:r		Dozierende der Physikalischen Chemie				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Physikalischen Chemie				
Sprache		deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Wirtschaftschemie M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen Physikalischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten, • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren, • geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten, • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber die Kenntnis von Themen, wie sie z.B. in den Modulen GPC und GPC-P vermittelt werden, wird vorausgesetzt.				
Studienleistungen		Teilnahme am Seminar und an Vorträgen aus dem Pool „Physikalisch-Chemisches Kolloquium“ sowie „GdCh Vorträge“, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und werden zu Modulbeginn mit den Teilnehmenden erörtert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FoPC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/135	
Sonstige Informationen						
http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html						
Literatur						
Grundlagenwissen aus von dem Dozierende benannten Lehrbüchern, Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.						

Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie

Angewandte Quanten- und Computerchemie (AnQCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 1. Semesterhälfte	SoSe	2.		
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	Prof. Dr. C. M. Marian					
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. Chemie B. Sc. Informatik M. Sc. Wirtschaftschemie				Qualifizierungsmodul Qualifizierungsmodul 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. 						
Inhalte						
<ol 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, Zustandssummen 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	Keine, aber die Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, wird vorausgesetzt. Das Modul kann nicht belegt werden, wenn es bereits im Bachelorstudien-gang als Qualifizierungsmodul absolviert worden ist.					
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				8/135		

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.

C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, Wiley, 2. Ed., Chichester, **2004**.

Fortgeschrittene Quantenchemie (FQC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände		V	2	90	30	250
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie		V	1	45	15	250
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände		Üb	1	45	15	30
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie		Üb	1	45	15	30
Ausgewählte Kapitel der Theoretischen Chemie		Sem	1	15	15	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. M. Marian					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Wirtschaftschemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Informatik				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Physik				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Mathe				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie wiedergeben, • die Gruppentheorie auf Kernbewegungen, Molekülorbitale und Elektronenspins anwenden, • entscheiden, welche Übergänge zwischen Zuständen erlaubt sind, • Grundzüge der variations und störungstheoretischen Verfahren herleiten, • Methoden zur Berechnung angeregter Zustände korrekt beurteilen und auswählen, • Umgebungseffekte in Berechnungen berücksichtigen, • Wahrscheinlichkeiten für elektronische Übergänge berechnen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände</i>						
1. Optimierung von Molekülorbitalen (HF, CASSCF, DFT).						
2. Elektronenstrukturmethoden für angeregte Zustände.						
2.1. Variationsverfahren (CI, CIS, DFT/MRCI).						
2.2. Störungstheoretische Verfahren (CASPT2).						
2.3. Response-Methoden (TDHF, TDDFT, RICC2).						
3. Umgebungseffekte auf elektronische Spektren.						
4. Dipolübergänge und Oszillatorstärken.						
5. Spin-Bahn-Kopplung, Phosphoreszenz, Intersystem crossing.						
<i>Vorlesung Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie</i>						
1. Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik.						
2. Molekülpunktgruppen.						
3. Reduzible und irreduzible Darstellungen, Charaktere, Orthogonalitätstheorem, Projektionsoperatoren.						

4. Symmetrie von Wellenfunktionen und Operatoren.			
5. Auswahlregeln für Übergänge zwischen molekularen Zuständen.			
6. Drehimpulse, Kommutatoren.			
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber die Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, wird vorausgesetzt. Das Modul kann nicht belegt werden, wenn bereits das Modul MPESP belegt wurde.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Seminar und an den Übungen, erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.			
Literatur			
A. Szabo, N. Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory</i> , Dover Publications, Inc., Mineola, 2000 .			
D. M. Bishop, <i>Group Theory and Chemistry</i> , Dover Publications, Inc., New York, 1993 .			

Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe, jedes 2. Jahr	3.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit dem Wahlpflichtmodul Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Relativistische Quantenchemie		V	2	90	30	30
Relativistische Quantenchemie		Üb	1	45	15	30
Relativistische Quantenchemie		PExp	6	105	75	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. M. Marian					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.					
Sprache	deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die grundlegenden Konzepte Relativitätstheorie wiedergeben, • den Weg zur Dirac-Gleichung skizzieren und die Bedeutung ihrer Lösungen analysieren, • den Weg zu ein- und zweikomponentigen Näherungen beschreiben, • beurteilen, wann die Anwendung relativistischer Methoden notwendig ist, • Ein- und Zweielektronen-Spin-Bahn-Operatoren gegenüberstellen, • Übergangswahrscheinlichkeiten für spinverbotene Übergänge berechnen, • Rechnungen mit den in der Arbeitsgruppe gängigen Programmen durchführen und interpretieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Relativistische Effekte, Dirac-Coulomb-Gleichung, No-Pair-Näherung, Skalarrelativistische Effekte, Effektive Rumpfpotentiale.						
2. Elektronische Spin-Bahn-Kopplung: Operatoren, Auswahlregeln, Spinabhängige Effekte.						
3. Fluoreszenz- und Phosphoreszenzraten.						
<i>Praktikum</i>						
Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden, werden vorausgesetzt.					
Studienleistungen	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Rela-Praktikums und erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.						

Literatur

M. Reiher, A. Wolf, *Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science*, Wiley-VCH, 2. Ed., Weinheim, **2009**.

K. G. Dyall, K. Faegri, *Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*, Oxford Univ Press, New York, **2007**.

C. M. Marian, "Spin-Orbit Coupling and Intersystem Crossing in Molecules", *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, [2\(2012\)](#), 187–203.

C. M. Marian, „Spin-orbit coupling in molecules“ in: *Reviews in Computational Chemistry* (Hrsg. K. Lipkowitz, D. Boyd), Wiley-VCH, Weinheim, 17 (**2001**), 99-204.

Wahlpflichtmodul Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe, jedes 2. Jahr	3.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit dem Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		V	2	90	30	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		Üb	1	45	15	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		PExp	6	105	75	15
Modulverantwortliche:r	PD Dr. Oliver Weingart					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Grundlagen molekülmechanischer und quantenmechanischer Verfahren sowie deren Kombination in QM/MM Verfahren wiedergeben, erweitertes Wissen über quantenmechanische Verfahren zur Beschreibung angeregter Zustände vorweisen, die Bewegung von Molekülen auf Singulett-Potenzialflächen nachvollziehen, kombinierte quantenmechanische/molekülmechanische Berechnungen zur Photodynamik einfacher Modellsysteme durchführen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> subtraktive und additive QM/MM-Verfahren. Molekülmechanische Methoden. Ensembles. Surface-Hopping-Dynamik auf Born-Oppenheimer-Flächen. QM-Methoden für angeregte Zustände. Nichtadiabatische Kopplung. Solvatation. Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten. 						
<i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.						
<i>Praktikum:</i> Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden, werden vorausgesetzt.					
Studienleistungen	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Dyn-Praktikums und erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		
Sonstige Informationen						

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

Literatur

F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley-VCH, 3. Ed., Chichester, **2017**.

H. M. Senn, W. Thiel, QM/MM Methods for Biological Systems, *Top. Curr. Chem.* (2007) 268: 173–290.

O. Weingart, Combined Quantum and Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Simulate Ultrafast Photodynamics in Biological Systems, *Curr. Org. Chem.* (2017) 21: 586-601.

Simulation von Biomolekülen (BioSim)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Simulation von Biomolekülen		V	2	60	30	250
Bio-Sim-Seminar		Sem	1	45	15	30
Bio-Sim-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	
	B. Sc. Chemie				Qualifizierungsmodul	
	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, <ul style="list-style-type: none"> • englischsprachige Publikationen über biomolekulare Simulationen verstehen und diese in einem Vortrag vorstellen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
1. Biomolekulare Kraftfelder.						
2. Berechnung nichtkovalenter Wechselwirkungen.						
3. Geometrieoptimierung.						
4. 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).						
7. Monte-Carlo-Simulationen, inklusive globaler Optimierung.						
8. QM/MM-Simulationen, mit Anwendungen auf Enzyme.						
<i>Seminar:</i>						
1. Analyse einer Publikation zum Thema biomolekulare Simulation und eigene Simulationen zu dieser Publikation						
2. Vorstellen der Publikation und der eigenen Simulationsergebnisse in einem Seminarvortrag (30 Minuten, Powerpoint)						
<i>Computerpraktikum:</i>						
1. Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS, des QM/MM-Programms ChemShell und des Programms VMD zur Darstellung von Biomolekülen						
2. Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux. Die Übungsaufgaben werden selbstständig bearbeitet.						
3. Protokolle zu den Übungen. Die Protokolle werden korrigiert und besprochen.						

Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnisse wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, werden vorausgesetzt.		
Studienleistungen	Bearbeitung von Übungen im Rahmen des Computerpraktikums inklusive Protokolle, Seminarvortrag.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Bio-Sim-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
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			
1. Skript zur Vorlesung 2. 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, 2001 . D. Frenkel, B. Smit, " <i>Understanding Molecular Simulation. From algorithms to applications</i> , Academic Press, 2. Ed., San Diego, 2002 . 3. Spezialliteratur zu Seminarthemen wird ausgegeben.			