

Nebenfach Chemie

Im Nebenfach Chemie im Bachelor muss das Modul ChemA oder die entsprechende Vorlesung für Studierende mit Hauptfach Chemie und mindestens eines der Module ChemB „Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie“ oder PCP „Physikalische Chemische Experimente“ verpflichtend gewählt werden. Sie können durch weitere Module nach Wahl ergänzt werden.. Im Master müssen, wenn sie noch nicht im Bachelor gewertet wurden, das Modul Allgemeine Chemie und mindestens eines der Module ChemB „Praktikum Allgemeine und Anorganische Chemie“ oder PCP „Physikalische Chemische Experimente“ verpflichtend gewählt. Prüfungen und deren Benotung erfolgt nach der Ordnung für den Studiengang Bachelor/Master Chemie.

Modul ChemA Grundlagen der Chemie (für Naturwissenschaftler) (7,5 CP)

Inhalt, Ziel: Grundlagen der Allgemeinen und Anorganischen Chemie. Atombau, Periodensystem der Elemente, Chemische Bindung, Thermochemie, Gasgesetze, chemische Thermodynamik, chemische Kinetik, Elektrochemie, Säuren und Basen, Reduktion und Oxidation, Komplexchemie, Stoffchemie der Haupt- und Nebengruppenelemente

Turnus: Jährlich, Beginn in jedem Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: -

Prüfungsvorleistungen: -

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|---------------------------------|--|--------|--------|----------|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | Jedes WS | |
| Chemie für Naturwissenschaftler | WS | V Ü | 4 1 | 7,5 | - |
| Lehrveranstaltung: | Chemie für Naturwissenschaftler | | | | |
| Inhalt: | Allgemeine chemische Zusammenhänge; anorganische Chemie | | | | |
| Vorkenntnisse: | - | | | | |
| Studiennachweis: | Regelmäßige und erfolgreiche Teilnahme an den Übungen | | | | |
| Prüfung: | Klausur zu Veranstaltung ist gleichzeitig die Modulabschlussprüfung (s.o.) | | | | |

Modul ChemB Anorganische Chemie (Praktikum für Naturwissenschaftler) (3,5 CP)

Inhalt, Ziel: Versuche zu elektrolytischer Dissoziation, Säuren und Basen, Titration, Gleichgewichtskonstanten, Puffersysteme, Löslichkeit, Redoxreaktionen, Komplexchemie, Trennverfahren.

Turnus: jedes Semester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|---|-----|-----|-------|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS/SS | |
| Chemisches Praktikum und Seminar für Naturwissenschaftler | WS/SS | P/S | 4 | 3,5 | - |
| Lehrveranstaltung: | Chemisches Praktikum und Seminar für Naturwissenschaftler | | | | |
| Inhalt: | Experimente zur allgemeinen und anorganischen Chemie | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | Regelmäßige und erfolgreiche Teilnahme am Praktikum | | | | |
| Prüfung: | Klausur | | | | |

Modul ChemF Festkörperchemie (3 CP)

Inhalt, Ziel: Grundlagen im Bereich Festkörperchemie; Struktur und Eigenschaften anorganischer Verbindungen

Turnus: jährlich, Sommersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|---------------------------------|---------------------------------|-----|-----|----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Vorlesung Anorganische Chemie 2 | SS | V | 2 | 3 | - |
| Lehrveranstaltung: | Vorlesung Anorganische Chemie 2 | | | | |
| Inhalt: | Grundlagen der Festkörperchemie | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Klausur | | | | |

Modul AnM Analytische Methoden (3 CP)**Inhalt, Ziel:** Grundlagen im Bereich Analytische Chemie (insbesondere Chromatographie) und anorganischer Verbindungen**Turnus:** jährlich, Sommersemester**Voraussetzungen für die Teilnahme:** Modul ChemA**Prüfungsvorleistungen:****Modulprüfung, Prüfungsform:** Klausur, benotet**Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich:** Chemie**Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls:** Bestehen der Modulabschlussprüfung**Verwendbarkeit:** Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|------------------------------------|--------|-----|-----|----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Vorlesung Analytische Chemie 2 | SS | V | 2 | 3 | - |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| Vorlesung Analytische Chemie 2 | | | | | |
| Inhalt: | | | | | |
| Grundlagen der Analytischen Chemie | | | | | |
| Vorkenntnisse: | | | | | |
| Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: | | | | | |
| - | | | | | |
| Prüfung: | | | | | |
| Klausur | | | | | |

Modul Org Grundlagen der Organischen Chemie (7,5 CP)**Inhalt, Ziel:** Die Studierenden sollen für eine gegebene Molekularformel die korrekte Anzahl von Stereoisomeren bestimmen können und die wichtigsten Reaktionstypen der Organischen Chemie kennenlernen. Inhalte sind: Stereochemie (Beschreibung und Klassifizierung von Molekülstrukturen, Chiralität und Symmetrie, Konformationsanalyse); grundlegende Reaktionen organischer Moleküle (Reaktionsmechanismen)**Turnus:** jährlich, Sommersemester**Voraussetzungen für die Teilnahme:** -**Prüfungsvorleistungen:****Modulprüfung, Prüfungsform:** Klausur (120min) , benotet**Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich:** Chemie**Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls:** Bestehen der Modulabschlussprüfung**Verwendbarkeit:** Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|--------|-----|-----|-----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Vorlesung Grundlagen der Organischen Chemie | SS | V | 3 | 7,5 | - |
| Übung zur Vorlesung | | Ü | 2 | | |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| Vorlesung Grundlagen der Organischen Chemie | | | | | |
| Inhalt: | | | | | |
| Grundlagen der Organischen Chemie | | | | | |

| | |
|------------------|-------------|
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA |
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | Klausur |
| | |

Modul Therm Thermodynamik und Elektrochemie (6 CP)

Inhalt, Ziel: Hauptsätze der Thermodynamik, Zustandsfunktionen, Phasengleichgewichte, Chemische und Elektrochemische Gleichgewichte

Turnus: jährlich, Sommersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: -

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur (120min) , benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|----------------------------------|--|-----|-----|----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Vorlesung Physikalische Chemie I | SS | V | 3 | 6 | - |
| Übung zur Vorlesung | | Ü | 1 | | |
| | | | | | |
| Lehrveranstaltung: | Vorlesung Physikalische Chemie I | | | | |
| Inhalt: | Einführung in die physikalische Chemie | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Klausur | | | | |
| | | | | | |

Modul Spek Molekulare Spektroskopie (4,5 CP)

Inhalt, Ziel: Theoretische Grundlagen von molekularen spektroskopischen Verfahren mit Anwendungsbeispielen

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|--------------------------|--------|-----|-----|----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |

| | | | | | |
|--|----|---|---|-----|---|
| Vorlesung Physikalische Chemie 3 | WS | V | 2 | 4,5 | - |
| Übung zur Vorlesung | | Ü | 1 | | |
| Lehrveranstaltung: Vorlesung Physikalische Chemie 3 | | | | | |
| Inhalt: Spektroskopie | | | | | |
| Vorkenntnisse: Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: - | | | | | |
| Prüfung: Klausur | | | | | |

Modul PCP Physikalisch Chemische Experimente (5,5 CP)

Inhalt, Ziel: Experimente zur Thermodynamik und Elektrochemie, Kinetik und Spektroskopie

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Mündliche Prüfung, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|--------|-----|-----|-----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Praktikum Physikalische Chemie für Physiker und Physikerinnen | WS | P | 8 | 5,5 | - |
| Lehrveranstaltung: Praktikum Physikalische Chemie für Physiker und Physikerinnen | | | | | |
| Inhalt: Praktikum in Physikalischer Chemie | | | | | |
| Vorkenntnisse: Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: - | | | | | |
| Prüfung: Mündliche Prüfung | | | | | |

Modul COM Einführung in die Computerchemie (4,5 CP)

Inhalt, Ziel: Einführung in die Computerchemie: Kraftfeldmodelle, MO-Theorie, Hartree-Fock Ansatz, Dichtefunktionaltheorie

Turnus: jährlich, Sommersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Mündliche Prüfung, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Bachelor oder Master

| | | | | Semester/CP |
|---------------------------------|---|-----|-----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS |
| Vorlesung Theoretische Chemie 2 | SS | V | 2 | 4,5 |
| Praktikum Theoretische Chemie | | P | 2 | |
| Lehrveranstaltung: | Praktikum Physikalische Chemie für Physiker und Physikerinnen | | | |
| Inhalt: | Praktikum in Physikalischer Chemie | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | |
| Studiennachweis: | - | | | |
| Prüfung: | Mündliche Prüfung | | | |

Modul STRU Struktur und Funktion (5 CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen ein Verständnis für den komplexen Zusammenhang zwischen der drei-dimensionalen Struktur von Molekülen und ihrer biologischen Funktion erwerben
Inhalt: Strukturbestimmung von Wirkstoffen und Biomakro-molekülen als Grundlage zum Verständnis ihrer Funktion; NMR-Spektroskopie, Röntgenstrukturanalyse und Molecular Modelling

Turnus: jährlich, Sommersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur (120min) , benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Master

| | | | | Semester/CP |
|---------------------------------|---|-----|-----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS |
| Vorlesung Theoretische Chemie 2 | SS | V | 2 | 5 |
| Praktikum Theoretische Chemie | | P | 2 | |
| Lehrveranstaltung: | Praktikum Physikalische Chemie für Physiker und Physikerinnen | | | |
| Inhalt: | Praktikum in Physikalischer Chemie | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | |
| Studiennachweis: | - | | | |
| Prüfung: | Mündliche Prüfung, benotet | | | |

Modul MAG Einführung in die Theorie der Magnetischen Resonanz (7CP)

Inhalt, Ziel: Die Studenten werden in die quantenmechanischen und mathematischen Grundlagen der MR-Spektroskopie eingeführt. Sie können einfache Pulsabfolgen analytisch exakt beschreiben und einfache Pulsabfolgen entwerfen. Die Studenten lernen Strukturparameter aus den MR-Spektren zu extrahieren. Inhalt: Grundlagen der NMR- und EPR-Spektroskopie; Einführung in die nD-Fourier-Spektroskopie sowie die Anwendungen in MR-, IR-, optischer und MW-Spektroskopie; Einführung in die 2D- und 3D-NMR-Spektroskopie, isotrope und anisotrope Wechselwirkungen in der MR und ihre quantenmechanische Beschreibung; Einführung in MR-Relaxationstheorie

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: kumulativ, bestehen beider Teilmodulprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|---|-----|-----|-----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | SS | |
| Vorlesung Einführung in die Hochauflösende NMR-Spektroskopie | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Vorlesung Einführung in die Festkörper-NMR- und EPR-Spektroskopie | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Lehrveranstaltung: | Einführung in die Hochauflösende NMR-Spektroskopie | | | | |
| Inhalt: | NMR Spektroskopie | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Übungsaufgaben | | | | |
| Lehrveranstaltung: | Einführung in die Festkörper-NMR- und EPR-Spektroskopie | | | | |
| Inhalt: | Festkörper NMR | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Übungsaufgaben | | | | |

Modul MAGP Einführung in die Praxis der Magnetischen Resonanz (10CP)

Inhalt, Ziel: Studierende erlernen die Interpretation von state-of-the-art NMR- und EPR-Experimenten und die Bestimmung von Konformation und Dynamik an Beispielen. Studierende erlernen Umgang mit wichtigen Programmen zur Spektreninterpretation. Im Seminar werden neue Experimente vorgestellt. Inhalt: NMR: Zuordnung von nD-NMR-Spektren von Naturstoffen, synthetischen Molekülen (mit Beispielen aus synthetisch arbeitenden Arbeitskreisen) und Biomakromolekülen (Proteinen, Peptiden, RNA, DNA, Oligosaccharide); EPR: Analyse von Puls-EPR Spektren und Korrelation mit MO-Rechnungen, Hyperfeinspektroskopie und Abstandsmessungen im nm-Bereich. Anwendungen an Enzymen, Membranproteinen und Oligonucleotide

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: kumulativ, bestehen beider Teilmodulprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|--|-------------------|-----|-----|----|-------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | |
| Praktikum NMR-Intensivkurs | WS | P | 3 | 3, | - |
| Praktikum EPR-Intensivkurs | WS | P | 3 | 3 | - |
| Seminar Moderne Anwendungen der MR | WS | S | 2 | 4 | - |
| Lehrveranstaltung: Praktikum NMR-Intensivkurs | | | | | |
| Inhalt: | NMR Spektroskopie | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Übungsaufgaben | | | | |
| Lehrveranstaltung: Praktikum EPR-Intensivkurs | | | | | |
| Inhalt: | EPR | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Übungsaufgaben | | | | |
| Lehrveranstaltung: Seminar Moderne Anwendungen der MR | | | | | |
| Inhalt: | EPR | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Seminarvortrag | | | | |

Modul Las Einführung in die Praxis der Magnetischen Resonanz (5CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen Anwendungsmöglichkeiten von Lasern und die erforderliche Instrumentierung kennen lernen. Sie sollen erfahren, welche Messprobleme mit Lasern untersucht werden können und welche Laserinstrumente dafür verfügbar sind. Inhalt: Laserprinzipien; Lasertypen; spektroskopische Methoden; Lasernachweismethoden; Anwendung auf chemische Fragestellungen; gezielter Einsatz von Lasern in der Analytik, der Spektroskopie und der Verfahrenstechnik

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: mündliche Prüfung, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: kumulativ, bestehen beider Teilmodulprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | Semester/CP | |
|--------------------------|--------|-----|-----|-------------|---|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | |
| Vorlesung Laserchemie | SS | V | 3 | 5 | - |

Modul STRUD Struktur und Dynamik molekularer und supramolekularer Systeme (7,5CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen Reaktionen nach Photoanregung in einfachen und komplexen Systemen verstehen und sowohl elektronische als auch Umgebungsbedingungen für photochemische Prozesse kennen lernen. Inhalt: Zwischenmolekulare Kräfte; Cluster; Kofaktoren; Selbstorganisation; molekulare Erkennung; große supramolekulare Funktionseinheiten; intramolekularer Elektronen- und Protonentransfer; nicht-adiabatische Kopplungen; Isomerisierungen; Energietransfer; Fluoreszenzlöschung; intermolekulare Transferprozesse in Modellsystemen und natürlichen Funktionseinheiten; Anwendung photochemischer Prozesse

Turnus: zwei jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: kumulativ, bestehen beider Teilmodulprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|--|-----|-----|----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Seminar Zwischenmolekulare Wechselwirkungen und molekulare Selbstorganisation | WS | S | | 3 | - |
| Vorlesung Molekulare und supramolekulare Photochemie und Photophysik | SS | V | 2 | | 3,5 |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| | Seminar: Zwischenmolekulare Wechselwirkungen und molekulare Selbstorganisation | | | | |
| Inhalt: | Zwischenmolekulare Wechselwirkungen und molekulare Selbstorganisation | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Referat mit schriftlicher Zusammenfassung | | | | |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| | Vorlesung Molekulare und supramolekulare Photochemie und Photophysik | | | | |
| Inhalt: | Molekulare und supramolekulare Photochemie und Photophysik | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |

| | |
|------------------|-------------------|
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | mündliche Prüfung |

Modul MOLDYN Moleküldynamik (3,5CP)

Inhalt, Ziel: Einführung in die quantenmechanische Beschreibung molekularer Dynamik und Spektroskopie. Zeitabhängige Quantenmechanik, Dichtematrix-Beschreibung und Relaxationstheorie, Einführung in die nichtlineare Spektroskopie mit Beispielen aus der Laser- und NMR-Spektroskopie

Turnus: zwei jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: mündliche Prüfung, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: **Bestehen der Modulabschlussprüfung**

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|--|--------|-----|-----|-----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung: Theorie der molekularen Dynamik | WS | S | 2 | 3,5 | - |
| Lehrveranstaltung: Vorlesung: Theorie der molekularen Dynamik | | | | | |
| Inhalt: Molekulare Dynamik | | | | | |
| Vorkenntnisse: Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: - | | | | | |
| Prüfung: Mündliche Prüfung | | | | | |

Modul MOLSYM Molecular Dynamics Simulations (4CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen in der Lage sein, eigenständig Molekulardynamik-Simulationen an Biomolekülen durchzuführen. Inhalt: Einführung in die Grundlagen und die Praxis von Molekulardynamik-Simulationen an Biomolekülen: Diskussion von empirischen Kraftfeldern und Samplingmethoden, Definition der Simulationsbox, Analyse und Visualisierung der MD Trajektorien.

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Kurzvortrag über eigenes Projekt, unbenotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|--------|-----|-----|----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Computerpraktikum | WS | S | 4 | 4 | - |
| Lehrveranstaltung: Computerpraktikum k | | | | | |

| | |
|------------------|----------------------------------|
| Inhalt: | Molekulare Dynamik |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA |
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | Kurzvortrag über eigenes Projekt |

Modul QCHEM Quantum Chemistry (4CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen in der Lage sein, eigenständig ab-initio Rechnungen an chemischen Systemen durchzuführen. Inhalt: Einführung in die Grundlagen und die Praxis von ab-initio Rechnungen an chemischen Systemen: Aufstellen der Z-Matrix, Energieminimierung, Geometrieoptimierung, Berechnung von molekularen Größen, Visualisierung der Ergebnisse, Diskussion der Zuverlässigkeit von Kraftfeld, Hatree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie-Methoden.

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Kurzvortrag über eigenes Projekt, unbenotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|----------------------------------|-----|-----|----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Computerpraktikum | WS | S | 4 | 4 | |
| Lehrveranstaltung: Computerpraktikum k | | | | | |
| Inhalt: | Quantum Chemistry | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Kurzvortrag über eigenes Projekt | | | | |

Modul KS Kristallstrukturvorhersage (3,5 CP)

Inhalt, Ziel: Verstehen der Grundlagen und Anwendungen der Verfahren zur Berechnung und Vorhersage von Kristallstrukturen. Inhalt: Berechnung und Vorhersage der Kristallstruktur organischer Verbindungen.

Im einzelnen: Anordnung von Molekülen im Festkörper Kraftfeldmethoden zur Berechnung von Kristallstrukturen (ausführlich), Kristallstrukturvorhersage, Anwendungsbereich quantenmechanischer Methoden in der Kristallstrukturvorhersage, Anwendung: Bestimmung von Kristallstrukturen aus Röntgen-Pulverdiagrammen mittels Gitterenergieminimierungen, Kristallsymmetrie (je nach Vorkenntnissen der Zuhörer) Kristallisationsverfahren, industrielle Anwendungen, Historisches

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: Klausur oder mündliche Prüfung, benotet

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: Bestehen der Modulabschlussprüfung

Verwendbarkeit: Master

| | | | | Semester/CP | |
|--|------------------|-----|-----|-------------|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung Kristallstrukturvorhersage | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Lehrveranstaltung: Vorlesung Kristallstrukturvorhersage | | | | | |
| Inhalt: | Kristallstruktur | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | - | | | | |

Modul IAA Instrumentelle Analytik A (7,5 CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen die Grundlagen der spektroskopischen Charakterisierungsmethoden erlernen. Die Studierenden sollen lernen, welche Analyseverfahren man für welche Problemstellungen verwenden kann, - wo die Grenzen der einzelnen Analysetechniken liegen, - wie die Messergebnisse zu interpretieren sind. Im Praktikum sollen die Studierenden die Probenvorbereitung, den Umgang mit den Geräten und die Auswertung der Ergebnisse lernen.

Charakterisierungsmethoden, u.a.: -Röntgenspektrometrische Methoden, z.B. Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA, TXRF), Röntgenabsorption (EXAFS, XANES), EDX, WDX - Atomspektrometrische Methoden, z.B. Atomabsorption (AAS), Atomemission (OES) - Elektronenspektrometrie, z.B. Photoelektronenspektrometrie (XPS, ESCA), Auger-Elektronenspektrometrie (AES) - Massenspektrometrie

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: bestehen beider Modulteilprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | Semester/CP | |
|---|-------------------------|-----|-----|-------------|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung Instrumentelle Analytik 1 | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Praktikum Instrumentelle Analytik 1 | WS | P | 4 | 4 | - |
| Lehrveranstaltung: Vorlesung Instrumentelle Analytik 1 | | | | | |
| Inhalt: | Instrumentelle Analytik | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |
| Studiennachweis: | - | | | | |
| Prüfung: | Klausur | | | | |
| Lehrveranstaltung: Praktikum Instrumentelle Analytik 1 | | | | | |
| Inhalt: | Instrumentelle Analytik | | | | |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA | | | | |

| | |
|------------------|----------------------|
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | Praktikumsprotokolle |

Modul IA2 Instrumentelle Analytik 2 (7,5 CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen die Grundlagen der mikroskopischen Abbildungsmethoden soweit verstehen, dass sie in der Lage sind, sie im Praktikum an typischen Probe-objekten anzuwenden. Ferner sollen sie in die Lage versetzt werden, für eine gegebene Fragestellung die richtigen Methoden einzusetzen.

Inhalt: Abbildungsmethoden, u.a. - Elektronenmikroskopie: Aufbau und Funktionsweise von Elektronenmikroskopen, Rasterelektronenmikroskopie, Transmissionselektronenmikroskopie, Elektronenbeugung, Hellfeld/Dunkelfeldabbildungen usw. - Rastersondenmikroskopie: Rastertunnelmikroskopie (STM), Rasterkraftmikroskopie (AFM)

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: bestehen beider Modulteilprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|---|--------|-----|-----|-----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung Instrumentelle Analytik 2 | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Praktikum Instrumentelle Analytik 2 | WS | P | 4 | 4 | - |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| Vorlesung Instrumentelle Analytik 2 | | | | | |
| Inhalt: | | | | | |
| Instrumentelle Analytik | | | | | |
| Vorkenntnisse: | | | | | |
| Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: | | | | | |
| - | | | | | |
| Prüfung: | | | | | |
| Klausur | | | | | |
| Lehrveranstaltung: | | | | | |
| Praktikum Instrumentelle Analytik 2 | | | | | |
| Inhalt: | | | | | |
| Instrumentelle Analytik Abbildungsverfahren | | | | | |
| Vorkenntnisse: | | | | | |
| Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: | | | | | |
| - | | | | | |
| Prüfung: | | | | | |
| Praktikumsprotokolle | | | | | |

Modul RA Röntgenstrukturanalyse (7,5 CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen den Ablauf einer Röntgenstrukturanalyse kennenlernen und die dafür erforderlichen Methoden verstehen. Sie sollen in der Lage sein, Kristallstrukturen zu bestimmen und die Ergebnisse sachkundig zu interpretieren. Inhalt: Bestimmung von Kristallstrukturen durch Röntgenbeugung an Einkristallen

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: bestehen beider Modulteilprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|--|--------|-----|-----|-----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung Röntgenstrukturanalyse | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Praktikum Röntgenstrukturanalyse | WS | P | 4 | 4 | - |
| Lehrveranstaltung: Vorlesung Röntgenstrukturanalyse | | | | | |
| Inhalt: Röntgenstrukturanalyse | | | | | |
| Vorkenntnisse: Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: - | | | | | |
| Prüfung: Klausur | | | | | |
| Lehrveranstaltung: Praktikum Röntgenstrukturanalyse | | | | | |
| Inhalt: Röntgenstrukturanalyse | | | | | |
| Vorkenntnisse: Modul ChemA | | | | | |
| Studiennachweis: - | | | | | |
| Prüfung: Praktikumsprotokolle | | | | | |

Modul RAP Röntgenpulverdiffraktometrie (7,5 CP)

Inhalt, Ziel: Die Studierenden sollen in der Lage sein, Röntgenpulverdiagramme aufzunehmen und auszuwerten, sowie die Ergebnisse zu interpretieren. Inhalt: Pulverdiffraktometrie und Elektronenbeugung; kristallographische Grundlagen; Grundlagen der Röntgenbeugung an Pulvern; Aufbau eines Diffraktometers; Wie misst man ein Pulverdiagramm?; Indizierung; qualitative und quantitative Phasenanalyse; Bestimmung von Kristallitgröße und Kristallqualität; Bestimmung von amorphen Anteilen in der Probe; Kristallstrukturbestimmung aus Röntgenpulverdiagrammen; Rietveldverfeinerungen; industrielle Anwendungen; Historisches. Aufbau eines Transmissions-Elektronenmikroskops. Aufnahmeverfahren; Auswertung von Elektronenbeugungsbildern (kurz)

Turnus: jährlich, Wintersemester

Voraussetzungen für die Teilnahme: Modul ChemA

Prüfungsvorleistungen:

Modulprüfung, Prüfungsform: kumulativ

Für die Prüfung verantwortlicher Fachbereich: Chemie

Voraussetzung für die Vergabe der Leistungspunkte des Moduls: bestehen beider Modulteilprüfungen

Verwendbarkeit: Master

| | | | | | Semester/CP |
|--|--------|-----|-----|-----|--------------|
| Lehrveranstaltung | Turnus | Typ | SWS | WS | Folgendes SS |
| Vorlesung Röntgenpulverdiffraktometrie und Elektronenbeugung | WS | V | 2 | 3,5 | - |
| Praktikum Röntgenpulverdiffraktometrie | WS | P | 4 | 4 | - |

| | |
|---------------------------|--|
| | |
| Lehrveranstaltung: | Vorlesung Röntgenpulverdiffraktometrie und Elektronenbeugung |
| Inhalt: | Röntgenpulverdiffraktometrie und Elektronenbeugung se |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA |
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | Klausur |
| | |
| Lehrveranstaltung: | Praktikum Röntgenpulverdiffraktometrie |
| Inhalt: | Röntgenpulverdiffraktometrie |
| Vorkenntnisse: | Modul ChemA |
| Studiennachweis: | - |
| Prüfung: | Praktikumsprotokolle |