

Modulhandbuch
Studiengang Double Masters Degrees Chemie
Prüfungsordnung: 2011

Wintersemester 2016/17
Stand: 11. Oktober 2016

Universität Stuttgart
Keplerstr. 7
70174 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

Qualifikationsziele	4
100 Straßburg	5
110 Incoming + Outgoing	6
111 Pflichtmodule	7
1111 Synthese für Fortgeschrittene A	8
57340 Anorganische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)	9
57350 Organische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)	11
35630 Forschungspraktikum I / Forschungspraktikum II	13
80250 Masterarbeit Chemie	14
69530 Rechtskunde und Toxikologie für Chemiker	16
112 Wahlpflichtmodule	18
200 Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil)	19
210 Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Catalysis	20
211 Grundmodul	21
35640 Fundamentals of Catalysis	22
212 Spezialmodule	24
35660 Advanced Biocatalysis	25
35670 Applied Heterogeneous Catalysis	27
35690 Modern Inorganic Molecular and Coordination Chemistry	29
58080 Modern Polymer Synthesis	30
35650 Principles and Applications of Asymmetric Synthesis and Catalysis	32
35680 Solid Catalysts and Functional Materials	34
220 Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules	35
221 Grundmodul	36
35700 Advanced Materials Analysis: Structure and Properties	37
222 Spezialmodule	39
35730 Functional Organic Molecules	40
35750 Liquid Crystals	41
58070 Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien	43
58080 Modern Polymer Synthesis	45
36740 New Materials and Materials Characterization Methods	47
35760 Phase Transformations	49
35720 Solid State and Materials Chemistry	51
35710 Surfaces & Colloids	52
230 Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology	54
231 Grundmodul	55
35770 Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry	56
232 Spezialmodule	58
35660 Advanced Biocatalysis	59
35780 Advanced Bioorganic Chemistry	61
35790 Biochemie Praktikum für Chemiker	63
35810 Computational Biochemistry	64
58060 DNA Biochemie und Molekulare Epigenetik Praktikum und Seminar für Studierende der Chemie	66
35800 Genregulation, Chromatin und molekulare Epigenetik	68
240 Forschungsprofil 4: Theory and Simulation	70
241 Grundmodul	71
35820 Advanced Methods of Quantum Chemistry	72
242 Spezialmodule	74
35810 Computational Biochemistry	75
35850 Group Theory and Molecular Spectroscopy	77
35860 Molecular Quantum Mechanics	79
35830 Programming and Numerical Methods	80

35840 Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I	81
300 Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden)	83
35890 Analytik für Fortgeschrittene mit Massenspektrometrie und Elektronenstrahl- Mikroanalyse	84
26060 Chemistry of the Atmosphere	86
35880 Geochemie	88
17750 Grundzüge des gewerblichen Rechtsschutzes	90
35910 Industrielle Organische Chemie	92
37230 Kristallstruktur und Mikrostruktur	93
35870 Mikroreaktionstechnik	95
35900 Polymere Materialien	97
80250 Masterarbeit Chemie	99

Qualifikationsziele

Die Absolventinnen und Absolventen des Masterstudienganges "Chemie"

- haben die Ausbildungsziele des Bachelorstudiums in einem längeren fachlichen Reifeprozess weiter verarbeitet. Sie verfügen damit über ein vertieftes chemisches Fachwissen und eine größere Sicherheit in dessen Anwendung, so dass sie auch komplexe Probleme und Aufgabenstellungen in der Chemie wissenschaftlich beschreiben, analysieren und bewerten, und erfolgreich lösen können.
- haben vertiefte Kenntnisse theoretischer und experimenteller chemischer Methoden und verfügen über die Fertigkeit, rechnergestützte oder experimentelle Untersuchungen zu planen und eigenständig durchzuführen, die Ergebnisse zu interpretieren und daraus Schlüsse zu ziehen.
- haben tiefgehende Fachkenntnisse in einem ausgewählten Spezialisierungsgebiet oder in einem wissenschaftlichen Querschnittsthema ihrer Disziplin erworben.
- sind fähig, die erworbenen naturwissenschaftlichen und mathematischen Methoden zur Formulierung und Lösung komplexer Aufgabenstellungen in Forschung und Entwicklung in der Industrie oder in Forschungseinrichtungen erfolgreich einzusetzen, sie kritisch zu hinterfragen und sie bei Bedarf auch weiter zu entwickeln. Sie sind insbesondere fähig, zur Problemlösung benötigte Informationen zu identifizieren, zu finden und zu beschaffen.
- können Konzepte und Lösungen zu grundlagenorientierten, zum Teil auch unüblichen Fragestellungen unter breiter Einbeziehung anderer Disziplinen erarbeiten. Dabei setzen sie ihre Kreativität und ihr wissenschaftliches Urteilsvermögen ein, um neue und originelle Erkenntnisse oder Produkte und Prozesse zu entwickeln.
- können neben der fachlichen Kompetenz Konzepte, Vorgehensweisen und Ergebnisse kommunizieren und diese im Team bearbeiten. Sie sind im Stande, sich in die Sprache und Begriffswelt benachbarter Fächer einzuarbeiten, um über Fachgebietsgrenzen hinweg mit Spezialisten verschiedener chemischer Disziplinen und anderer Natur- und Ingenieurwissenschaften zu kommunizieren und zusammenzuarbeiten.
- sind breit und mit dem entsprechenden Verständnis ausgebildet um sich sowohl in zukünftige Technologien und Wirkungsfelder im eigenen Fachgebiet wie auch in die Randgebiete rasch einarbeiten zu können.
- verfügen über eine verantwortliche und selbständige wissenschaftliche Arbeitsweise.
- erwerben die wissenschaftliche Qualifikation für eine Promotion.

100 Straßburg

Zugeordnete Module: 110 Incoming + Outgoing

110 Incoming + Outgoing

Zugeordnete Module: 111 Pflichtmodule
 112 Wahlpflichtmodule

111 Pflichtmodule

Zugeordnete Module: 1111 Synthese für Fortgeschrittene A
 35630 Forschungspraktikum I / Forschungspraktikum II
 69530 Rechtskunde und Toxikologie für Chemiker
 80250 Masterarbeit Chemie

1111 Synthese für Fortgeschrittene A

Zugeordnete Module: 57340 Anorganische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)
 57350 Organische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)

Modul: 57340 Anorganische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)

2. Modulkürzel:	030202001	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	9.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	11.0	7. Sprache:	Deutsch

8. Modulverantwortlicher: Univ.-Prof. Rainer Niewa

9. Dozenten:

10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:

DoubleM.D. Chemie, PO 2011
 → Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule -->Synthese für Fortgeschrittene A
 →
 DoubleM.D. Chemie, PO 2011
 → Outgoing -->Pflichtmodule -->Synthese für Fortgeschrittene A
 →

11. Empfohlene Voraussetzungen:

12. Lernziele:

Die Studierenden

besitzen eingehende Kenntnisse über Synthese und chemische Eigenschaften von Festkörpern

erfassen die modernen präparativen und mechanistischen Aspekte der anorganischen Molekülchemie

können die modernen präparativen und mechanistischen Aspekte der anorganischen Molekülchemie anwenden

beherrschen die Prinzipien der Syntheseplanung

können die zur Charakterisierung und Reaktionsverfolgung notwendigen Methoden anwenden

haben Erfahrungen mit experimentell anspruchsvollen Synthesetechniken gesammelt

beherrschen Arbeitssicherheit

13. Inhalt:

Präparative Festkörperchemie

Struktur-Eigenschaftsbeziehungen von Festkörpern

Bioanorganische Chemie

Hochreaktive Verbindungen mit Hauptgruppenelementen

Anwendung metallorganische Reagenzien in der Synthese

Praktikum zur Festkörperchemie und zur anorganischen Synthesechemie: mehrstufige Präparate aus den aktuellen Forschungsthemen der Arbeitskreise

Arbeitstechniken unter Inertbedingungen (Schlenktechnik, Vakuumlinien, Handschuhkästen)

Unkonventionelle Synthesetechniken (ionische Flüssigkeiten, lösungsmittelfreie Reaktionen, ultraschall- und mikrowellenassistierte Reaktionen, Festphasensynthesen, Kombinatorische Synthesen)

14. Literatur:

15. Lehrveranstaltungen und -formen:

- 573401 Seminar Anorganische Synthese für Fortgeschrittene
 - 573402 Praktikum Anorganische Synthese für Fortgeschrittene
 - 573403 Vorlesung Festkörper- und Materialsynthese
 - 573404 Vorlesung Metallorganische Chemie
-

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

Präsenzzeit: 42 h (Vorlesung) + 120 h (Praktikum + Seminar)

Selbststudiumszeit / Nacharbeitszeit: 84 h (Vorlesung) + 14 h (Praktikum + Seminar)

Abschlussprüfung inkl. Vorbereitung: 10 h

Gesamt:
270 h

17. Prüfungsnummer/n und -name:

- 57341 Anorganische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum) (PL), schriftliche Prüfung, 90 Min., Gewichtung: 1.0
 - V Vorleistung (USL-V), Sonstiges
-

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 57350 Organische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum)

2. Modulkürzel:	-	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	9.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	11.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Clemens Richert		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Clemens Richert • Eric Jean Kervio 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule -->Synthese für Fortgeschrittene A → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Pflichtmodule -->Synthese für Fortgeschrittene A →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Vorlesung: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • besitzen eingehende Kenntnisse über Synthese und chemische Eigenschaften von organischen Molekülen • erfassen die modernen präparativen und mechanistischen Aspekte der organischen Molekülchemie • beherrschen die Prinzipien der Syntheseplanung Praktikum: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • besitzen eingehende Kenntnisse über Synthese von organischen Moleküle • können die modernen präparativen und mechanistischen Aspekte der organischen Molekülchemie anwenden • können Methoden der asymmetrischen Katalyse und nachhaltigen Chemie einsetzen • beherrschen die Prinzipien der Syntheseplanung • können die zur Charakterisierung und Reaktionsverfolgung notwendigen Methoden anwenden • haben Erfahrungen mit experimentell anspruchsvollen Synthesetechniken gesammelt • beherrschen die Arbeitssicherheit 		

13. Inhalt:	<p>Vorlesung:</p> <ul style="list-style-type: none">• Synthesemethoden• Kupplungsreaktionen• Grundlagen der Stereochemie und stereoselektiven Synthesen• Anwendung metallorganische Reagenzien in der organischen Synthese• Grundlagen der Retrosynthese und Syntheseplanung für organische Verbindungen <p>Praktikum:</p> <ul style="list-style-type: none">• Hochreaktive Reagenzien, z.B. Metallorganische Reagenzien und ihre Anwendung in der organischen Synthese• Orbitalkontrollierte Reaktionen, z.B. Pericyclische Reaktionen• Oxidationreaktionen, z.B. Epoxidierung, Dihydroxylierung von Alkenen• Grundlagen der Retrosynthese und Syntheseplanung organischer Verbindungen• Mehrstufige Präparate aus den aktuellen Forschungsthemen der Arbeitskreise, z.B. Stereoselektive Synthesen, chirale Wirkstoffe• Moderne Formen der Reaktionsführung, z.B. Arbeitstechniken unter Inertbedingungen (Schlenktechnik, Vakuumlinien, Handschuhkästen) <p>Unkonventionelle Synthesetechniken z.B. mikrowellenassistierte Reaktionen, Festphasensynthesen, kombinatorische Synthesen</p>
14. Literatur:	<p>F.A. Carey, R.J. Sundberg, (Übersetzungsherausgeber: H.J. Schäfer, D. Hoppe, G. Erker) Organische Chemie - ein weiterführendes Lehrbuch, 2. korrigierter Nachdruck, Wiley-VCH, Weinheim: 2004.</p> <p>R. Brückner, Reaktionsmechanismen: Organische Reaktionen, Stereochemie, moderne Synthesemethoden, 3. Auflage, Spektrum Verlag, 2004.</p>
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none">• 573501 Seminar Organische Synthese für Fortgeschrittene• 573502 Praktikum Organische Synthese für Fortgeschrittene• 573503 Vorlesung Organische Synthesechemie für Fortgeschrittene
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit in Stunden: 42 h (Vorlesung) + 121 h (Praktikum+Seminar) Abschlussprüfung inkl. Vorbereitung: 9 h Selbststudiumszeit in Stunden : 84 h (Vorlesung) + 14 h (Prak. + Sem.)</p> <p>Summe 270 h</p>
17. Prüfungsnummer/n und -name:	<ul style="list-style-type: none">• 57351 Organische Synthese für Fortgeschrittene (mit Seminar und Praktikum) (PL), schriftliche Prüfung, 90 Min., Gewichtung: 1.0• V Vorleistung (USL-V), Sonstiges
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

Modul: 35630 Forschungspraktikum I / Forschungspraktikum II

2. Modulkürzel:	030202028	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	12.0 LP	6. Turnus:	jedes Semester
4. SWS:	16.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Dietrich Gudat		
9. Dozenten:	Dozenten der Fakultät Chemie		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Outgoing -->Pflichtmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • Have been introduced to carry out independent research by contributing to a project of one of the research groups in Fakultät Chemie • Have got an impression of current problems in chemical research • Know how to present their own research work in oral and written form 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Introduction into the research project • Realization and interpretation of own work • Critical discussion of the results • Writing of a research report (in English) • Presentation of the completed work in a seminar (in English) 		
14. Literatur:	According to arrangement with the project supervisor		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356301 Forschungspraktikum I • 356302 Forschungspraktikum II 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Im Rahmen des MSc-Studiengangs sind zwei Forschungspraktika zu absolvieren. Diese müssen bei verschiedenen Prüfern absolviert werden. Nach Genehmigung durch den Studiendekan/die Studiendekanin kann eines der beiden Forschungspraktika auch in einer anderen Fakultät der Universität Stuttgart oder in einer Abteilung der Stuttgarter Max-Planck-Institute angefertigt werden, sofern eine Chemie-relevante Fragestellung bearbeitet wird, oder es können ein oder beide Forschungspraktika im Rahmen eines Auslandsaufenthalts erbracht werden. Zeitaufwand pro Forschungspraktikum 180 h = insgesamt 360 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35631 Forschungspraktikum I / Forschungspraktikum II (USL), schriftlich und mündlich, Gewichtung: 1.0, schriftlicher Praktikumsbericht + mündlicher Seminarvortrag		
18. Grundlage für ... :	80250 Masterarbeit Chemie		
19. Medienform:			
20. Angeboten von:	Chemie		

Modul: 80250 Masterarbeit Chemie

2. Modulkürzel:	030702029	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	30.0 LP	6. Turnus:	jedes Semester
4. SWS:	0.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Dietrich Gudat		
9. Dozenten:	Dozenten der Fakultät Chemie		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Outgoing -->Pflichtmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Das Thema der Masterarbeit kann frühestens ausgegeben werden, wenn mindestens 78 Leistungspunkte erworben wurden und, sofern eine Zulassung zum Studiengang mit Auflagen erfolgt ist, die Erfüllung der Auflagen nachgewiesen wurde.		
12. Lernziele:	Die Masterarbeit ist Bestandteil der wissenschaftlichen Ausbildung und stellt die Abschlussarbeit dar. In ihr weisen Studierende nach, - dass sie in einem fest umrissenen Zeitraum eine konkrete, anspruchsvolle wissenschaftliche Aufgabenstellung aus einem Arbeitsgebiet der Chemie ziel- und ergebnisorientiert bearbeiten können. Sie kennen die typischen Phasen eines Forschungsprojektes und erreichen durch angeleitetes wissenschaftliches Arbeiten eine erweiterte Problemlösungskompetenz, die sie zur Entwicklung eigener Lösungen befähigt. Insbesondere können die Studierenden die zur Bearbeitung notwendigen Arbeiten selbstständig planen und durchführen, dazu wissenschaftliche Methoden zielführend und kritisch anwenden, und die Ergebnisse schriftlich und mündlich in klarer, flüssiger und prägnanter Form präsentieren und diskutieren		
13. Inhalt:	Das Thema der Masterarbeit wird einem aktuellen Forschungsgebiet der Chemie entnommen und so gewählt, dass es eigenständige Forschung ermöglicht. Die Bearbeitung umfasst - die Konzeption eines Arbeitsplans - die Durchführung notwendiger Literaturrecherchen - die eigenständige Planung, Durchführung und Auswertung der Untersuchungen - die Präsentation und kritische Diskussion der Ergebnisse in einer schriftlichen Abschlussarbeit und in einem Seminarvortrag mit anschließender Diskussion		
14. Literatur:	nach Absprache mit dem betreuenden Hochschullehrer/der betreuenden Hochschullehrerin		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:			
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Gesamt: 900 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:			
18. Grundlage für ... :			

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Chemie

Modul: 69530 Rechtskunde und Toxikologie für Chemiker

2. Modulkürzel:	030200009	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	3.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	2.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Isabella Waldner		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Holger Barth • Thomas Krappel 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Zusatzmodule		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Die Studierenden können die Sachkunde für das Inverkehrbringen von gefährlichen Stoffen und Zubereitungen gemäß § 5 Abs. 1 Nr. 7 der Chemikalienverbots-Verordnung nachweisen. Als zukünftige Entscheidungsträger und Verantwortliche für Sicherheit und Gesundheitsschutz haben sie das zur Wahrnehmung ihrer Verantwortung erforderliche Grundwissen erworben.		
13. Inhalt:	<p>Allgemeine Toxikologie : Grundbegriffe und Definitionen in der Toxikologie; Grundlagen der Lehre über unerwünschte Wirkungen von Substanzen auf lebende Organismen und das Ökosystem; Zusammenhänge zwischen Exposition, Expositionsdauer, Toxikokinetik (Resorption, Verteilung, Metabolismus, Elimination), Toxikodynamik und Wirkmechanismen; Grenzwerte und Beurteilungsparameter; Wirkung ausgewählter Stoffe und Stoffklassen.</p> <p>Rechtskunde : Grundzüge des deutschen Rechtssystems und des Rechtssystems der Europäischen Union sowie deren Wechselwirkungen. REACH, CLP (GHS), Chemikaliengesetz, Gefahrstoffverordnung, arbeitsmedizinische Vorsorge, Chemikalienverbotsverordnung, Bundesimmissionsschutzgesetz, Abfall- und Transportrecht. Als zukünftige Entscheidungsträger und Verantwortliche lernen die Hörer die Grundzüge der innerbetrieblichen Hierarchie, der Aufbau- und Ablauforganisation sowie die damit zusammenhängenden Fragen der Verantwortung und der Haftung kennen. Sicherheitswissenschaftliche Grundlagen werden insbesondere hinsichtlich der Gefährdungsermittlung, Risikobewertung und der Gefahrenabwehr vermittelt.</p>		
14. Literatur:	<p>Allgemeine Toxikologie: Bender, H. F.: Sicherer Umgang mit Gefahrstoffen: Sachkunde für Naturwissenschaftler. 3. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2005. Das Buch enthält eine kurze und praxisnahe Einführung in die Toxikologie.</p> <p>Rechtskunde: Die in der Vorlesung zu behandelnden Vorschriften unterliegen einem ständigen Wandel. Deshalb entsprechen auch in den nachfolgend aufgeführten Werken die Angaben zum Regelwerk nicht in allen Punkten dem aktuellen Stand.</p>		

Bender, H. F.: Das Gefahrstoffbuch. Sicherer Umgang mit Gefahrstoffen nach REACH und GHS. 3. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2008. Bundesverband der Unfallkassen (Hrsg.), Weiß, H. F.: Sicherheit und Gesundheitsschutz im öffentlichen Dienst (GUV-I 8551). Überarbeitete Ausgabe, ohne Verlag, München 2001; http://regelwerk.unfallkassen.de/regelwerk/data/regelwerk/inform/I_8551.pdf

Vorlesungsunterlagen werden zu gegebener Zeit in Ilias eingestellt.

15. Lehrveranstaltungen und -formen:	695301 Vorlesung Rechtskunde und Toxikologie für Chemiker
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Vorlesung als Blockveranstaltung Präsenz: 28 h (2 SWS) Vor- und Nachbereitung: 1,5 h pro Präsenzstunde 42 h Abschlussklausur incl. Vorbereitung 20 h Summe: 90 h
17. Prüfungsnummer/n und -name:	69531 Rechtskunde und Toxikologie für Chemiker (USL), Sonstiges, Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

112 Wahlpflichtmodule

Zugeordnete Module: 200 Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil)
 300 Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden)

200 Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil)

Zugeordnete Module:	210	Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Catalysis
	220	Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules
	230	Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology
	240	Forschungsprofil 4: Theory and Simulation

210 Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis

Zugeordnete Module: 211 Grundmodul
 212 Spezialmodule

211 Grundmodul

Zugeordnete Module: 35640 Fundamentals of Catalysis

Modul: 35640 Fundamentals of Catalysis

2. Modulkürzel:	030601036	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Nach Ankuendigung
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Rene Peters		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Rene Peters • Elias Klemm • Bernhard Hauer • Bettina Nestl 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Grundmodul →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Synthesechemie A		
12. Lernziele:	<ul style="list-style-type: none"> • Knowledge and comprehension of the fundamental and common aspects of the different fields of catalysis: homogeneous catalysis, heterogeneous catalysis, biocatalysis • Comprehension of catalytic cycles • Comprehension of the unifying concepts in catalysis 		
13. Inhalt:	<p>Fundamentals of Homogeneous Catalysis with Metal Catalysts</p> <ul style="list-style-type: none"> • Preparation methods and synthetic use of organometallic compounds • Fundamental organometallic reactions of transition metals • Catalytic cycles • Concepts of catalytic activation <p>Fundamentals of Heterogeneous Catalysis</p> <ul style="list-style-type: none"> • Physisorption/chemisorption • Energetic, electronic and steric interactions of molecules with surfaces • Catalytic cycles • Microkinetics of heterogeneously catalyzed reaktionen <p>Fundamentals of Biocatalysis</p> <ul style="list-style-type: none"> • Fundamental aspects of enzymatic catalysis 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • C. Elschenbroich, Organometallics, 3rd ed., Wiley-VCH, 2006. • D. Steinborn, Fundamentals of Organometallic Catalysis, Wiley-VCH, 2012. • I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet, Concepts of Modern Catalysis, Wiley-VCH, Weinheim 2003. • J. M. Thomas, W. J. Thomas, Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis, Wiley-VCH, Weinheim 1997. 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356401 Vorlesung Grundlagen der Organometallkatalyse • 356402 Vorlesung Grundlagen der Heterogenen Katalyse • 356403 Vorlesung Grundlagen der Biokatalyse 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: <ul style="list-style-type: none"> • Fundamentals of Organometallic Catalysis: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h • Fundamentals of Heterogeneous Catalysis: 1 SWS x 14 Wochen = 14 h 		

- Fundamentals of Biocatalysis: 1 SWS x 14 Wochen = 14 h

Selbststudium:

2 h pro Präsenzstunde = 112 Stunden

Abschlussprüfung, incl. Vorbereitung: 12 h

Summe: 180 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35641 Fundamentals of Catalysis (BSL), schriftliche Prüfung, 90 Min., Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

- 35650 Principles and Applications of Asymmetric Synthesis and Catalysis
- 35660 Advanced Biocatalysis
- 35670 Applied Heterogeneous Catalysis
- 35680 Solid Catalysts and Functional Materials

19. Medienform:

20. Angeboten von: Chemie

212 Spezialmodule

Zugeordnete Module: 35650 Principles and Applications of Asymmetric Synthesis and Catalysis
 35660 Advanced Biocatalysis
 35670 Applied Heterogeneous Catalysis
 35680 Solid Catalysts and Functional Materials
 35690 Modern Inorganic Molecular and Coordination Chemistry
 58080 Modern Polymer Synthesis

Modul: 35660 Advanced Biocatalysis

2. Modulkürzel:	030810048	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Bernhard Hauer		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Wolfgang Kaim • Joachim Bill • Bernhard Hauer 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	<p>Students</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand function and mechanism of enzymes - know methods for production and improvements - are familiar with relevant examples of biocatalysis - master the principles of biocatalysis 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Enzyme Engeneering • mechanistic aspects of biocatalysis • Function of cofactors and metals • Development of screening and assaysystems • Applied aspects and industrial processes • Access to non-physiological products (Synthetic Biology) 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> - Faber, K. Biotransformations in Org. Chemistry, Springer - Bommarius, Riebel: Biocatalysis, Wiley - McMurry, Begley: The organic Chemistry of Biological Pathways 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356601 Vorlesung Biokatalyse • 356602 Vorlesung Synthetische Biologie • 356603 Vorlesung Bioanorganische Chemie 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <p>Vorlesung: 4 SWS x 14 = 56 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>2h pro Präsenzzeit Vorlesung: 112 h</p> <p>Prüfung incl Vorbereitung: 12 h</p> <p>Summe: 180 Stunden</p>		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35661 Advanced Biocatalysis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich,
Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35670 Applied Heterogeneous Catalysis

2. Modulkürzel:	030910039	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Elias Klemm		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Elias Klemm • Ute Tuttlies 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • understand how to scale-up heterogeneously catalyzed processes from laboratory scale to industrial scale • understand the difference between micro- and macro- kinetics and are able to derive vor a given reaction system kinetic equations • know different types of laboratory scale and industrial scale reactors and are able to chose the proper type of reactor • are able to solve complex problems of the after-treatment of exhaust gases of vehicles on the basis of the state of the art and technology 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Fundamentals of micro-kinetics • Fundamentals of macro-kinetics • Fundamentals of reactor modelling • Laboratory scale and industrial scale reactors • Fundamentals and History of after-treatment of exhaust gases. • Three-Way-Catalysts, Diesel particulate filters, DeNOx • Recent developments and integral concepts • Kinetic measurements, modelling and simulation 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • G. Ertl et al. (Eds.), Handbook of Heterogeneous Catalysis, Wiley - VCH 2008 • Emmig, Klemm, Technische Chemie, Springer-Verlag, Berlin, 2005 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356701 Vorlesung Reaktionstechnik der heterogenen Katalyse • 356702 Vorlesung Abgasnachbehandlung in Fahrzeugen 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit, Vorlesung: <ul style="list-style-type: none"> • Heterogeneous Catalysis Engineering, 2 SWS x 14 Wochen = 28 h • Exhaust gas after treatment systems for vehicles, 2 SWS x 14 Wochen = 28 h Selbststudium: <ul style="list-style-type: none"> • 2 h pro Präsenzzeit = 112 h Abschlussklausur incl. Vorbereitung: 12 h Summe: 180 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35671 Applied Heterogeneous Catalysis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35690 Modern Inorganic Molecular and Coordination Chemistry

2. Modulkürzel:	030202041	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Dietrich Gudat		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Wolfgang Kaim • Dietrich Gudat 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Catalysis -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • have detailed knowledge on syntheses and properties of selected classes of molecular compounds • know to explain properties and chemical reactivities of these compounds by using current concepts • know important research areas and current developments in the field of inorganic molecular and coordination chemistry 		
13. Inhalt:	Molecular Chemistry: Synthesis, structures and chemical properties of selected classes of inorganic molecular compounds, e.g. carbene analogues, inorganic multiple bond systems, persistent radicals, frustrated Lewis-pairs; importance of these compounds for applications (e.g. catalysis) Coordination Chemistry: electron configurations of coordination compounds and selected examples of coordination compounds		
14. Literatur:	J. Meyer (Hrsg.), Riedel: Moderne Anorganische Chemie J. Ribas Gispert, Coordination Chemistry		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356901 Vorlesung Modern Molecular Inorganic Chemistry • 356902 Vorlesung Modern Inorganic Coordination Chemistry 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit, Vorlesung: <ul style="list-style-type: none"> • Modern Molecular Inorganic Chemistry, 2 SWS x 14 Wochen = 28 h • Modern Inorganic Coordination Chemistry, 2 SWS x 14 Wochen = 28 h Selbststudium: <ul style="list-style-type: none"> • 2 h pro Präsenzzeit = 112 h Summe: 168 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35691 Modern Inorganic Molecular and Coordination Chemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 58080 Modern Polymer Synthesis

2. Modulkürzel:	031220001	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Michael Buchmeiser		
9. Dozenten:	Michael Buchmeiser		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Grundlagen der Makromolekularen Chemie		
12. Lernziele:	<p>Students have a basic knowledge in the areas of</p> <ul style="list-style-type: none"> • Organo-polymer catalysis • Transition metal catalyzed polyreactions • Molecular heterogeneous and micellar catalysis • Latent one-component catalyst systems and their thermal-/UV-triggered activation • Determination of tacticity of polymers derived from (pro-) chiral monomers 		
13. Inhalt:	<p>Organo-polymer catalysis:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Metal ion- and CO₂-protected N-heterocyclic carbenes as thermally or UV-triggerable initiators • Use as latent catalysts in polyaddition reactions (PUR-synthesis) • Use as latent catalysts in anionic polymerization (poly(acrylate)s, polyamides, epoxides) • Use as latent catalysts in ring-opening polymerizations (lactones, siloxanes) <p>Polyinsertions:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ring-opening metathesis polymerization (ROMP) with well-defined transition metal alkylidenes • 1st, 2nd and 3rd-generation Grubbs- and Grubbs-Hoveyda-catalysts • 1st and 2nd Schrock catalysts • Stereoselective ROMP • Determination of tacticity • 1-Alkyne polymerization • Cyclopolymerization of Hepta- and Octadiynes • Photo-ROMP • Immobilized metathesis catalysts for molecular heterogeneous catalysis • Supported ionic liquid phase (SILP) technology • Ionic metathesis catalysts biphasic reactions • Alternating ROMP 		

Vinyl insertion polymerization (VIP), Ziegler-Natta Polymerization, Polymerization with metallocenes

- Determination of tacticity
- Immobilized Ziegler Natta Systems

Polymerizations with change in the polymerization mechanism

- ROMP-VIP/VIP-ROMP
- ROMP-anionic Polymerization

Atom-Transfer radical polymerization (ATRP), reversible-addition-fragmentation transfer (RAFT) Polymerization, nitroxide-mediated radical polymerization

- Micellar catalysis
- Polymer-supported metal nanoparticles,
- Catalysts in constrained polymeric geometries

14. Literatur:	D. Schlüter, C. J. Hawker, J. Sakamoto, Synthesis of Polymers, Vol. 1-2, Wiley VCH, 2012 ISBN 978-3-527-32757-7
<hr/>	
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	580801 Vorlesung Polymersynthese
<hr/>	
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <p>Vorlesung: 4 SWS x 14 = 56 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>2h pro Präsenzzeit Vorlesung: 112 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>Klausur incl Vorbereitung: 12 h</p> <p>Gesamt 180 h</p>
<hr/>	
17. Prüfungsnummer/n und -name:	58081 Modern Polymer Synthesis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, 90 Min., Gewichtung: 1.0,
<hr/>	
18. Grundlage für ... :	
<hr/>	
19. Medienform:	
<hr/>	
20. Angeboten von:	
<hr/>	

Modul: 35650 Principles and Applications of Asymmetric Synthesis and Catalysis

2. Modulkürzel:	030601037	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	unregelmäßig
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Nach Ankuendigung
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Rene Peters		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Rene Peters • Bernd Plietker 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Synthesechemie A Fundamentals of Catalysis		
12. Lernziele:	<p>Bei der Entwicklung von effizienten, nachhaltigen und technifizierbaren asymmetrischen Synthesen von komplexen chiralen Produkten (wie z.B. Pharmazeutika) ist die kostengünstige Realisierung von hoher Stereoselektivität oftmals eine der wesentlichen Herausforderungen. Im Laufe der letzten Jahrzehnte hat die Synthese von enantiomerenreinen Verbindungen einen steten und raschen Wandel durchlaufen. Immer ausgefeiltere Strategien, Konzepte und Methoden wurden und werden seither entwickelt. Diese Vorlesung soll die Studierenden mit den Prinzipien vertraut machen, die der asymmetrischen Synthese zu Grunde liegen: neben essentiellen Grundlagen wie Konformationsanalysen wird die chronologische Entwicklung des Feldes in ihren wesentlichen Zügen aufgezeigt: von der stöchiometrischen asymmetrischen Synthese mit chiralen Auxiliaren bis zu modernsten Entwicklungen aus dem Bereich der Natur-inspirierten kooperativen asymmetrischen Katalyse. Dies geschieht stets vor dem Hintergrund ein Verständnis für diejenigen elektronischen Wechselwirkungen zu entwickeln, die sich synthetische Chemiker zu Nutze machen können, um möglichst selektiv ein bestimmtes Enantiomer zu generieren. Stereoselektivitätsmodelle sollen somit nachvollzogen werden können und den Studierenden das nötige Rüstzeug geliefert werden, um allfällig in ihrem Laboralltag auftretende Stereoselektivitätsprobleme zu lösen, bis hin zum Design neuer Katalysatoren.</p>		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der stereoseletiven Synthese (Selektivität, Stereodifferenzierung, Konformationsanalysen, asymmetrische Induktion, Selektivitätsmodelle) • Konzepte der Asymmetrischen Synthese und Katalyse (Asymmetrische Synthese über chirale Auxiliare, Asymmetrische Synthese mit chiralen Katalysatoren) • Synthese von komplexen organischen Verbindungen durch asymmetrische Methoden • Asymmetrische Synthese und Katalyse im industriellen Maßstab 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • E. L. Eliel, S. H. Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley-VCH 1994 		

- C. Wolf, Dynamic Stereochemistry of Chiral compounds, RSC 2007
- P. J. Walsh, M. C. Kozlowski, Fundamentals of Asymmetric Catalysis, University Science Books, 2009
- Stereochemie - Grundbegriffe; Karl-Heinz Hellwich, Springer (Taschenbuch) 2007, 2. Auflage (Stereochemische Begriffe alphabetisch geordnet)
- Stereoselektive Synthese, L. N. Mander, WILEY VCH 1998, gekürzt aus dem Englischen
- Reaktionsmechanismen, Reinhard Brückner, Spektrum Akademischer Verlag 2011, 3. Auflage, Stereochemische Begriffe alphabetisch geordnet
- René Peters, Cooperative Catalysis, Wiley-VCH, 2015.

15. Lehrveranstaltungen und -formen:

- 356501 Vorlesung Prinzipien der Asymmetrischen Synthese und Katalyse
- 356502 Vorlesung Anwendungen der Asymmetrischen Synthese und Katalyse

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

Präsenzzeit, Vorlesung:

- Principles of Asymmetric Synthesis and Catalysis: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h
- Applications of Synthesis and Asymmetric Catalysis: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h

Selbststudium:

- 2 h pro Präsenzstunde = 112 Stunden

Abschlussprüfung, incl. Vorbereitung: 12 h

Summe: 180 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name:

35651 Principles and Applications of Asymmetric Synthesis and Catalysis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, 90 Min., Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von: Institut für Organische Chemie

Modul: 35680 Solid Catalysts and Functional Materials

2. Modulkürzel:	030900040	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	PD Yvonne Traa		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Michael Hunger • Yvonne Traa 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Catalysis -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students know details about preparation, characterization and application of functional materials and solid catalysts as well as mechanisms of the most important reactions occurring at the surface of solids. The students understand the special size-dependent phenomena of nanomaterials.		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Synthesis routes for the preparation of industrially relevant solid catalysts • Examples for mechanisms of industrially relevant, heterogeneously catalyzed reactions • Surface-dependent effects of nanoparticles, dispersion and coordination number • Special techniques for characterization of structure, morphology and surface sites of solids, e.g., electron microscopy, X-ray diffraction and absorption, IR spectroscopy, mass and electron spectroscopy, EPR, NMR spectroscopy and thermal methods 		
14. Literatur:	Lecture notes; F. Schüth et al., „Handbook of Porous Solids“, 2002; G. Ertl et al., „Handbook of Heterogeneous Catalysis“, 2008; E. Roduner, „Nanomaterials: Size-Dependent Phenomena“, 2006		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356801 Vorlesung incl. Übungen Preparation and Properties of Solid Catalysts and Functional Materials • 356802 Vorlesung incl. Übungen Characterization of Solid Catalysts and Functional Materials 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<u>Vorlesung</u> Präsenzzeit: 56 Stunden Selbststudium: 84 Stunden <u>Praktische Übungen im Labor und am Gerät</u> Präsenzzeit: 14 Stunden Selbststudium: 26 Stunden Summe: 180 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35681 Solid Catalysts and Functional Materials (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

220 Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules

Zugeordnete Module: 221 Grundmodul
 222 Spezialmodule

221 Grundmodul

Zugeordnete Module: 35700 Advanced Materials Analysis: Structure and Properties

Modul: 35700 Advanced Materials Analysis: Structure and Properties

2. Modulkürzel:	031310061	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes Semester
4. SWS:	5.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Hans-Joachim Massonne		
9. Dozenten:	Hans-Joachim Massonne		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Grundmodul →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students acquire basic knowledge of advanced methods for analyzing materials. Furthermore, the students are able to take part in expert discussions about "materials analysis"		
13. Inhalt:	Ring lecture series / seminar: The lectures deal with (1) basics of microstructures of materials, (2) relationships between these microstructures and the characteristics of materials as well as (3) the theoretical background of the analytical methods applied in the laboratories. Laboratories: Small groups of students (up to 3) solve a number of analytical problems by using specific methods such as Raman and polarizing microscopy, ICP mass spectrometry, powder X-ray diffraction, and X-ray fluorescence and electron microprobe analysis.		
14. Literatur:	R.W. Cahn, P. Haasen, E.J. Kramer, Materials Science and Technology, Vol. 2A, Characterization of Materials, VCH, 1992; T. Dieing, O. Hollricher, J. Toporski, Confocal Raman Microscopy, Springer Verlag, 2010; J.H. Gross, Mass Spectrometry, Springer Verlag, 2004; S.J.B. Reed, Electron Microprobe Analysis, Cambridge University Press, 1993; R. Thomas, A Practical Guide to ICP-MS: A Tutorial for Beginners, CRC Press, 2nd Ed. 2008; B.E. Warren, X-Ray Diffraction, Dover Publ., 1990		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357001 Ringvorlesung/Seminar Materialanalyse für Fortgeschrittene: Struktur und Eigenschaften • 357002 Übung Materialanalyse für Fortgeschrittene: Struktur und Eigenschaften 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Ringvorlesung/Seminar Präsenzzeit: 28 Stunden Selbststudium: 42 Stunden Praktikum Präsenzzeit: 42 Stunden Selbststudium: 68 Stunden Summe: 180 Stunden		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35701 Advanced Materials Analysis: Structure and Properties (BSL),
schriftlich oder mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von: Institut für Mineralogie und Kristallchemie

222 Spezialmodule

Zugeordnete Module:	35710	Surfaces & Colloids
	35720	Solid State and Materials Chemistry
	35730	Functional Organic Molecules
	35750	Liquid Crystals
	35760	Phase Transformations
	36740	New Materials and Materials Characterization Methods
	58070	Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien
	58080	Modern Polymer Synthesis

Modul: 35730 Functional Organic Molecules

2. Modulkürzel:	030610044	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Sabine Laschat		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Sabine Laschat • Clemens Richert 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Knowledge of the synthesis and applications of functional organic molecules		
13. Inhalt:	Functional Organic Molecules <ul style="list-style-type: none"> • Functional hetero- and carbocyclic compounds • Makrocyclic compounds • Phase transfer catalysts Advanced Bioorganic Compounds <ul style="list-style-type: none"> • Chemistry of important classes of biologically active com-pounds with special focus on compounds, which are relevant for medicine or biotechnology 		
14. Literatur:	E. V. Anslyn, D. A. Dougherty, Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books, Sausalito/CA, 2006		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357301 Vorlesung Funktionelle Organische Moleküle • 357302 Vorlesung Bioorganische Verbindungen für Fortgeschrittene 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 56 h Selbststudium: 124 h Summe: 180 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35731 Functional Organic Molecules (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 35750 Liquid Crystals

2. Modulkürzel:	030710046	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 4. Semester, WiSe
4. SWS:	5.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Frank Gießelmann		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Sabine Laschat • Frank Gießelmann 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Grundmodul im Forschungsprofil 2		
12. Lernziele:	<ul style="list-style-type: none"> • Understanding of physico-chemical fundamentals of the liquid-crystalline state and its technical and biological relevance, • study of the significance of structure-property relationships exemplarily on liquid-crystalline materials and • learning of the interaction of chemical synthesis (of a liquid crystal) and (its) physico-chemical characterization in a combined practical course as well as documentation of the practical work (in English language). 		
13. Inhalt:	<p><u>Introduction in the liquid-crystalline state</u> Liquid crystals as 4th aggregate state of matter, scientific and technical relevance, formation and structure of liquid-crystalline phases, lyotropic liquid crystals, biological relevance.</p> <p><u>Synthesis of liquid-crystalline mesogens</u> Retrosynthesis of nematic, smectic and columnar liquid crystals, synthetic methods for core building blocks, Ullmann, Stille, Suzuki, Negishi coupling, Scholl reaction, alkyne trimerization, Sonogashira coupling, Heck reaction, Cadiot-Chodkiewicz coupling, Glaser coupling, functionalization of the side chain.</p> <p><u>Theory of the liquid-crystalline order</u> Orientation distribution functions, Maier-Saupe- and Landau-de Gennes theory.</p> <p><u>Physico-chemical properties</u> Anisotropy, liquid crystals in electric and magnetic fields, optical properties, elasticity and viscosity, chirality effects.</p> <p><u>Technical applications</u> Electro-optical effects, liquid crystal displays (LCDs), liquid-crystalline templates and sensors, OLEDs.</p>		
14. Literatur:	P. J. Collings and M. Hird: Introduction to Liquid Crystals - Chemistry and Physics, London (Taylor & Francis) 1997.		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357501 Vorlesung Flüssigkristalle • 357502 Seminar Flüssigkristalle • 357503 Praktikum Flüssigkristalle 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Vorlesung: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h Vor- und Nachbereitung: 2 h pro Präsenzstunde = 56 h		

Seminar: 1 SWS x 12 Wochen = 12 h
Vor- und Nachbereitung: 1.5 h pro Präsenzstunde = 18 h

Praktikum: 6 Praktikumstage á 4 h = 24 h
Vorbereitung und Bericht = 42 h

SUMME: 180 h

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35751 Liquid Crystals (BSL), schriftlich, eventuell mündlich,
Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von: Physikalische Chemie I

Modul: 58070 Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien

2. Modulkürzel:	031420001	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	5.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Guido Schmitz		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Guido Schmitz • Zoltán Balogh • Manuel Roussel 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Wünschenswert: Einführende Veranstaltungen in Festkörperchemie, Festkörperphysik, Materialwissenschaften oder Kristallographie		
12. Lernziele:	Die Studierenden können unterschiedliche Aspekte mechanischen Verhaltens voneinander abgrenzen und erklären. <ul style="list-style-type: none"> - Die Studierenden kennen gängige mechanische Prüfverfahren und können typische Messdaten interpretieren. - Die Studierenden beherrschen die Berechnung einfacher elastischer Probleme anisotroper Elastizität. - Die Studierenden können den Zusammenhang zwischen makroskopischer Verformung, Kristallsymmetrie und der Erzeugung und Bewegung mikroskopischer Defekte erklären. - Die Studierenden verstehen grundlegenden Strategien zur Härtung von Materialien. - Die Studierenden kennen Fragestellungen aktueller wissenschaftliche Forschung in der Mechanik nanoskalierter Materialien 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> - Phänomenologie mechanischer Eigenschaften: Elastizität, Anelastizität, Pseudoelastizität, Viskosität, Plastizität, Härte, Zähigkeit, Ermüdung, Bruch - Mechanische Prüfverfahren - Elastizitätstheorie: Spannung, Verzerrung, Elastische Moduli, Tensorformalismus - Messung elastischer Moduli - Energie- und Entropie-Elastizität - Plastische Verformung und Versetzungen - Grundzüge der Versetzungstheorie - Prinzipien des mechanischen Materialdesigns - Materialversagen durch Bruch, Fraktographie 		

- Materialermüdung unter Wechselbelastung
 - Mechanische Eigenschaften Nanostrukturierter Materialien
 - Prinzipien der Materialauswahl
-

14. Literatur:
- T. H. Courtney, Mechanical Behaviour of Materials, Long Grove 2005
 - S.P. Timoshenko, J. N. Goodier, Theory of Elasticity, New York 1970
 - M. Ashby, Materials Selection in Mechanical Design, Oxford 1999
 - G. Weidman et al., Structural Materials, London 1990
-

15. Lehrveranstaltungen und -formen:
- 580701 Vorlesung Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien
 - 580702 Übung Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien
-

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:
- Vorlesung: Präsenzzeit: 14*4 h=56 h,
Selbststudium: 64 h
Übung: Präsenzzeit: 14 h,
Selbststudium: 46 h
gesamt: 180
-

17. Prüfungsnummer/n und -name: 58071 Mechanische Eigenschaften der Strukturmaterialien (BSL), mündliche Prüfung, 30 Min., Gewichtung: 1.0
-

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von: Materialphysik

Modul: 58080 Modern Polymer Synthesis

2. Modulkürzel:	031220001	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Michael Buchmeiser		
9. Dozenten:	Michael Buchmeiser		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Grundlagen der Makromolekularen Chemie		
12. Lernziele:	Students have a basic knowledge in the areas of <ul style="list-style-type: none"> • Organo-polymer catalysis • Transition metal catalyzed polyreactions • Molecular heterogeneous and micellar catalysis • Latent one-component catalyst systems and their thermal-/UV-triggered activation • Determination of tacticity of polymers derived from (pro-) chiral monomers 		
13. Inhalt:	Organo-polymer catalysis: <ul style="list-style-type: none"> • Metal ion- and CO₂-protected N-heterocyclic carbenes as thermally or UV-triggerable initiators • Use as latent catalysts in polyaddition reactions (PUR-synthesis) • Use as latent catalysts in anionic polymerization (poly(acrylate)s, polyamides, epoxides) • Use as latent catalysts in ring-opening polymerizations (lactones, siloxanes) Polyinsertions: <ul style="list-style-type: none"> • Ring-opening metathesis polymerization (ROMP) with well-defined transition metal alkylidenes • 1st, 2nd and 3rd-generation Grubbs- and Grubbs-Hoveyda-catalysts • 1st and 2nd Schrock catalysts • Stereoselective ROMP • Determination of tacticity • 1-Alkyne polymerization • Cyclopolymerization of Hepta- and Octadiynes • Photo-ROMP • Immobilized metathesis catalysts for molecular heterogeneous catalysis • Supported ionic liquid phase (SILP) technology • Ionic metathesis catalysts biphasic reactions • Alternating ROMP 		

Vinyl insertion polymerization (VIP), Ziegler-Natta Polymerization, Polymerization with metallocenes

- Determination of tacticity
- Immobilized Ziegler Natta Systems

Polymerizations with change in the polymerization mechanism

- ROMP-VIP/VIP-ROMP
- ROMP-anionic Polymerization

Atom-Transfer radical polymerization (ATRP), reversible-addition-fragmentation transfer (RAFT) Polymerization, nitroxide-mediated radical polymerization

- Micellar catalysis
- Polymer-supported metal nanoparticles,
- Catalysts in constrained polymeric geometries

14. Literatur:	D. Schlüter, C. J. Hawker, J. Sakamoto, Synthesis of Polymers, Vol. 1-2, Wiley VCH, 2012 ISBN 978-3-527-32757-7
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	580801 Vorlesung Polymersynthese
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <p>Vorlesung: 4 SWS x 14 = 56 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>2h pro Präsenzzeit Vorlesung: 112 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>Klausur incl Vorbereitung: 12 h</p> <p>Gesamt 180 h</p>
17. Prüfungsnummer/n und -name:	58081 Modern Polymer Synthesis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, 90 Min., Gewichtung: 1.0,
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

Modul: 36740 New Materials and Materials Characterization Methods

2. Modulkürzel:	031420020	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	6.5	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Guido Schmitz		
9. Dozenten:	Horst Strunk		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • have knowledge of the structure and function of biological and nano-structured materials • have knowledge of the basic principles of testing and characterization techniques • are able to select a proper means of testing/analysis for a given problem • are able to communicate with experts in this field about biological and nano-structured materials as well as testing and characterization methods 		
13. Inhalt:	<p>Biological materials : wood, bone, teeth, silk, resilin</p> <p>Bio-inspired materials : functional surfaces</p> <p>Biological strategies : self-cleaning (lotus-effect), reduction of flow resistance (shark skin), adhesion design (insects and reptiles), self-organization (cytoskeleton)</p> <p>nanostuctured materials : nano-crytalline metals, nanoparticles, nanorods, quantum dots & lines, thin films, structuring, applications</p> <p>characterization methods : high resolution microscopy, synchrotrontechniques</p>		
14. Literatur:			
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 367401 Lecture New Materials and Materials Characterization Methods • 367402 Laboratory Course New Materials and Materials Characterization Methods 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Vorlesung: Präsenzstunden: 5 SWS * 14 Wochen 84 h Vor- und Nachbereitung: 1, 5 h pro Präsenzstunde 105 h Klausur incl. Vorbereitung: 5 h Gesamt: 180 h</p>		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 36741 New Materials and Materials Characterization Methods (BSL),
schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35760 Phase Transformations

2. Modulkürzel:	031410018	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 4. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Eric Jan Mittemeijer		
9. Dozenten:	Eric Jan Mittemeijer		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The Students <ul style="list-style-type: none"> • are proficient in the field of solid state kinetics of materials. • are familiar with the most important manufacturing techniques in the field of surface engineering and have knowledge about the properties of produced surfaces of the materials. • are able to apply the concepts of solid state kinetics and surface engineering methods in the development and research of new materials • have the ability to communicate with other experts with a scientific or engineering background. 		
13. Inhalt:	<p>Solid state kinetics: Diffusion and phase transformation kinetics Significance of the diffusion for the microstructure, defects; Fick's laws, thermodynamic factor, examples, Boltzmann-Matano analysis; substitutional and interstitial diffusion, Simmons and Balluffi experiment; Kirkendall-Effect, Darken-equation, Onsager-relations; grain boundary diffusion (Fisher, Suzuoka, Whipple), diffusion along dislocations, diffusion induced grain boundary migration; Schottky- and Frenkel-defects, mass transport in chemical and electrical potential fields, effect of impurities; Diffusion in ionic semiconductors; diffusion in semiconductors, electromigration, interstitials in metals-> electron wind; homogeneous and heterogeneous reactions, Johnson-Mehl-Avrami equation, critical particle size, analysis of transformation kinetics.</p> <p>Surface Engineering Thermochemical processes: carburizing, nitriding, oxidizing, CVD and PVD, et cetera Characterizing of surfaces and thin layers: Development and measurement of residual stresses; Depth profile analysis</p>		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • Fundamentals of Materials Science, E.J. Mittemeijer, Springer, 2010 • Diffusion in Solids, Paul Shewmon, Wiley • Phase Transformations in Metals and Alloys, D.A. Porter, K.E. Easterling, Chapman & Hall • Introduction to the Thermodynamics of Materials, D.R. Gaskell, Taylor & Francis 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	357601 Vorlesung + Übung Phasenumwandlungen		

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

Vorlesung:

Präsenzstunden: 3SWS * 14 Wochen 42h

Vor- und Nachbereitung: 2 h pro Präsenzstunde 84h

Übung:

Präsenzstunden: 1SWS * 14 Wochen 14h

Vor- und Nachbereitung: 2,5h pro Präsenzstunde 35h

Gesamt: 175h

17. Prüfungsnummer/n und -name:

35761 Phase Transformations (BSL), schriftlich, eventuell mündlich,
Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35720 Solid State and Materials Chemistry

2. Modulkürzel:	03020143	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Rainer Niewa		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Thomas Schleid • • Rainer Niewa 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • are able to classify and describe solid compounds • understand concepts to comprehend and predict stable compounds • are able to correlate crystal structures and properties 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Structures and chemical bonding in complex inorganic compounds • Structure-properties correlations in solids • Synthesis strategies for solid materials • Functional properties of solids • Important analytical techniques for solid state compounds 		
14. Literatur:	U. Müller, Inorganic Structural Chemistry A. West, Basic Solid State Chemistry		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357201 Vorlesung Chemie metallischer Materialien • 357202 Vorlesung Chemie nichtmetallischer Materialien 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<u>Lecture:</u> Präsenzstunden:Chemistry of Metallic Materials: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h; Chemistry of Nonmetallic Materials: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h Vor- und Nachbereitung: 2 h pro Präsenzstunde = 112 h Abschlussprüfung incl. Vorbereitung 12 h Summe: 180 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35721 Solid State and Materials Chemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 35710 Surfaces & Colloids

2. Modulkürzel:	030720042	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 4. Semester, WiSe
4. SWS:	5.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Cosima Stubenrauch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Thomas Sottmann • Cosima Stubenrauch • Peer Fischer 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 2: Materials and Functional Molecules -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	BSc Chemistry or BSC Material Sciences, Modul "Advanced Materials: Structure and Properties"		
12. Lernziele:	The students are able to <ul style="list-style-type: none"> • apply the fundamentals of physical chemistry when describing characteristics of surfaces and colloids. • describe the significance of structure-property relationships on different length scales (macro, micro, nano). • identify characteristic properties of surfactant solutions and microemulsions by employing appropriate experimental techniques and methods. • interpret experimental results properly and submit adequate written reports on those results. • give coherent oral reports on complex scientific problems in the field of surfaces and colloids. 		
13. Inhalt:	Lecture Part I: Theoretical Background for Laboratories Surfaces, surfactants, surface tension, formation of micelles and soft colloids, microemulsions and their structure, emulsions Lecture Part II: Special Topics Foams; Plasmons; Active Colloids; Variation of Colloidal Shape; Interactions between Colloids (and Matrix); Directed Assembly of Colloidal Structures Seminar & Laboratories After all laboratories each group presents and compares the results of all groups for one of the experiments. The different results from different surfactants should be discussed on the basis of the lecture content. In the laboratories (6 lab days, 4 hours per day), which are an integral part of the module, methods for measuring interfacial tensions, for determining phase diagrams as well as for characterising micellar solutions, microemulsions and emulsions will be used. Protocols for the laboratories are a mandatory requirement to be allowed to sit the written exam.		

14. Literatur:	(a) Surfaces, Interfaces, and Colloids, D. Myers, 2nd ed., John Wiley & Sons, 1999; (b) The Colloidal Domain, D. Evans, H. Wennerström, 2nd ed., John Wiley & Sons, 1999; (c) Emulsions, Foams, and Suspensions, L. Schramm, Wiley, 2005; (d) Microemulsions: Background, New Concepts, Applications, Perspectives, C. Stubenrauch (Ed.), John Wiley & Sons, Oxford, (2009), ISBN 978-1-4051-6782-6
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	357101 Vorlesung+Praktikum+Seminar Oberflächen und Kolloide
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Lecture attendance: 26 hours autonomous student learning: 52 hours Seminar attendance: 4 hours autonomous student learning: 14 hours Laboratories attendance: 24 hours (6 lab days à 4 h) autonomous student learning: 60 hours Total: 180 hours
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35711 Surfaces & Colloids (BSL), schriftliche Prüfung, 90 Min., Gewichtung: 1.0, (or oral examination, 30 min)
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

230 Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology

Zugeordnete Module: 231 Grundmodul
 232 Spezialmodule

231 Grundmodul

Zugeordnete Module: 35770 Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry

Modul: 35770 Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry

2. Modulkürzel:	030300047	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Albert Jeltsch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Albert Jeltsch • Sabine Laschat • Hans Rudolph • Dieter Wolf • Clemens Richert 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Grundmodul →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Students will - understand the processes of Nucleic acid biochemistry and Molecular Biology - understand the advanced aspects of general metabolism - familiarize themselves with the principles of the evolutionary origin of Nucleic acid biochemistry processes - comprehend the principles of regulation of these processes and their roles in living cells - understand the mechanisms of key reactions in selected biosynthetic pathways - know synthesis and activities of selected bioactive compounds - are familiar with the bioorganic chemistry of certain biopolymers		
13. Inhalt:	Stoffwechselbiochemie <ul style="list-style-type: none"> • Kohlenhydratstoffwechsel: Glukoneogenese, Regulation • Glycogenabbau und Synthese, Regulation • Protein- und Aminosäureabbau (Harnstoffzyklus, Transaminierungen, Abbau der Ketosäuren) • Aminosäuresynthese (N-Fixierung, Synthese der Ketosäuren) • Nukleotidabbau und Synthese • Stoffwechsel und Funktion von Lipiden (Membranlipide, Isoprenoide, Eikosanoide, Steroide) • Photosynthese (Bakterielle Photosysteme, Lichtreaktion, Dunkelreaktion, Regulation, C4 Pflanzen) • Grundlagen der Physiologie des Zucker-, Fett- und Aminosäurestoffwechsels und der hormonalen Kontrolle • Pathophysiologische Effekte Nukleinsäure Biochemie <ul style="list-style-type: none"> • Struktur von Nukleinsäuren (A, B, Z DNA, RNA, Topologie, Tripelhelix, Tetraden, h-Loops, Modifikation von Nukleinsäuren) • Struktur und Mechanismus von DNA bindenden Proteinen und Enzymen 		

- DNA Replikation (Mechanismus der DNA Polymerase, DNA Polymerasen in Bakterien und Eukaryoten, Intitiation, Termination)
- DNA Reparatur (Typen von DNA Schäden, postreplikative Reparatur, Base Excision, Nucelotide Excision, direkte Reparatur, non-homologous end joning, homologe Rekombination)
- Transkription und RNA Modifikation (RNA Polymerase, Modifikation von mRNA, rRNA und tRNA)
- Proteinbiosynthese (tRNAs, genetischer Code, Aminoacyl tRNA Synthetasen, Struktur von Ribosomen, Initiation, Elongation, Termination, nicht natürliche Aminosäuren)
- Genregulation in Prokaryoten (Operon, Attenuator, Riboswitch, Genetische Schalter)

Bioorganische Chemie

- Natürliche und synthetische bioaktive Stoffe
- Bioorganische Chemie der Biopolymeren

14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> - current primary literature - Stryer, Biochemistry (6. th ed.), Freemann, New York - Voet, Voet & Pratt, Principles of Biochemistry: Life at the Molecular Level (3rd ed.), Wiley 2008
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357701 Vorlesung - Nukleinsäure Biochemie • 357702 Vorlesung Bioorganische Chemie • 357703 Vorlesung Biosynthesen und Metabolismus
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <p>Die Studierenden müssen 2 der 3 angebotenen Vorlesungen besuchen, die dann auch Inhalt der Prüfung sind.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung 1: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h • Vorlesung 2: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h <p>Selbststudium:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 2 h pro Präsenzstunde = 112 h <p>Abschlussprüfung incl. Vorbereitung : 12 h</p> <p>Summe: 180 Stunden</p>
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35771 Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	Institut für Biochemie

232 Spezialmodule

Zugeordnete Module: 35660 Advanced Biocatalysis
 35780 Advanced Bioorganic Chemistry
 35790 Biochemie Praktikum für Chemiker
 35800 Genregulation, Chromatin und molekulare Epigenetik
 35810 Computational Biochemistry
 58060 DNA Biochemie und Molekulare Epigenetik Praktikum und Seminar für
 Studierende der Chemie

Modul: 35660 Advanced Biocatalysis

2. Modulkürzel:	030810048	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Bernhard Hauer		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Wolfgang Kaim • Joachim Bill • Bernhard Hauer 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 1: Advanced Synthesis and Caralysis -->Spezialmodule →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	<p>Students</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand function and mechanism of enzymes - know methods for production and improvements - are familiar with relevant examples of biocatalysis - master the principles of biocatalysis 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Enzyme Engeneering • mechanistic aspects of biocatalysis • Function of cofactors and metals • Development of screening and assaysystems • Applied aspects and industrial processes • Access to non-physiological products (Synthetic Biology) 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> - Faber, K. Biotransformations in Org. Chemistry, Springer - Bommarius, Riebel: Biocatalysis, Wiley - McMurry, Begley: The organic Chemistry of Biological Pathways 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 356601 Vorlesung Biokatalyse • 356602 Vorlesung Synthetische Biologie • 356603 Vorlesung Bioanorganische Chemie 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <p>Vorlesung: 4 SWS x 14 = 56 h</p> <p>Selbststudium:</p> <p>2h pro Präsenzzeit Vorlesung: 112 h</p> <p>Prüfung incl Vorbereitung: 12 h</p> <p>Summe: 180 Stunden</p>		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35661 Advanced Biocatalysis (BSL), schriftlich, eventuell mündlich,
Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35780 Advanced Bioorganic Chemistry

2. Modulkürzel:	030620049	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Clemens Richert		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Clemens Richert • Jörg Senn-Bilfinger • Peter Fischer • Michael Börsch 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Students will <ul style="list-style-type: none"> • be exposed to current topics in bioorganic and biophysical chemistry • learn how biologically relevant molecules are synthesized, understand their spectroscopic and biophysical properties, and gain insights into their function • develop an understanding of the principles of bioorganic and biophysical chemistry 		
13. Inhalt:	<p>This course will be taught in two separate classes. The first of the classes is entitled Advanced Bioorganic Compounds and focuses on compounds used in contemporary bioorganic and biomedical chemistry. The second of the courses focuses on spectroscopic and structural aspects of bioorganic compounds. This class is entitled Biophysical Chemistry and Structure.</p> <p>In Advanced Bioorganic Compounds the chemistry of important classes of biologically relevant compounds will be presented with an emphasis on compounds that are used in biomedical or biotechnological applications.</p> <p>In Biophysical Chemistry and Structure the structure and dynamics of biologically relevant molecules and biomacromolecules will be presented. Topics may include methods for the detection, characterization, and structural characterization of biomolecules, as well as methodologies for labeling and conformational studies.</p>		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> - Claridge, T. D. W. "High-Resolution NMR techniques in Organic Chemistry", Elsevier (2008) - R. Phillips et al., Physical Biology of the Cell, Garland (2009) - Blackburn, Gait, Loakes and Williams, Nucleic Acids in Chemistry and Biology, RSC Publishing, 2006. 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 357801 Vorlesung Bioorganische Verbindungen für Fortgeschrittene • 357802 Vorlesung Biophysikalische Chemie und Struktur 		

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

Präsenzzeit: 56 Stunden
Selbststudium: 124 Stunden
Summe: 180 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name:

35781 Advanced Bioorganic Chemistry (BSL), schriftlich, eventuell
mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35790 Biochemie Praktikum für Chemiker

2. Modulkürzel:	030300050	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Albert Jeltsch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Philipp Rathert • Albert Jeltsch 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • Lernen grundlegende Methoden in der praktischen Biochemie, Proteinchemie, und Molekularbiologie. • Erlernen die Dokumentation von Versuchsergebnissen • Diskutieren Ergebnisse mit Hilfe von Literaturangaben Erlernen die Planung von Experimenten mit Kontrollen und Wiederholungen		
13. Inhalt:	Methoden der Biochemie <ul style="list-style-type: none"> • Proteine: Aktivität, Reinigung, Löslichkeit, Stabilität • Elektrophorese, Western Blot • Enzymkinetik, Photometrie • DNA: Polymerase-Kettenreaktion (PCR), Elektrophorese, Restriktionsverdau • Kohlenhydrat Biochemie 		
14. Literatur:	Pratikumsskript		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	357901 Biochemie Praktikum für Chemiker		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Praktikum und Seminar Biochemie Präsenzzeit: 80 Stunden (10 Tage a 8 Stunden) Selbststudium: 50 Stunden Verfassen des Protokolls: 30 Stunden SUMME: 160 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35791 Biochemie Praktikum für Chemiker (BSL), schriftliche Prüfung, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :	<ul style="list-style-type: none"> • 80730 Bachelorarbeit Chemie • 80250 Masterarbeit Chemie 		
19. Medienform:			
20. Angeboten von:	Institut für Biochemie		

Modul: 35810 Computational Biochemistry

2. Modulkürzel:	030800051	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Apl. Prof. Jürgen Pleiss		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Jürgen Pleiss • Johannes Kästner 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	<p>The students</p> <ul style="list-style-type: none"> • know widely used bioinformatics methods to analyse protein sequences and to model protein structures • are able to apply these methods to simple problems by using biological databases and bioinformatics tools, and to present and discuss the results in written and in oral form • understand the basic concepts of the description of proteins by force fields • know system properties that can be modelled by molecular dynamics simulations, and know the respective methods • know the biochemical properties that can be modelled by QM/MM simulations • know how molecular mechanics and molecular docking are applied to predict protein-ligand-complexes 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • biological databases (sequence and structure of proteins) • sequence alignment • phylogenetic analysis • patterns, profiles, domains • protein architectures and protein folding • modelling of protein structure • molecular dynamics simulation • force fields for proteins and ligands • QM/MM simulations • docking of proteins and ligands 		
14. Literatur:	<p>Durbin, Eddy, Krogh, Mitchison "Biological Sequence Analysis" Leach "Molecular Modelling"</p>		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358101 Vorlesung Bioinformatik 1 • 358102 Vorlesung Simulation von Proteinen • 358103 Übung Simulation von Proteinen 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit: 56 Stunden Selbststudium: 124 Stunden Summe: 180 Stunden</p>		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35811 Computational Biochemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 58060 DNA Biochemie und Molekulare Epigenetik Praktikum und Seminar für Studierende der Chemie

2. Modulkürzel:	030300001	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Nach Ankuendigung
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Albert Jeltsch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Pavel Bashtrykov • Albert Jeltsch • Srikanth Kudithipudi • Tomasz Jurkowski 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry		
12. Lernziele:	In der Laborübung erlernen die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • den Einsatz moderner Methoden in der Biochemie und Molekularen Epigenetik • Experimente zu planen, durchzuführen und auszuwerten • das Verfassen von Laborprotokollen Im Seminar diskutieren die moderne Literatur und erlernen die Präsentation von Ergebnissen		
13. Inhalt:	Mechanismen der Genregulation, Epigenetische Signale und Modellsysteme, Mechanismen epigenetischer Regulation, Chromatinstruktur, zelluläre Biochemie Methoden zum Studium der DNA Bindung, Protein-Protein Wechselwirkung, Proteinanalytik, und Proteinexpression		
14. Literatur:	Nelson/Cox, Lehninger Biochemistry Watson et al., Molecular Biology of the Gene. Epigenetics Allis/Jenuwein/Reinbert, Cold Spring Harbor Laboratory Press		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 580602 Seminar Biochemische Methoden für Fortgeschrittene • 580603 Praktikum Biochemische Methoden für Fortgeschrittene 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Laborübung Präsenzzeit: 50 Stunden Selbststudium: 70 Stunden Summe: 120 Stunden Seminar Präsenzzeit: 10 Stunden		

Selbststudium: 20 Stunden

Summe: 30 Stunden

SUMME: 180 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name: 58061 DNA Biochemie und Molekulare Epigenetik Praktikum und Seminar für Studierende der Chemie (BSL), Sonstiges, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35800 Genregulation, Chromatin und molekulare Epigenetik

2. Modulkürzel:	030300057	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Albert Jeltsch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Albert Jeltsch • Pavel Bashtrykov • Tomasz Jurkowski • Philipp Rathert 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Biochemie für Fortgeschrittene oder Advanced Biochemistry and Bioorganic Chemistry		
12. Lernziele:	Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • verstehen die molekularen Grundlagen des biologischen Informationstransfers und der Regulation der Genexpression • verstehen die Struktur und Dynamik von Chromatin • verstehen die Konzepte und molekulare Mechanismen der Genregulation • können Experimente entwerfen, experimentelle Daten kritisch interpretieren und Schlußfolgerungen aus experimentellen Befunden schließen • können die Aussagekraft experimenteller Strategien einschätzen und geeignete Kontrollexperimente entwerfen • verstehen die molekularen Grundlagen des biologischen Informationstransfers und der Regulation der Genexpression • lernen moderne Konzepte von epigenetischen Regulationsprozessen • wenden molekulare Grundlagen epigenetischer Prozesse an um biologische Vorgänge wie Entwicklung und Differenzierung zu verstehen • verstehen die Rolle epigenetischer Prozesse bei Krankheiten 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Struktur und Funktion von Chromatin • Mechanismen der Genregulation in Eukaryoten • Epigenetische Modellsysteme • Mechanismen epigenetischer Regulation • DNA Modifikation (Methylierung, Oxidation von Methylcytosin) • Histon Modifikationen (Acetylierung, Methylierung, Ubiquitylierung) • Nicht codierende RNA • Imprinting • X-Chromosom Inaktivierung • Differenzierung und Stammzellen • Rolle epigenetischer Regulation bei Krankheiten • Epigenetische System in Pflanzen 		
14. Literatur:	Nelson/Cox, Lehninger Biochemistry Watson et al., Molecular Biology of the Gene. Epigenetics Allis/Jenuwein/Reinbert, Cold Spring Harbor Laboratory Press		

	aktuelle Publikationen
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	358001 Vorlesung Genregulation, Chromatin und molekulare Epigenetik
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit 4 SWS x 14 Wochen: 56 h Selbststudium: 112 h (ca. 2 h pro SWS) Prüfungsvorbereitung und Prüfung: 12 h Summe: 180 h
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35801 Genregulation, Chromatin und molekulare Epigenetik (BSL), schriftliche Prüfung, 60 Min., Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	<ul style="list-style-type: none">• 80630 Masterarbeit Technische Biologie• 80250 Masterarbeit Chemie
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	Institut für Biochemie

240 Forschungsprofil 4: Theory and Simulation

Zugeordnete Module: 241 Grundmodul
 242 Spezialmodule

241 Grundmodul

Zugeordnete Module: 35820 Advanced Methods of Quantum Chemistry

Modul: 35820 Advanced Methods of Quantum Chemistry

2. Modulkürzel:	031110052	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Andreas Köhn		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Hans-Joachim Werner • Johannes Kästner • Andreas Köhn 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Grundmodul →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Vorlesung Theoretische Chemie, Vorlesung Computational Chemistry		
12. Lernziele:	The students <ul style="list-style-type: none"> • Know the most important methods of quantum chemistry. • Are able to choose for a given simulation task an appropriate method. • Can judge the computational effort and the accuracy of different methods. • Understand the physical and mathematical foundations of important quantum chemical methods. 		
13. Inhalt:	Hartree-Fock Theory; method of second quantization; static and dynamical electron correlation effects; configuration interaction, Møller-Plesset perturbation theory, coupled-cluster methods; multiconfiguration self-consistent field theory; multi-reference perturbation theory, multi-reference configuration interaction; calculation of electronically excited states; calculation of molecular properties: dipole moments, polarizabilities, transition moments, spin-orbit couplings; analytical energy gradients and their relation to molecular properties; density functional theory; density fitting approximations; linear scaling methods: multipole approximations for Hartree-Fock and density functional theory, local approximations of electron correlation; explicitly correlated methods; foundations of electronic structure calculations for solids; other topics in quantum chemistry		
14. Literatur:	R. McWeeny, Methods of Molecular Quantum Mechanics, second edition, 1989 F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, second edition, 2007		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358201 Vorlesung Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie • 358202 Übung Fortgeschrittene Methoden der Quantenchemie 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 56 Stunden Selbststudium: 124 Stunden Summe: 180 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35821 Advanced Methods of Quantum Chemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, 120 Min., Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Theoretische Chemie

242 Spezialmodule

Zugeordnete Module: 35810 Computational Biochemistry
 35830 Programming and Numerical Methods
 35840 Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I
 35850 Group Theory and Molecular Spectroscopy
 35860 Molecular Quantum Mechanics

Modul: 35810 Computational Biochemistry

2. Modulkürzel:	030800051	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Apl. Prof. Jürgen Pleiss		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Jürgen Pleiss • Johannes Kästner 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 3: Biochemistry and Biotechnology -->Spezialmodule →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	<p>The students</p> <ul style="list-style-type: none"> • know widely used bioinformatics methods to analyse protein sequences and to model protein structures • are able to apply these methods to simple problems by using biological databases and bioinformatics tools, and to present and discuss the results in written and in oral form • understand the basic concepts of the description of proteins by force fields • know system properties that can be modelled by molecular dynamics simulations, and know the respective methods • know the biochemical properties that can be modelled by QM/MM simulations • know how molecular mechanics and molecular docking are applied to predict protein-ligand-complexes 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • biological databases (sequence and structure of proteins) • sequence alignment • phylogenetic analysis • patterns, profiles, domains • protein architectures and protein folding • modelling of protein structure • molecular dynamics simulation • force fields for proteins and ligands • QM/MM simulations • docking of proteins and ligands 		
14. Literatur:	<p>Durbin, Eddy, Krogh, Mitchison "Biological Sequence Analysis" Leach "Molecular Modelling"</p>		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358101 Vorlesung Bioinformatik 1 • 358102 Vorlesung Simulation von Proteinen • 358103 Übung Simulation von Proteinen 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit: 56 Stunden Selbststudium: 124 Stunden Summe: 180 Stunden</p>		

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35811 Computational Biochemistry (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35850 Group Theory and Molecular Spectroscopy

2. Modulkürzel:	031100054	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Apl. Prof. Guntram Rauhut		
9. Dozenten:			
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Students will understand <ul style="list-style-type: none"> • basics and applications of group theory • the quantum chemical simulation of molecular spectra • the calculation of spectra with the help of quantum chemical software 		
13. Inhalt:	<p>Group theory:</p> <p>Basics: Symmetry and point groups, mathematical basis, matrix representations, irreducible representations, character table, reduction of representations, direct products, vanishing integrals and selection rules, projection operators, symmetry adapted bases. Applications: Hückel Theory, Crystal Field Theory, vibrations</p> <p>Theoretical spectroscopy of molecules:</p> <p>Connection between molecular properties and gradients; coordinate systems (separation of rotation and vibration); potential energy surface generation; vibrational spectroscopy (harmonic and variational anharmonic approaches); vibration correlation methods; calculation of electronic excitation energies; multi-reference methods (MCSCF); transition moments; calculation of vibronic transitions (Franck-Condon factors)</p>		
14. Literatur:	Atkins, Friedman, „Molecular Quantum Mechanics“ Cotton, „Chemical Applications of Group Theory“ Jensen, „Introduction to Computational Chemistry“		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358501 Lecture Group Theory and Molecular Spectroscopy • 358502 Exercise Group Theory and Molecular Spectroscopy 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Präsenzzeit:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group Theory and Molecular Spectroscopy, lecture: 3 SWS x 14 Wochen = 42 h • Exercises: 1 SWS x 14 Wochen = 14 h <p>Selbststudium:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 2 h pro Präsenzstunde = 112 Stunden 		

Abschlussprüfung incl. Vorbereitung: 12 h

Summe: 180 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35851 Group Theory and Molecular Spectroscopy (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35860 Molecular Quantum Mechanics

2. Modulkürzel:	031100055	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Andreas Köhn		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Johannes Kästner • Andreas Köhn 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students: <ul style="list-style-type: none"> • Understand the techniques used in quantum theory • Can solve Schrödinger's equation for special one-dimensional problems • Understand the quantization of the angular momentum and its additions • Can derive and apply perturbation theory • Know the consequences of relativity on quantum-mechanical systems • Are able to calculate reaction rates by using transition state theory • Understand the basis of scattering theory 		
13. Inhalt:	Vector spaces, function spaces, and operators; operators and observables. Angular momentum, creation- and destruction operators, eigenfunctions (spherical harmonics), addition of angular momentum, application of the algebra of the angular momentum in spectroscopy and dynamics. Time-dependent perturbation theory, interaction of electromagnetic radiation with molecules, intensities, Einstein-coefficients, oscillator strengths. Quantum statistics (bosons, fermions). Relativistic effects (scalar, spin-orbit coupling). Chemical Kinetics and Tunneling: partition functions, transition state theory, RRKM; wave packets, one-dimensional potential problems, basis of scattering theory; Feynman path integrals and instanton theory. Other topics in theoretical chemistry.		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • Atkins, Molecular Quantum Mechanics • Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358601 Lecture Molecular Quantummechanics • 358602 Exercise Molecular Quantummechanics 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 56 Stunden Selbststudium: 124 Stunden Summe: 180 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35861 Molecular Quantum Mechanics (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, 120 Min., Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 35830 Programming and Numerical Methods

2. Modulkürzel:	031100053	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:		Univ.-Prof. Johannes Kästner	
9. Dozenten:			
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	The students can: • Formulate mathematical methods in application-oriented form and implement them in programs • Apply these methods to the analysis, modeling, and simulation of problems in chemistry and physics.		
13. Inhalt:	Introduction into scientific programming, solution of linear systems of equations (application: e.g. least-squares fitting), solution of eigenvalue problems (application: e.g. harmonic oscillators, Hartree-Fock, Hückel-theory), interpolation and extrapolation of data, determination of stationary points (application: e.g. geometry optimization), numerical differentiation and integration (application: e.g. trajectories), solution of differential equations (kinetics), use of numeric libraries (BLAS, LAPACK), visualization		
14. Literatur:	Numerical Recipes in Fortran 90, Second Edition, 1996		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358301 Lecture Numerical Methods • 358302 Laboratory Course Numerical Methods 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: <ul style="list-style-type: none"> • Numerical Methods, lecture: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h • Tutorial/Laboratory course: 2 SWS x 14 Wochen = 28 h Selbststudium: <ul style="list-style-type: none"> • 2 h pro Präsenzstunde = 112 Stunden Abschlussprüfung incl. Vorbereitung: 12 h Summe: 180 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35831 Programming and Numerical Methods (BSL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 35840 Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I

2. Modulkürzel:	-	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Christian Holm		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Christian Holm • Maria Fyta 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Wahlpflichtbereich A: (Forschungsprofil) -->Forschungsprofil 4: Theory and Simulation -->Spezialmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	<ul style="list-style-type: none"> • Fundamental Knowledge of theoretical and experimental physics, in particular Thermodynamics and Statistical Physics. • Unix basics • Basic Programming skills in C and Python • Basics of Numerical Mathematics 		
12. Lernziele:	The goal is to obtain a thorough understanding of numerical methods for simulating physical phenomena of classical and quantum systems. Afterward, the participants shall be able to autonomously apply simulation methods to a given problem. The tutorials also support media- and methodological skills.		
13. Inhalt:	<p>Simulation Methods in Physics 1 (2 SWS Lecture + 2 SWS Tutorials in Winter Term)</p> <p>Homepage (Winter Term 2016/2017): http://www.icp.uni-stuttgart.de/~icp/Simulation_Methods_in_Physics_I_WS_2016/2017</p> <ul style="list-style-type: none"> • History of Computers • Finite-Element-Method • Molecular Dynamics (MD) <ul style="list-style-type: none"> • Integrators • Different Ensembles: Thermostats, Barostats • Observables • Simulation of quantum mechanical problems <ul style="list-style-type: none"> • Solving the Schrödinger equation • Lattice models, Lattice gauge theory • Monte-Carlo-Simulations (MC) • Spin Systems, Critical Phenomena, Finite Size Scaling • Statistical Errors, Autocorrelation 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • Frenkel, Smit, „Understanding Molecular Simulations“, Academic Press, San Diego, 2002. • Allen, Tildesley, „Computer Simulation of Liquids“. <i>Oxford Science Publications</i> , Clarendon Press, Oxford, 1987 . 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358401 Vorlesung Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I • 358402 Übung Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I 		

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

- Lecture "Simulation Methods in Physics 1":
28h Attendance, 56h Home work
- Tutorials "Simulation Methods in Physics 1":
28h Attendance, 68h Doing the Exercises

Total: 180h

17. Prüfungsnummer/n und -name:

35841 Simulationsmethoden in der Physik für Chemiker I (BSL),
Sonstiges, Gewichtung: 1.0, Benotung der Lösungen der
Übungsaufgaben

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Institut für Computerphysik

300 Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden)

Zugeordnete Module:	17750	Grundzüge des gewerblichen Rechtsschutzes
	26060	Chemistry of the Atmosphere
	35870	Mikroreaktionstechnik
	35880	Geochemie
	35890	Analytik für Fortgeschrittene mit Massenspektrometrie und Elektronenstrahl- Mikroanalyse
	35900	Polymere Materialien
	35910	Industrielle Organische Chemie
	37230	Kristallstruktur und Mikrostruktur

Modul: 35890 Analytik für Fortgeschrittene mit Massenspektrometrie und Elektronenstrahl-Mikroanalyse

2. Modulkürzel:	031310335	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Hans-Joachim Massonne		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Joachim Opitz • Thomas Theye 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	BSc Chemie		
12. Lernziele:	<p>Die Studierenden erwerben weitergehende Kenntnisse in der Mikrosondenanalytik (mit Elektronenstrahlen) und Massenspektrometrie. Sie befähigen die Studierenden zur Durchführung molekularer Strukturermittlung, der Elementanalyse (insbesondere mit hoher Ortsauflösung bei Festkörpern) und zur Ermittlung physikalischer Parameter (Bindungsenergiesen, Protonenaffinitäten, Aktivierungsenergien etc.) von Molekülen und Fragmenten.</p>		
13. Inhalt:	<p><u>Vorlesung (Massenspektrometrie):</u> Grundlagen der verschiedenen Gerätetypen, Ionisierungsverfahren, Ionentrennung, Ionendetektion, Auflösungsvermögen, Feinmassen, Summenformeln, Spektreninterpretation, strukturspezifische Fragmentierung, metastabile Zerfälle, Ionisierungs- und Auftretensenergien, thermochemische Berechnungen, Komponententrennung (GC/MS,LC/MS).</p> <p><u>Vorlesung (Elektronenstrahl-Mikrosondenanalytik):</u> Mikroanalytik mit der Elektronenstrahl-Mikrosonde, Theorie und apparative Voraussetzungen.</p> <p><u>Übung:</u> Spektren- und Dateninterpretation, eigene Messungen an den jeweiligen Geräten.</p>		
14. Literatur:	<p>J.H. Gross, Mass Spectrometry, Springer Verlag, Berlin, 2004, J.L. Holmes, C. Aubry, P.M. Mayer, Assigning Structures to Ions in Mass Spectrometry, CRC Press, Boca Raton (FL), 2007, H. Kienitz, Massenspektrometrie, Verlag Chemie, Weinheim, 1968 (Vorlesung Massenspektrometrie), V.D. Scott, G. Love, S.J.B. Reed, Quantitative Electron-Probe Microanalysis, Ellis Horwood, New York, 1995 (Vorlesung Elektronenstrahl-Mikrosondenanalytik), Skripten (Übung).</p>		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358901 Vorlesung Massenspektrometrie für Fortgeschrittene • 358902 Vorlesung Elektronenstrahl-Mikrosondenanalytik 		

- 358903 Übung Massenspektrometrie und Elektronenstrahl-Mikrosondenanalytik
-

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:

Vorlesungen

Präsenzzeit: 28 Stunden
Selbststudium: 62 Stunden
Summe: 90 Stunden

Übung

Präsenzzeit: 28 Stunden
Selbststudium: 62 Stunden
Summe: 90 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name:

35891 Analytik für Fortgeschrittene mit Massenspektrometrie und Elektronenstrahl-Mikroanalyse (USL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 26060 Chemistry of the Atmosphere

2. Modulkürzel:	030701929	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	3.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	2.5	7. Sprache:	Englisch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Cosima Stubenrauch		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Cosima Stubenrauch • Ulrich Vogt 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Basics in Chemistry, Physics, and Air Quality Control		
12. Lernziele:	<p>The graduates of the module understand the basic physical and chemical processes in the tropo- and the stratosphere. The influence of air pollutants in the ambient air and on a global scale can be explained, which, in turn, allows classifying and assessing the air quality in a defined area. This is the basis for the understanding and justification of air pollution abatement measures.</p>		
13. Inhalt:	<p>I: Chemistry of the Atmosphere (Stubenrauch)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Structure of the atmosphere • Radiation balance of the Earth • Global balances of trace gases • OH radical • Chemical degradation mechanisms • Stratospheric chemistry, ozone hole • Tropospheric chemistry • Greenhouse effect, climate <p>II: Air Pollutants in Urban and Rural Areas and Meteorological Influences (Vogt)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Spatial distribution of air pollutants in urban and rural areas • Temporal variation and trends in air quality • Carbon compounds, sulfur dioxide, particulate matter, nitrogen oxides, tropospheric ozone • Meteorological influences 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • Introduction to Atmospheric Chemistry, D.J. Jacob, Princeton University Press, Princeton, 1999 • Chemistry of the Natural Atmosphere, P. Warneck, Academic Press, San Diego, 2000 • Sonderheft von "Chemie in unserer Zeit", 41. Jahrgang, 2007, Heft 3, 133-295 • Air Quality Control, G. Baumbach, Springer Verlag, Berlin, 1996 • News on Topics from Internet (e.g. UBA, LUBW) 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	260601 Vorlesung Chemie der Atmosphäre		

16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Attendance: 35 h (28 h Lectures & 7 h Exkursion) Autonomous Student Learning: 55 h Total: 90 h
17. Prüfungsnummer/n und -name:	26061 Chemistry of the Atmosphere (USL), schriftliche Prüfung, 60 Min., Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	blackboard, PowerPoint presentations, demonstration of measurements
20. Angeboten von:	Institut für Physikalische Chemie

Modul: 35880 Geochemie

2. Modulkürzel:	031310334	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Hans-Joachim Massonne		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Hans-Joachim Massonne • Thomas Theye 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	keine		
12. Lernziele:	Die Studierenden verfügen über grundlegende Kenntnisse zur Geochemie (geochemischer Aufbau der Erde, Elementverteilung, Isotopensignaturen zum Prozessverständnis, Vulkanismus, Gesteinsmetamorphose). Darüber hinaus sind sie in der Lage, mit Fachleuten über den Themenbereich "Geochemie" zu diskutieren.		
13. Inhalt:	<p><u>Vorlesung:</u> Die folgenden Themen werden behandelt: Geochemischer Aufbau der Erde, analytische Methoden, Hochdruckexperimente, Elementverteilung, Kristallchemie, Gesteinsmetamorphose, Magmenherkunft und geochemisch relevante Isotopenverhältnisse. Die Verwendung solcher Verhältnisse zum Verständnis geologischer Prozesse wird detaillierter dargestellt.</p> <p><u>Übung:</u> Geochemische Proben (Gestein, Boden, Wasser) werden im Gelände genommen sowie nach Art der Probe im Labor weiter aufbereitet, mittels Polarisationsmikroskopie und Röntgenpulverdiffraktometrie untersucht und schließlich mit Methoden der Röntgenfluoreszenzspektrometrie und ICP-Massenspektrometrie sowie einer Elektronenstrahl-Mikrosonde analysiert.</p>		
14. Literatur:	<p>F. Albarede, Geochemistry: an introduction, Cambridge Univ. Press, 2nd ed. (Vorlesung)</p> <p>M.K. Pavicevic & G. Amthauer, Physikalisch-chemische Untersuchungsmethoden in den Geowissenschaften, Band 1 und 2., Schweizerbart'sche Verlagsb., 2000 (Übung)</p>		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none"> • 358801 Vorlesung Geochemie I • 358802 Vorlesung Geochemie II (Isotopengeochemie) • 358803 Übung Geochemie 		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p>Vorlesung:</p> <p>Präsenzzeit: 28 Stunden</p> <p>Selbststudium: 56 Stunden</p>		

Summe: 84 Stunden

Übung:

Präsenzzeit: 28 Stunden

Selbststudium: 68 Stunden

Summe: 96 Stunden

17. Prüfungsnummer/n und -name: 35881 Geochemie (USL), schriftlich, eventuell mündlich,
Gewichtung: 1.0

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 17750 Grundzüge des gewerblichen Rechtsschutzes

2. Modulkürzel:	030200025	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	3.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	2.0	7. Sprache:	-
8. Modulverantwortlicher:	Brigitte Schwederski		
9. Dozenten:	Andreas Schrell		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	B.Sc. in Chemie		
12. Lernziele:	Die Studierenden können in Grundzügen die wesentlichen rechtlichen Instrumente zum Schutz intellektueller Leistungen, das heißt insbesondere das Patent-, das Gebrauchsmuster-, das Geschmacksmuster (Design)- und das Markenrecht, sowie ergänzend dazu die tragenden Bestimmungen des Arbeitnehmererfindergesetzes erfassen und anwenden.		
13. Inhalt:	Wesentlicher Inhalt der Vorlesung ist das deutsche, europäische und internationale Patentrecht. In vielen Fällen anhand praktischer Anwendungsbeispiele aus der Patentierung chemischer und biotechnologischer Erfindungen lernen die Studierenden den grundlegenden Anwendungsbereich, die Voraussetzungen zum Erwerb, die Kostenfolgen und die sich aus dem Erwerb ableitenden rechtlichen Konsequenzen des Patentrechtes kennen. Besonderer Wert wird auf den Bezug dieser Rechtssysteme zu den Innovationsbeiträgen des Chemikers und Biologen gelegt, wobei die Studierenden auch praktische Übungen zur Formulierung von Patentansprüchen und zum Bewerten des Schutzbereiches von Patenten durchführen. Die Vorlesung vermittelt auch Grundkenntnisse im dem Patentrecht ähnlichen Gebrauchsmusterrecht, dem Designschutz (Geschmacksmusterrecht) und dem Markenrecht sowie dem Arbeitnehmererfindergesetz, das auch für Hochschulbeschäftigte Anwendung findet.		
14. Literatur:	s. gesonderte Liste des aktuellen Semesters		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	177501 Vorlesung oder 3-tägige Blockveranstaltung Grundzüge des gewerblichen Rechtsschutzes		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 56 h Selbststudiumszeit / Nacharbeitszeit: 34 h Gesamt: 90 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	17751 Grundzüge des gewerblichen Rechtsschutzes (USL), schriftliche Prüfung		
18. Grundlage für ... :			

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35910 Industrielle Organische Chemie

2. Modulkürzel:	030600060	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	3.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	2.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Hon.-Prof. Stefan Buchholz		
9. Dozenten:	Stefan Buchholz		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Chemie Bachelor		
12. Lernziele:	Kenntnisse der Herstellprozesse und Anwendung wichtiger organischer Chemieprodukte		
13. Inhalt:	Herstellung und Anwendung wichtiger organischer Chemieprodukte <ul style="list-style-type: none"> • Ethylenfolgeprodukte • Propylenfolgeprodukte • C4-Produkte • Komponenten für Polyamide • Aromaten • Exkursion 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • H.-J. Arpe, „Industrielle Organische Chemie“, Wiley-VCH, 2007 • A. Behr, „Angewandte homogene Katalyse“, Wiley-VCH, 2008 Vorlesungspräsentationen		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	359101 Vorlesung Industrielle Organische Chemie		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 24 h Selbststudium: 66 h Summe: 90 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35911 Industrielle Organische Chemie (USL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		
18. Grundlage für ... :			
19. Medienform:			
20. Angeboten von:			

Modul: 37230 Kristallstruktur und Mikrostruktur

2. Modulkürzel:	031410019	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, WiSe
4. SWS:	5.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Eric Jan Mittemeijer		
9. Dozenten:	Eric Jan Mittemeijer		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Einführung Materialwissenschaft		
12. Lernziele:	Die Studierenden: * beherrschen die Konzepte der Symmetrie von Kristallen und deren Einfluss auf die Materialeigenschaften. * haben Kenntnis vom Aufbau und der Struktur intermetallischer Phasen * sind in der Lage mit Kristallstrukturinformationen zu arbeiten. * Können Erstarrungsvorgänge von reinmetallen und Legierungen, anhand von quantitativen Modellen nachvollziehen. * sind in der Lage Ausscheidungs-, Vergrößerungs- und Rekristallisationsprozesse auch im Zusammenhang mit Grenzflächen-, Spannungs-, Oberflächen- und Magnetfeldeffekten sowohl phänomenologisch als auch quantitativ nachzuvollziehen. * sind in der Lage, sich mit Spezialisten aus dem naturwissenschaftlichen Umfeld, über Kristallographie, Erstarrungsvorgänge und Vielkristalle auszutauschen.		
13. Inhalt:	Symmetrie von Kristallen Punktgruppensymmetrie (Hermann-Mauguin-Symbolik), Translationsymmetrie/Bravaisgitter, Raumgruppen, Kristallklassen Reziproker Raum, Laue-Klassen, Symmetrie und Eigenschaftstensoren Strukturelle Aspekte ausgewählter intermetallischer Phasenz. B. Frank-Kasper-Phasen Umgang mit Kristallstrukturinformationen, Datenbanken Erstarrung reiner Metalle: Keimbildung und Wachstum; Gefügeentwicklung; Betrachtungen zum Wärmefluss Erstarrung von Legierungen:		

fest-flüssig-Gleichgewicht in Legierungen; Stoffverteilung bei der Erstarrung; konstitutionelle Unterkühlung; Seigerungen

Ein- und mehrphasige Vielkristalle:

Korngrenzen; Textur (stereografische Projektion, Polfigur, Orientierungsverteilungsfunktion ODF, experimentelle Methoden der Texturanalyse); Ausscheidungen / Umwandlungen; Analyse von Strukturfehlern (Röntgenbeugung, Transmissionselektronenmikroskopie)

Phasenumwandlungstypen

Amorphe Metalle und Rekristallisation

Ausscheidung und Vergrößerung

Erholung und Rekristallisation

Einfluss von Grenz- und Oberflächen

Auswirkungen von Spannungen und Magnetfeldern

14. Literatur:	Textbücher: Fundamentals of Materials Science, E.J. Mittemeijer, Springer, 2010
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	<ul style="list-style-type: none">• 372301 Vorlesung Kristallstruktur u. Mikrostruktur• 372302 Übung Kristallstruktur u. Mikrostruktur
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	<p><u>Vorlesung:</u> Präsenzstunden: 3SWS * 14 Wochen 42h Vor- und Nachbereitung: 1.5h pro Präsenzstunde 63h</p> <p><u>Übung:</u> Präsenzstunden: 2SWS * 14 Wochen 28h Vor- und Nachbereitung: 2h pro Präsenzstunde 56h <u>Gesamt:</u> 189h</p>
17. Prüfungsnummer/n und -name:	37231 Kristallstruktur und Mikrostruktur (USL), schriftlich oder mündlich, Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

Modul: 35870 Mikroreaktionstechnik

2. Modulkürzel:	030910033	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	3.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	2.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Elias Klemm		
9. Dozenten:	Elias Klemm		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:			
12. Lernziele:	Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • beherrschen die Grundlagen der Mikroreaktionstechnik • können für eine vorgegebene Reaktion das Potential der Mikroreaktionstechnik abschätzen • kennen Ausführungsformen von Mikroreaktoren 		
13. Inhalt:	<ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der Mikroreaktionstechnik • Mikrofluidik • Intensivierung des Wärmetransports • Intensivierung des Stofftransports • Intensivierung von Oberflächenphänomenen • Potentiale der Mikroreaktionstechnik • Hoch-exotherme Reaktionen • Mischungssensitive Reaktionen • Mehrphasenreaktionen • Inhärente Sicherheit • Auslegungsaspekte 		
14. Literatur:	<ul style="list-style-type: none"> • E. Klemm, M. Rudek, G. Markowz, R. Schütte, Mikroverfahrenstechnik, in: R. Dittmeyer, W. Keim, G. Kreysa, A. Oberholz (Hg.), Winnacker, Küchler, Chemische Technik - Prozesse und Produkte, Band 2: Neue Technologien, 5. Auflage, WILEY-VCH, Weinheim, 2004. • Hessel, Volker / Renken, Albert / Schouten, Jaap C. / Yoshida, Jun-ichi (Hrsg.), Micro Process Engineering, Wiley-VCH, Weinheim 2009. 		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	358701 Vorlesung Mikroreaktionstechnik		
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: 28Stunden Selbststudium: 62 Stunden Summe: 90 Stunden		
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35871 Mikroreaktionstechnik (USL), schriftlich, eventuell mündlich, Gewichtung: 1.0		

18. Grundlage für ... :

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Modul: 35900 Polymere Materialien

2. Modulkürzel:	031220059	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	6.0 LP	6. Turnus:	jedes 2. Semester, SoSe
4. SWS:	4.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Michael Buchmeiser		
9. Dozenten:	<ul style="list-style-type: none"> • Michael Buchmeiser • Bernd Clauß 		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	<p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Incoming + Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p> <p>DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Outgoing -->Wahlpflichtmodule -->Wahlpflichtbereich B: (profilungebunden) →</p>		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	VO Grundlagen der Makromolekularen Chemie		
12. Lernziele:	<p>Die Studierenden erhalten grundlegende Kenntnisse</p> <ul style="list-style-type: none"> • Auf dem Gebiet der Lacktechnologie • auf dem Gebiet der Verarbeitung von Polymeren, unter besonderer Berücksichtigung von Faser bildenden Polymeren • auf dem Gebiet der Polymermodifizierung • über technisch bedeutende Polymere • über Struktur-Eigenschaftsbeziehungen Faser bildender Polymere 		
13. Inhalt:	<p>chem. wirkende Hilfsstoffe (Flammschutzmittel, Antioxidantien,...)</p> <p>phys. wirkende Hilfsstoffe (Weichmacher, Lichtschutzmittel, ...)</p> <p>Coatings (Nanokomposite, ((V)UV Härtung, ESH), (Oberflächenstrukturierung, inert gas processing)</p> <p>Klebstoffe</p> <p>Polymere in der Analytik (stationäre Phasen und Ionenaustauscher)</p> <p>Polymere Träger für die heterogene Katalyse</p> <p>Primärspinnverfahren</p> <p>Ausrüstung von Textilien</p> <p>Carbonfasern</p> <p>Keramikfasern</p> <p>Drucktechnologien</p> <p>polymere Hochleitungsfasern (PBI, PBO, PBTZ, M5,...)</p> <p>elektrisch leitfähige Polymere</p> <p>Polymere für Batterien und Brennstoffzellen</p> <p>Barrierschichten</p>		

14. Literatur:	H.-G. Elias, Makromoleküle, Bd. 4; Wiley VCH (2003); M. R. Buchmeiser (Ed.) Polymeric Materials in Organic Synthesis and Catalysis, Wiley-VCH (2003)
15. Lehrveranstaltungen und -formen:	359001 Vorlesung Polymere Materialien
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Präsenzzeit: Vorlesung: 4 h x 14 = 56 h Prüfung 1h 57 Stunden Selbststudium: Vor/Nacharbeit: 1,5 x 4 x 14 84 Stunden Prüfungsvorbereitung 39 Summe: 180 Stunden
17. Prüfungsnummer/n und -name:	35901 Polymere Materialien (USL), schriftlich, eventuell mündlich, 90 Min., Gewichtung: 1.0
18. Grundlage für ... :	
19. Medienform:	
20. Angeboten von:	

Modul: 80250 Masterarbeit Chemie

2. Modulkürzel:	030702029	5. Moduldauer:	1 Semester
3. Leistungspunkte:	30.0 LP	6. Turnus:	jedes Semester
4. SWS:	0.0	7. Sprache:	Deutsch
8. Modulverantwortlicher:	Univ.-Prof. Dietrich Gudat		
9. Dozenten:	Dozenten der Fakultät Chemie		
10. Zuordnung zum Curriculum in diesem Studiengang:	DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Incoming + Outgoing -->Pflichtmodule → DoubleM.D. Chemie, PO 2011 → Straßburg -->Outgoing -->Pflichtmodule →		
11. Empfohlene Voraussetzungen:	Das Thema der Masterarbeit kann frühestens ausgegeben werden, wenn mindestens 78 Leistungspunkte erworben wurden und, sofern eine Zulassung zum Studiengang mit Auflagen erfolgt ist, die Erfüllung der Auflagen nachgewiesen wurde.		
12. Lernziele:	Die Masterarbeit ist Bestandteil der wissenschaftlichen Ausbildung und stellt die Abschlussarbeit dar. In ihr weisen Studierende nach, - dass sie in einem fest umrissenen Zeitraum eine konkrete, anspruchsvolle wissenschaftliche Aufgabenstellung aus einem Arbeitsgebiet der Chemie ziel- und ergebnisorientiert bearbeiten können. Sie kennen die typischen Phasen eines Forschungsprojektes und erreichen durch angeleitetes wissenschaftliches Arbeiten eine erweiterte Problemlösungskompetenz, die sie zur Entwicklung eigener Lösungen befähigt. Insbesondere können die Studierenden die zur Bearbeitung notwendigen Arbeiten selbstständig planen und durchführen, dazu wissenschaftliche Methoden zielführend und kritisch anwenden, und die Ergebnisse schriftlich und mündlich in klarer, flüssiger und prägnanter Form präsentieren und diskutieren		
13. Inhalt:	Das Thema der Masterarbeit wird einem aktuellen Forschungsgebiet der Chemie entnommen und so gewählt, dass es eigenständige Forschung ermöglicht. Die Bearbeitung umfasst - die Konzeption eines Arbeitsplans - die Durchführung notwendiger Literaturrecherchen - die eigenständige Planung, Durchführung und Auswertung der Untersuchungen - die Präsentation und kritische Diskussion der Ergebnisse in einer schriftlichen Abschlussarbeit und in einem Seminarvortrag mit anschließender Diskussion		
14. Literatur:	nach Absprache mit dem betreuenden Hochschullehrer/der betreuenden Hochschullehrerin		
15. Lehrveranstaltungen und -formen:			
16. Abschätzung Arbeitsaufwand:	Gesamt: 900 h		
17. Prüfungsnummer/n und -name:			
18. Grundlage für ... :			

19. Medienform:

20. Angeboten von:

Chemie
