

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	09-121-1501	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Moderne Verfahren der Wirkstoffentwicklung
Modultitel (englisch)	Laboratory Course in Modern Drug Discovery
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Institut für Wirkstoffentwicklung/Pharmazeutische Chemie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Moderne Verfahren der Wirkstoffentwicklung" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemie • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Der Studierende beherrscht computergestütztes Design von Wirkstoffen (kleine Moleküle, Antikörper oder Immunogene) und kann organisch- chemische Synthesemethoden oder molekularbiologische Methoden zur Herstellung der Wirkstoffe anwenden. Sie können die Wirkstoffe durch moderne Analytik-Methoden (z.B. GC-MS, HPLC, ESI, NMR) charakterisieren, sowie mit geeigneten Messverfahren die biologische Aktivität beurteilen und die Struktur-Wirkungsbeziehung einschätzen.
Inhalt	Im Rahmen dieses Praktikums soll dem Studierenden der Forschungsschwerpunkt moderner Wirkstoffentwicklung nahegebracht werden. Der Forschungshintergrund wird zunächst durch eine Literaturrecherche erschlossen. Die Zielmoleküle werden am Computer entworfen. Nach Herstellung der Moleküle durch entsprechende Syntheseverfahren (Medizinalchemie oder Molekularbiologie) werden die potenziellen Wirkstoffe charakterisiert. Abschließend wird die biologische Aktivität überprüft. Die Experimente werden dokumentiert, die erzielten Ergebnisse kritisch bewertet und in einer Präsentation abschließend vorgestellt.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Moderne Verfahren der Wirkstoffentwicklung" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	11-121-1112	Wahlpflicht

Modultitel Bioorganische Chemie

Modultitel (englisch) Bioorganic Chemistry

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Biochemie/ Bioorganische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Bioorganische Chemie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h
- Seminar "Bioorganische Chemie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden kennen und verstehen biorganischer Synthese- und Analytikmethoden.

Inhalt Synthesemethoden- und strategien von Peptiden, Kohlenhydraten und Nucleinsäuren, chemische Modifizierung, Einführung von Fluoreszenzfarbstoffen, Radioliganden und Biotin, sowie deren Anwendungen, molekulare Sonden für biologische Fragestellungen und deren selektive Einführung

Teilnahmevoraussetzungen Teilnahme am Modul "Grundlagen der Biochemie" (11-111-1152-N) oder äquivalente Kenntnisse

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: Referat, 30 Min.</i>	
	Vorlesung "Bioorganische Chemie" (2SWS)
	Seminar "Bioorganische Chemie" (2SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	11-121-1116	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Bioorganische Chemie**

Modultitel (englisch) Practical Course Bioorganic Chemistry

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Biochemie/ Bioorganische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Bioorganische Chemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen die Grundarbeitstechniken in der Bioorganik und können diese forschungsorientiert anwenden.

Inhalt Anwendung von Synthesemethoden und -strategien zur Modifizierung von Peptiden, Erlernen von Festphasensynthesestrategien, Handhabung von Polymeren, Analytik von Biopolymeren, Funktionsuntersuchungen.

Teilnahmevoraussetzungen Teilnahme am Modul "Bioorganische Chemie" (11-121-1112)

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Bioorganische Chemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0122	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Molekülspektroskopie**

Modultitel (englisch) Advanced Practical Course Molecular Spectroscopy

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Analytische Chemie/Molekülspektroskopie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Molekülspektroskopie" (10 SWS) = 150 h
Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen ausgewählte NMR-Methoden und können diese forschungsorientiert anwenden.

Inhalt Forschungspraktikum zu ausgewählten Themen der Molekülspektroskopie.

Teilnahmevoraussetzungen Kenntnisse der Grundlagen der Magnetresonanz, der wichtigsten NMR-Methoden und deren Anwendung

Literaturangabe Stefan Berger, Siegmara Braun: 200 and More NMR Experiments, Wiley-VCH, 2004
Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben.
Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Molekülspektroskopie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0123	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Konzentrationsanalytik**

Modultitel (englisch) Advanced Practical Course in Concentration Analysis

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Konzentrationsanalytik

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Konzentrationsanalytik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen analytische Methoden und können diese anwenden. Sie sind in der Lage ausgewählte Themen der Konzentrationsanalyse unter verschiedenen Zielsetzungen zu analysieren, bearbeiten und selbstständig darzustellen.

Inhalt Forschungspraktikum zu ausgewählten Themen der Konzentrationsanalytik.

Teilnahmevoraussetzungen keine, nicht kombinierbar mit 13-121-0121

Literaturangabe R. Kellner (Hrsg) Analytical Chemistry Wiley 2004, ISBN 3-527-30590-4
Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Konzentrationsanalytik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0125	Wahlpflicht

Modultitel	Spurenanalytische Methoden und Verfahren
Modultitel (englisch)	Methods and Procedures for Trace Analysis
Empfohlen für:	1./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Analytische Chemie in biologischen Systemen
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Wintersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h • Übung "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 20 h Selbststudium = 35 h • Seminar "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 25 h Selbststudium = 40 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie • M.Sc. Chemistry and Biotechnology
Ziele	Die Studierenden kennen spurenanalytische Techniken zum quantitativen Nachweis organischer und anorganischer Spurenstoffe aus Wasser, Boden, Luft und biologischen Materialien. Sie können Methoden anwenden und interpretieren.
Inhalt	<p>Das Modul besteht aus Vorlesung und Seminar zu ausgewählten Themen der organischen Spurenanalytik und der Element-Spurenanalytik einschließlich der Speziationsanalytik, aus Wasser, Boden, Luft und biologischen Materialien; einschl. Probennahmetechniken, Probenaufarbeitung (Anreicherung, Extraktion, Aufschluss etc) und Aufreinigungsverfahren.</p> <p>Dabei werden Anwendungen folgender Methoden behandelt: Gaschromatographie, Flüssigchromatographie, Kopplung mit Massenspektrometrie; Atomspektroskopie, Element-Massenspektrometrie; Kopplungen mit Chromatographie, Photometrie, elektrochemische Verfahren. Ergänzend wird eine Geräteübung Erfahrung in ausgewählten spurenanalytischen instrumentellen Techniken vermitteln (Analyse von Wasser- und/oder Sediment-Proben)</p>
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	<ol style="list-style-type: none"> 1. Marr, Cresser, Ottendorfer, Umweltanalytik - eine allgemeine Einführung, Thieme Verlag, Stuttgart, 1988. 2. Perez-Bendito, Rubio, Rubio, Environmental Analytical Chemistry, Elsevier, Amsterdam, 1999. 3. Otto, Analytische Chemie, Wiley-VCH, Weinheim, 3. Aufl., 2006. <p>Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.</p>
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (2SWS)
	Übung "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (1SWS)
	Seminar "Spurenanalytische Methoden und Verfahren" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0126	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Spurenanalytik**

Modultitel (englisch) Advanced Practical Course in Trace Analysis

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Analytische Chemie in biologischen Systemen

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Spurenanalytik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen spurenanalytische Methoden und Techniken. Sie sind in der Lage diese forschungsorientiert anzuwenden.

Inhalt Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe: Probenahmen und Probenvorbereitung; Aufschluss und Extraktion von Proben; Methoden der Elementspurenanalytik mit spektroskopischen oder massenspektrometrischen Verfahren, Elementspeziation durch Kopplung mit chromatographischen Trennverfahren; Organische Spurenanalytik mit Gaschromatographie-Massenspektrometrie und verwandten Verfahren, Flüssigchromatographie-Massenspektrometrie; Qualitative und quantitative Analyse; Anwendung dieser und anderer Techniken auf Proben von Wasser, Boden und Luft und auf biologische Materialien

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Spurenanalytik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0215	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Anorganische Chemie
Modultitel (englisch)	Research Practical Course in Inorganic Chemistry
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Anorganische Chemie: Festkörperchemie/ Materialwissenschaften
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	• Praktikum "Vertiefungspraktikum Anorganische Chemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	• M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Durch die Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt sind die Studierenden in der Lage, selbstständig wissenschaftlich zu arbeiten. Sie können geeignete Synthesemethoden anwenden und kennen röntgenographische (Einkristalle, Pulverproben), spektroskopische (IR, NMR, MS) und thermochemische (TG, DTA, DSC) Methoden zur Untersuchung anorganischer Verbindungen.
Inhalt	Die Studierenden beteiligen sich an einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe, beispielsweise der Synthese und Charakterisierung von Metal-Organic Frameworks (MOFs) oder der Darstellung und Untersuchung von Precursor-Verbindungen für die Erzeugung von Festkörperverbindungen.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Anorganische Chemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0216	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Metallorganische Chemie
Modultitel (englisch)	Research Practical Course Organometallic Chemistry
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Metallorganische Chemie/ Photochemie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Metallorganische Chemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden sind in der Lage, Synthesekonzepte für anorganische und metallorganische Molekülverbindungen für den Einsatz in der Katalyse oder medizinischen Chemie zu entwickeln und sie mit modernen spektroskopischen Methoden zu charakterisieren.
Inhalt	Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe in einem der nachfolgenden Bereiche: a) Entwicklung von ein- und mehrkernigen Übergangsmetallkomplexen für die homogene (asymmetrische) Katalyse. b) Homo- und heterometallische Metallamacyklen als multifunktionelle Liganden für den Einsatz in der Katalyse und Sensorik. c) Entwicklung von Phosphanliganden (chirale, makrocyclische, sterisch anspruchsvolle, P-H-funktionalisierte, wasserlösliche) für die homogene Katalyse. d) Anorganischen/Metallorganische Verbindungen als selektive Antitumormittel. e) Biologisch aktive Borverbindungen (insbesondere Carbaboranderivate) für medizinische Anwendungen (Bor-Neutroneneinfangtherapie, Enzyminhibitoren) f) Phosphorreiche Liganden und Komplexe als Präkursoren für binäre Metallphosphide MP _x . Die meisten Reaktionen erfolgen unter Schutzgasbedingungen; die Charakterisierung erfolgt und spektroskopischen Methoden (insbes., NMR, IR, MS, auch GC-MS) und Röntgenkristallstrukturanalyse.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Metallorganische Chemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0217	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Funktionsmaterialien**

Modultitel (englisch) Research Practical Course in Inorganic Chemistry - Functional Materials

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Anorganische Chemie - Funktionsmaterialien

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Funktionsmaterialien" (10 SWS) = 150 h
Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie
• M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden erwerben ein vertieftes Verständnis für anorganische Festkörper als Funktionsmaterialien und beherrschen ein breites Repertoire an Methoden zu deren Präparation und Charakterisierung.

Inhalt Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe zu einer der folgenden Klassen von Funktionsmaterialien: • Hochleistungswerkstoffe (intermetallische Phasen, Keramiken) • Wasserstoffspeicher (Metallhydride, poröse Materialien) • Magnetwerkstoffe (intermetallische Phasen, Boride, Carbide, Oxide, Nitride) • Lumineszenzmaterialien (z.B. Halogenide, Hydride, Oxide, Oxinate) • Photokatalysatoren (z.B. Nitride, Nitridoxide, Oxide, Hydroxide) • Ionenleiter (z.B. Li⁺-, Na⁺-, Ag⁺, Mg²⁺, N³⁻-, O²⁻-, F⁻-Ionenleiter)

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Funktionsmaterialien" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0218	Wahlpflicht

Modultitel Vertiefungspraktikum Supramolekulare Koordinationschemie

Modultitel (englisch) Research Practical Course Supramolecular Coordination Chemistry

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Koordinationschemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Supramolekulare Koordinationschemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden beherrschen die Darstellung und Charakterisierung Supramolekularer Verbindungen und kennen ihre Eigenschaften und Bedeutung.

Inhalt Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe; Synthese und Charakterisierung makrozyklischer Liganden und ihrer Komplexe, Organische Transformationen in molekularen Hohlräumen, Rezeptordesign, künstliche Enzyme, Verkapselung biochemisch relevanter Verbindungen (Hormone, DANN, Proteine, Viren), Morphosynthese, Stabilisierung reaktiver Intermediate, Organisation durch Selbstassoziation, Supramolekulare Katalyse, Selbstreplikation, Green Chemistry, Nanokapseln, Molekularer Magnetismus.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe J. W. Steed, J. L. Atwood, Supramolecular Chemistry, Wiley-VCH, 2000, Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Supramolekulare Koordinationschemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0313	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Fortgeschrittene Organische Synthesechemie
Modultitel (englisch)	Laboratory Course in Advanced Synthetic Organic Chemistry
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Organische Chemie/ Heterocyclenchemie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Fortgeschrittene Organische Synthesechemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie
Ziele	Der Studierende beherrscht moderne organisch-chemische Synthese- und Analysetechniken, kann sie zur Synthese komplexer Feinchemikalien einsetzen und die Produkte durch moderne spektroskopische Methoden charakterisieren.
Inhalt	Im Rahmen dieses Praktikums soll der Studierende den Forschungshintergrund zunächst durch eine Literaturrecherche beleuchten. Die Präparate werden dann u. a. mit Hilfe von chiralen Auxiliaren, Katalysatoren und Enzymen synthetisiert. Weiterhin werden Mehrstufensynthesen biologisch aktiver Verbindungen durchgeführt und das Arbeiten unter Schutzgasatmosphäre mit metallorganischen Verbindungen erlernt. Die Versuche werden ausgewertet, protokolliert und die Produkte durch NMR-, IR-, Massenspektroskopie vollständig charakterisiert. Begleitend erfolgt eine Einführung in die Patentdatenbankrecherche.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Fortgeschrittene Organische Synthesechemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0315	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Katalytische Methoden in der Organik**

Modultitel (englisch) Laboratory Course Catalytic Methods in Organic Chemistry

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Organische Chemie/ Synthese und Katalyse

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Katalytische Methoden in der Organik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden erlernen moderne organische Syntheseverfahren und nutzen die (heterocyclischen) Produkte als Katalysatoren oder Edukte in (homogenen) katalytischen Anwendungen. Sie sind in der Lage mittels moderner Analysetechniken und spektroskopischer Methoden Reaktionsverläufe zu kontrollieren und Produkte zu charakterisieren. Sie entwickeln ein breites, kritisches Verständnis bei aktuellen Anwendungen in verschiedenen Systemen und Bereichen.

Inhalt Im Rahmen des Praktikums soll der Studierenden den jeweiligen Forschungshintergrund zunächst durch die Recherche (aktueller) Literatur näher beleuchten. Präparate und Katalysatoren werden mit Hilfe unterschiedlicher Syntheseverfahren, auch in Mehrstufenreaktionen, hergestellt, dabei werden fortgeschrittene Techniken, wie z.B. Arbeiten unter Schutzgasatmosphäre, photochemische Umsetzungen, Arbeiten im Mikromaßstab erlernt und vertieft. Bei katalytischen Umsetzungen werden Einflüsse der Reaktionsbedingungen auf das Reaktionsergebnis untersucht und zur Optimierung genutzt. Alle Versuche werden protokolliert und mit verschiedenen Analysetechniken ausgewertet. Alle Produkte werden spektroskopisch vollständig charakterisiert (IR, UV, NMR-Spektroskopie, Massenspektrometrie). Parallel erfolgt eine Einführung in spezielle Methoden der Literaturrecherche (z.B. Datenbanken) und in die Anwendung geeigneter Software zur Datenauswertung.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Katalytische Methoden in der Organik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0316	Wahlpflicht

Modultitel Vertiefungspraktikum Organische Chemie / Chemische Biologie

Modultitel (englisch) Laboratory Course Organic Chemistry / Chemical Biology

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Organische Chemie/ Chemische Biologie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Organische Chemie / Chemische Biologie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden können organisch-chemische und biochemische Methoden für die Synthese und biochemische Charakterisierung niedermolekularer Substanzen anwenden.

Inhalt Die Studierenden sollen zunächst auf der Basis einer umfassenden Literaturrecherche eine Syntheseroute der Zielverbindungen planen. Die Durchführung der Synthese der Verbindungen stellt den Kern des Praktikums dar. Die Aktivitäten der synthetisierten Verbindungen gegen die betreffenden Proteine oder Proteindomänen sollen von den Studierenden in biochemischen Assays selbst untersucht werden.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Organische Chemie / Chemische Biologie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0321	Pflicht

Modultitel **Naturstoffchemie**

Modultitel (englisch) Chemistry of Natural Products

Empfohlen für: 1. Semester

Verantwortlich Professur für Organische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Naturstoffchemie" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 90 h
- Seminar "Naturstoffchemie" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen die chemischen und biochemischen Aspekte wichtiger Naturstoffe. Dazu gehören u.a. Aminosäuren (auch nicht-proteinogene Aminosäuren), Kohlenhydrate und Lipide.

Inhalt Moderne Methoden zur Synthese chiraler nicht proteinogener Aminosäuren; Kohlenhydrate; Bioaktive Lipide; Terpene, Steroide, Alkaloide, Antibiotika.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Collins, Ferrier: Monosaccharides, K.B.G. Torsell: Natural Product Chemistry, Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Naturstoffchemie" (3SWS)
	Seminar "Naturstoffchemie" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0326	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Biomimetische Katalyse**

Modultitel (englisch) Laboratory Course in Biomimetic Catalysis

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Organische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Biomimetische Katalyse" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry
• M.Sc. Chemie
• M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden erlernen moderne organisch-chemische und biochemische Arbeitstechniken, um diese dann zur Entwicklung und Untersuchung neuer, an die Natur angelehnter, Synthesemethoden anzuwenden. Außerdem werden moderne Analysetechniken und spektroskopischer Methoden vorgestellt, um Reaktionsverläufe im Detail zu verfolgen und Produkte zweifelsfrei zu charakterisieren.

Inhalt selektive Halogenierungen, rekombinante Protein-Expression, Enzym-katalysierte organisch-chemische Transformationen, Photochemie, Elektrochemie, enantioselektive Katalyse, (Festphasen-)Peptidsynthese, Metall-Peptidkatalyse

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Biomimetische Katalyse" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0417	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Reaktionskinetik und Strukturaufklärung**

Modultitel (englisch) Research Practical Course in Reaction Kinetics and Structure Elucidation

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Technische Chemie der Polymere

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Reaktionskinetik und Strukturaufklärung" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden sind in der Lage Elementarreaktionen reaktiver Transienten in Lösungen bei Raumtemperatur mittels stationärer und zeitaufgelöster Spektroskopie zu untersuchen und aufzuklären. Sie können ausgewählte Themen der Kurzzeitspektroskopie forschungsorientiert, selbstständig bearbeiten und über die verschiedenen Auswirkungen referieren.

Inhalt Forschungspraktikum zu ausgewählten Themen der Kurzzeitspektroskopie mittels Pulsradiolyse oder Laserphotolyse und optischem Nachweis von Absorption und ggf. Emission in Lösungen

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe 1. A. Henglein, W. Schnabel, J. Wenedenburg: "Einführung in die Strahlenchemie", Akademie-Verlag, Berlin, 1969;
2. N. J. Turro: "Modern Molecular Photochemistry", Wiley, 1991;
Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Reaktionskinetik und Strukturaufklärung" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0418	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Dünnschichtwachstum, Festkörpergrenzflächenphänomene und -analytik
Modultitel (englisch)	Research Practical Course in Thin Film Growth, Phenomena and Analysis of Solid Interfaces
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Physikalische Chemie der Oberflächen
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> Praktikum "Vertiefungspraktikum Dünnschichtwachstum, Festkörpergrenzflächenphänomene und -analytik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden können selbstständig Gesetzmäßigkeiten des Wachstums von Dünnschichten und der Grenzflächenstruktur erkennen sowie mit Techniken der Oberflächenanalyse untersuchen und forschungsorientiert bewerten.
Inhalt	Forschungspraktikum zur Untersuchung von ausgewählten Metall-, Oxid- und Sulfidschicht-systemen, die mit verschiedenen Techniken erzeugt und mit Röntgenfluoreszenz- und Elektronenspektroskopie, Tunnelmikroskopie sowie Elektronenbeugungstechniken zu analysieren sind.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Dünnschichtwachstum, Festkörpergrenzflächenphänomene und -analytik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0419	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Charakterisierung von Gasphasenclustern und fluiden Grenzflächen
Modultitel (englisch)	Research Practical Course on the Characterization of Gas Phase Clusters and Liquid Interfaces
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Physikalische Chemie/ kondensierte inhomogene Materie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> Praktikum "Vertiefungspraktikum Charakterisierung von Gasphasenclustern und fluiden Grenzflächen" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> M.Sc. Chemie
Ziele	Die Studierenden kennen moderne spektroskopische Methoden der Physikalischen Chemie zur Untersuchung von Gasphasenclustern bzw. fluiden Grenzflächen und können ihr Wissen in forschungsorientierten Projekten anwenden.
Inhalt	Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt im Rahmen eines Forschungspraktikums zu ausgewählten Themen der modernen Spektroskopie, wie z.B. lineare und nicht-lineare optische Methoden, Teilchenspektroskopie, photochemische und photophysikalische Sondierung von größenselektierten molekularen Aggregaten in der Gasphase bzw. fluiden Grenzflächen.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Charakterisierung von Gasphasenclustern und fluiden Grenzflächen" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0420	Wahlpflicht

Modultitel	Physikalische Chemie der Cluster
Modultitel (englisch)	Physical Chemistry of Cluster
Empfohlen für:	1./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Physikalische Chemie/ kondensierte inhomogene Materie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Wintersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Physikalische Chemie der Cluster" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 70 h Selbststudium = 100 h • Seminar "Physikalische Chemie der Cluster" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 35 h Selbststudium = 50 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemie • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden kennen die Konzepte und Methoden, mit denen nanoskalige Materie im Bereich zwischen einzelnen Atomen und Volumenkörpern untersucht und beschrieben werden.
Inhalt	Klassifizierung und Herstellung von Clustern, größenabhängige Clustereigenschaften, nicht-skalierbares Regime, Edelgas-, molekulare, Metall-, Halbleiter-, ionische und mikrosolvatisierte Cluster, experimentelle Charakterisierung der Clustereigenschaften in der Gasphase und an Oberflächen: Massenspektrometrie, Laserspektroskopie und Rastermikroskopie, Cluster in der Atmosphäre, katalytische Eigenschaften von deponierten Clustern, Clusterstrahlsynthese von nanostrukturierten Materialien
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung:	
Klausur 90 Min., mit Wichtung: 2	Vorlesung "Physikalische Chemie der Cluster" (2SWS)
Referat* 15 Min., mit Wichtung: 1	Seminar "Physikalische Chemie der Cluster" (1SWS)

* Diese Prüfungsleistungen müssen bestanden sein.

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0422	Wahlpflicht

Modultitel Funktionskontrolle an komplexen Oberflächen

Modultitel (englisch) Function Control at Complex Surfaces

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Institutsleiter des Instituts für Physikalische und Theoretische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Funktionskontrolle an komplexen Oberflächen" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 60 h Selbststudium = 90 h
- Seminar "Funktionskontrolle an komplexen Oberflächen" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Der Studierende lernt anwendungsnahe und aktuelle Fragestellungen/Lösungen zur Entwicklung von funktionalisierten Polymer- und Hybridmaterialien sowie den Einsatz strahlenchemischer und photochemischer Technologien kennen.

Inhalt Wechselndes Angebot aus aktuellen Forschungsgebieten zur Herstellung und Modifizierung von funktionalen Oberflächen und funktionaler nano- und mikrostrukturierter Systeme. Dies schließt die Herstellung von Nanokompositen und vernetzten (porösen) Polymersystemen ein. Die strahlen- und photonenmodifizierten Materialien erhalten außergewöhnliche mechanische, thermische, biokompatible oder Barriere- bzw. Membraneigenschaften mit spezifischen Funktionalitäten.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Funktionskontrolle an komplexen Oberflächen" (2SWS)
	Seminar "Funktionskontrolle an komplexen Oberflächen" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0424	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Reaktionen molekularer Fragmentationen und Ion soft-landing
Modultitel (englisch)	Research Practical Course on the Chemistry of Molecular Fragment Ions and Ion Soft-landing
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Nachwuchsgruppenleitung "Physikalische Chemie der reaktiven Intermediate"
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Reaktionen molekularer Fragmentationen und Ion soft-landing" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemie • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden kennen Methoden zur Erzeugung von hochreaktiven molekularen Gasphasenionen, sowie die Möglichkeiten, diese durch präparative Massenspektrometrie für chemische Reaktionen in Oberflächenschichten einzusetzen.
Inhalt	Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt im Rahmen eines Forschungspraktikums zu ausgewählten Themen wie z.B. der Aufklärung von Fragmentierungsreaktionen, der Strukturaufklärung dieser Fragmente und ihre Deposition auf geeigneten Substratoberflächen.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Reaktionen molekularer Fragmentationen und Ion soft-landing" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0514	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Heterogene Katalyse
Modultitel (englisch)	Research Practical Course in Heterogeneous Catalysis
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Technische Chemie (Heterogene Katalyse)
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	• Praktikum "Vertiefungspraktikum Heterogene Katalyse" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	• M.Sc. Chemie
Ziele	Die Studierenden erlernen durch wissenschaftliches Arbeiten in einem aktuellen Forschungsprojekt die Grundlagen der Heterogenen Katalyse. Sie sind in der Lage die Katalysatoren herzustellen, mit geeigneten Analysemethoden zu charakterisieren und im Anschluss anwendungsorientiert zu untersuchen.
Inhalt	Herstellung, Charakterisierung und Testung von Feststoffkatalysatoren. Herstellungsmethoden: Imprägnierung, Fällung, etc., Charakterisierung: Spektroskopie, Gasadsorption, Temperaturprogrammierte Methoden, Testung: Umweltkatalyse, Energiekonversion.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Heterogene Katalyse" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0515	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Chemische Reaktionstechnik
Modultitel (englisch)	Research Practical Course Chemical Reaction Engineering
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Technische Chemie (Chemische Reaktionstechnik)
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	• Praktikum "Vertiefungspraktikum Chemische Reaktionstechnik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	• M.Sc. Chemie
Ziele	Durch die Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt in einem Arbeitskreis in der Technischen Chemie erlernen die Studierenden das wissenschaftliche Arbeiten auf dem Gebiet der chemischen Reaktionstechnik.
Inhalt	Präparation, Charakterisierung und Anwendung von monolithischen Materialien; Optimierung von Porensystemen mit Hinblick auf reaktionstechnische Zielstellungen.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Chemische Reaktionstechnik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0623	Wahlpflicht

Modultitel **Anwendungen der Theoretischen Chemie**

Modultitel (englisch) Applications in Theoretical Chemistry

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Theoretische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen • Vorlesung "Advanced Methods in Theoretical Chemistry" (4 SWS) = 60 h
Präsenzzeit und 90 h Selbststudium = 150 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie
• M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
• M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry

Ziele Die Studierenden verfügen über Kenntnisse moderner Methoden der Theoretischen Chemie und Computational Chemistry und sind in der Lage diese auf aktuelle Forschungsfragen anzuwenden.

Inhalt Methoden zur Analyse der chemischen Bindung für Moleküle, Oberflächen und Festkörper, Methoden zur Behandlung dynamischer Prozesse, kinetisches Monte Carlo, fortgeschrittene Dichtefunktionaltheorie-Methoden, aktuelle Forschungsgebiete in der Theoretischen Chemie und Computational Chemistry, neue methodische Entwicklungen. Anwendungen auf Fragestellung des atomic scale processing. Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie werden vorausgesetzt.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Advanced Methods in Theoretical Chemistry" (4SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0631	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Theoretische Chemie
Modultitel (englisch)	Practical Course Theoretical Chemistry
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Theoretische Chemie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Theoretische Chemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie
Ziele	Die Studierenden gewinnen durch selbstständiges wissenschaftliches Arbeiten erste Einblicke in die Bearbeitung von Problemstellungen in einem aktuellen Forschungsprojekt. Sie sind in der Lage die grundlegenden, insbesondere aber die modernen Methoden und Berechnungen der Theoretischen Chemie anzuwenden.
Inhalt	Semiempirische Verfahren: HMO, EHT, AM1. Quantenchemische ab-initio-Verfahren: Hartree-Fock-Verfahren, Post-Hartree-Fock-Verfahren. Dichtefunktionalmethoden. Moleküldynamik Periodische Systeme: Superzellen-DFT-Methode. Einführung in UNIX-Betriebssysteme.
Teilnahmevoraussetzungen	Kenntnisse der modernen Methoden der Theoretischen Chemie
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Theoretische Chemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0641	Wahlpflicht

Modultitel	Spektroskopie mit dem Computer
Modultitel (englisch)	Computational Spectroscopy
Empfohlen für:	1./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Theoretische Chemie komplexer Systeme
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Wintersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Spektroskopie mit dem Computer" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 60 h • Praktikum "Spektroskopie mit dem Computer" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 90 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemie • M.Sc. Chemistry and Biotechnology • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden lernen, mit Hilfe moderner Methoden der Computerchemie Spektren zu berechnen und über den Vergleich mit berechneten Größen Struktur und Eigenschaften von Molekülen zu bestimmen.
Inhalt	Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie, Geometrieoptimierung, Ionisierungspotential und Elektronenaffinität, Polarisierbarkeiten, Schwingungsspektroskopie (IR und Raman), NMR, EPR und UV/Vis-Spektroskopie
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Christopher J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Joswig/Geleßus/Heine, Computational Chemistry Workbook. Weitere Hinweise zu Literaturangaben in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Spektroskopie mit dem Computer" (2SWS)
	Praktikum "Spektroskopie mit dem Computer" (3SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1114	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Bioanalytik
Modultitel (englisch)	Practical Course Bioanalytics
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Bioanalytik
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Bioanalytik" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie • Voraussetzung für Masterarbeit im Bereich Bioanalytik
Ziele	Die Studierenden sind in der Lage die Anwendbarkeit bioanalytischer Methoden für wissenschaftliche Fragestellungen weitgehend selbstständig abzuschätzen und anzuwenden.
Inhalt	Aufbauend auf den Vorlesungen und Seminaren im Bereich der Protein-, Peptidchemie und Proteinanalytik sollen die in anderen Modulen theoretisch vermittelten Kenntnisse zur Bearbeitung einer wissenschaftlichen Fragestellung angewandt werden. Der aktuelle Wissenstand auf dem Themengebiet ist durch Literaturrecherchen zu ermitteln um darauf aufbauend das ausgegebene Thema zu bearbeiten. Dazu können alle im Labor zur Verfügung stehenden Methoden und Geräte eingesetzt werden, beispielsweise: chromatographische und elektrophoretische Trennmethoden, ESI- und MALDI-Massenspektrometrie, in-gel Verdau, Zellkulturtechniken, immunochemische Methoden, UV/VIS- und Fluoreszenzspektroskopie, Fluoreszenzpolarisation, Festphasenpeptidsynthese, Zellkulturtechniken. Die Themen der Vertiefungsarbeiten werden individuell unter Berücksichtigung der Interessen der Studierenden vergeben.
Teilnahmevoraussetzungen	Teilnahme am Modul 13-121-1119
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Bioanalytik" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1115	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Rekombinante Proteinexpression**

Modultitel (englisch) Practical Course Recombinant Protein Expression

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Strukturanalytik von Biopolymeren

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Rekombinante Proteinexpression" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden kennen Methoden zur Produktion von Proteinen in rekombinanten Expressionssystemen. Sie sind in der Lage ausgewählte Methoden praktisch durchzuführen und den theoretischen Hintergrund zu erläutern.

Inhalt Aufbauend auf den Grundkenntnissen in der Molekularbiologie und Proteinbiochemie (z.T. Bachelor Chemie) sollen die folgenden Methoden zur Expression und Isolierung von Proteinen praktisch angewendet werden. Eine typische Aufgabenstellung ist die Entwicklung eines Konstruktes zur Überexpression eines Proteins in *E. coli* oder *P. pastoris* und der Nachweis von Proteinexpression und Aktivität oder die Präparation und Analyse von Mutanten eines Proteins. Sie sind in der Lage die folgenden Methoden praktisch durchzuführen und den theoretischen Hintergrund zu erläutern: Primerdesign, PCR, DNA-Isolierung und Analytik, Mutagenese, Klonierung, mikrobiologische Techniken, Proteinexpression, Aufreinigung von Proteinen: Chromatographie, Konzentration, Dialyse, Fällung und Proteinanalytik: SDS-PAGE, Blotting und immunologische Methoden, Massenspektrometrie, Enzymassays, UV/Vis.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe 1. A. Pingoud u. C. Urbanke: Arbeitsmethoden der Biochemie, de Gruyter
2. C. Mülhardt: Der Experimentator: Molekularbiologie /Genomics, Spektrum Verlag
Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Rekombinante Proteinexpression" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1120	Wahlpflicht

Modultitel	Proteinkristallographie
Modultitel (englisch)	Protein Crystallography
Empfohlen für:	1./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Strukturanalytik von Biopolymeren
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Wintersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Proteinkristallographie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h • Praktikum "Proteinkristallographie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Bioinformatik • M.Sc. Chemie • M.Sc. Chemistry and Biotechnology
Ziele	Die Studierenden kennen die Grundlagen und Methoden der Proteinkristallographie und sind in der Lage anwendungsnahe Fragestellungen mittels der erlernten Methoden zu lösen.
Inhalt	<p>Mittels der Methode der Röntgenkristallographie können die Raumstrukturen von organischen Molekülen, anorganischen Festkörpern sowie von biologischen Makromolekülen zu atomarer Auflösung bestimmt werden. In der Vorlesung werden die für Naturwissenschaftler relevanten Grundlagen dieser Methoden praxisnah vermittelt. Der Schwerpunkt liegt auf der Biokristallographie.</p> <p>Es werden u.a. die folgenden Themen behandelt: Kristallisation, Kristalle, Symmetrie und Raumgruppen, Röntgenquellen und Detektoren, Datensammlung, Beugung von Röntgenstrahlen und Neutronen, Phasenproblem, Phasierung und Phasenverfeinerung, Strukturlösung von niedermolekularen Verbindungen mittels Pattersonfunktion und direkte Methoden, Strukturlösung von Biomolekülen mittels molekularem Ersatz, Schweratomersatz und anomaler Dispersion, Modellbau und Strukturvisualisierung, Strukturverfeinerung, Validierung und Interpretation, Vergleich zur Strukturbestimmung mittels NMR.</p>
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: Praktikumsleistung</i>	
	Vorlesung "Proteinkristallographie" (2SWS)
	Praktikum "Proteinkristallographie" (2SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1311	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Materialwissenschaftliche Kristallographie**

Modultitel (englisch) Advanced Practical Course Crystallography in Materials Science

Empfohlen für: 1./2./3. Semester

Verantwortlich Professur für Materialwissenschaftliche Kristallographie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Materialwissenschaftliche Kristallographie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie
• M.Sc. Mineralogie und Materialwissenschaften

Ziele Durch das wissenschaftliche Arbeiten in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe entwickeln die Studierenden ein breites und kritisches Verständnis in diesem Bereich und gewinnen einen Einblick in die selbstständige Bearbeitung von Forschungsprojekten.

Inhalt Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe in einem der nachfolgenden Bereiche: a) Strukturbestimmung fehlgeordneter Materialien; b) Synthese und Charakterisierung metastabiler Telluride; c) Entwicklung neuer Chalkogenid-basierter Thermoelektrika; d) Entwicklung von Methoden zur Realstrukturanalyse; e) Silicatische und silicatanaloge Netzwerkstrukturen. Synthesen erfolgen auf verschiedenen festkörperchemischen Routen, oft unter Inertgasbedingungen; die Charakterisierung erfolgt mittels Röntgen-, Synchrotronstrahl- oder Neutronenbeugung an Einkristallen und Pulverproben sowie mittels Transmissionselektronenmikroskopie und ggf. spektroskopischer Methoden sowie thermischer Analyse.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Materialwissenschaftliche Kristallographie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1415	Wahlpflicht

Modultitel **Vertiefungspraktikum Umweltchemie**

Modultitel (englisch) Environmental Chemical Practical Course

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Technische Chemie (Heterogene Katalyse)

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen • Praktikum "Vertiefungspraktikum Umweltchemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h

Arbeitsaufwand 10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Chemie

Ziele Die Studierenden erlernen selbstständiges, wissenschaftliches Arbeiten durch Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsprojekt. Sie erlangen Kenntnisse über ausgewählte Methoden zur Bestimmung und Entfernung von Schadstoffen und können diese Methoden forschungsorientiert anwenden.

Inhalt Forschungspraktikum zur Nutzung analytischer Methoden zur Bestimmung von Schadstoffen in den unterschiedlichen Kompartimenten; Passivsammlung, O/W-Verteilungskoeffizienten, Struktur-Wirkungs-Beziehungen, Röntgenfluoreszenzanalyse, Gammaskopie
Anwendung von Grundoperationen zur Entfernung von Schadstoffen aus den jeweiligen Kompartimenten; Katalytische Reduktion, Katalytische Nachverbrennung, Flüssig-flüssig-Extraktion, Membranextraktion, Umkehrosmose, Ultraschallbehandlung.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Umweltchemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1416	Wahlpflicht

Modultitel **Aktuelle Entwicklungen in der Chemie**

Modultitel (englisch) Recent Trends in Chemistry

Empfohlen für: 1.–2./2.–3. Semester

Verantwortlich Studiendekan der Chemie

Dauer 2 Semester

Modulturnus jedes Semester

Lehrformen • Kolloquium "Aktuelle Entwicklungen in der Chemie" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 105 h Selbststudium = 150 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden verfügen über ein breites, detailliertes und kritisches Verständnis auf dem neusten Stand des Wissens in aktuellen Forschungsprogrammen der Institute der Fakultät. Ihr Wissen und Verstehen bildet die Grundlage für die Entwicklung eigenständiger Ideen.

Inhalt Wechselndes Angebot aus dem Forschungsprogramm der Institute der Fakultät für Chemie und Mineralogie, sowie von Blockkursen eingeladener Gastprofessoren über Spezialthemen.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Kolloquium "Aktuelle Entwicklungen in der Chemie" (3SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1422	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Atmosphärenchemie
Modultitel (englisch)	Advanced Practical Course in Atmospheric Chemistry
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Atmosphärenchemie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	• Praktikum "Atmosphärenchemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	• M.Sc. Chemie
Ziele	Die Studierenden kennen physikalisch-chemische und analytische Methoden für atmosphärenchemische Feldmessungen, sowie Laboruntersuchungen und sind in der Lage diese forschungsorientiert anzuwenden.
Inhalt	Forschungspraktikum zu ausgewählten Themen der Atmosphärenchemie
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	R. Zellner (Hrg.): Global Aspects of Atmospheric Chemistry, Topics in Physical Chemistry; Springer, Berlin 1999 Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Atmosphärenchemie" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0111	Wahlpflicht

Modultitel **Massenspektrometrische Methoden**

Modultitel (englisch) Mass Spectrometry

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Bioanalytik

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Massenspektrometrische Methoden" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 60 h
- Seminar "Massenspektrometrische Methoden" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 15 h Selbststudium = 30 h
- Übung "Massenspektrometrische Methoden" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 15 h Selbststudium = 30 h
- Vorlesung "Massenspektrometrie in der modernen quantitativen Analyse" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 15 h Selbststudium = 30 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden kennen die wichtigsten Ionisierungstechniken (EI, CI, FAB, ESI, MALDI) und Massenanalysatoren (Sektorfeld, Quadrupol, Ionenfallen, Flugzeit) und sind in der Lage Massenspektren zu interpretieren.

Inhalt Es wird die historische Entwicklung der Massenspektrometrie bis zu den modernen Geräten und Ionisierungsmethoden (EI, CI, FAB, ESI, MALDI) vorgestellt. Die Prinzipien der wichtigsten Typen von Massenspektrometern (Sektorfeld-, Quadrupol-, TOF-, Ionenfallen-, ICR-MS) werden mit den theoretischen Grundlagen und ihrer Funktionsweise an Beispielen aus unterschiedlichen Bereichen der Chemie und Biochemie erklärt. Ein Fokus liegt auf dem Gebiet der Biomoleküle, insbesondere der Peptid- und Proteinanalytik. Am Beispiel organischer und anorganischer Verbindungen werden Zerfallsreaktionen erläutert und Massenspektren ausgewertet. Ferner werden MALDI-PSD (PSD, post-source decay) und Tandem-Massenspektren (ESI-MS/MS) zur Aufklärung von Peptidsequenzen und der Identifizierung posttranslatiöner Modifikationen (z.B. Phosphorylierung) behandelt. In diesem Zusammenhang werden auch neueste Software-Entwicklungen zur automatisierten Datenanalyse und on-line-Techniken beschrieben.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe

1. H. Budzikiewicz: Massenspektrometrie, VCH
2. J. H. Gross: Mass Spectrometry, Springer

Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten

Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben.
Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: Praktikumsleistung (1 Versuch, 1 Protokoll)</i>	
	Vorlesung "Massenspektrometrische Methoden" (2SWS)
	Seminar "Massenspektrometrische Methoden" (1SWS)
	Übung "Massenspektrometrische Methoden" (1SWS)
	Vorlesung "Massenspektrometrie in der modernen quantitativen Analyse" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0413	Wahlpflicht

Modultitel **Analytik von Festkörperoberflächen**

Modultitel (englisch) Surface Analysis of Solids

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Physikalische Chemie der Oberflächen

Dauer 1 Semester

Modulturnus alternierend alle 2 Jahre im Wintersemester

Lehrformen • Vorlesung "Analytik von Festkörperoberflächen" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 105 h Selbststudium = 150 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
• M.Sc. Chemistry and Biotechnology
• Wahlmodul im M.Sc. Mineralogie & Materialwissenschaften und im M.Sc. Physik

Ziele Die Studierenden kennen Gesetzmäßigkeiten der Festkörperoberflächenstruktur, der Gas-Festkörper-Wechselwirkung und des Dünnschichtwachstums. Sie können wichtige Techniken der Oberflächenanalyse vergleichen und bewerten.

Inhalt Einführung zur Struktur von Festkörperoberflächen und Grenzflächen. Physikalische Grundlagen, Instrumentarien und Anwendungsbeispiele von Methoden der Oberflächenanalyse: Elektronenspektroskopie: Photo- (XPS, UPS) und Augerelektronenspektroskopie (AES), Energieverlustspektroskopie (EELS), Quantitative Lateralverteilungs- und Tiefenprofilanalyse des chemischen Zustands; Elektronenbeugung (LEED, XPD); Gesetze der Gasadsorption und -desorption; Rasterelektronenmikroskopie: STM, AFM, elektrochemische Rasterelektronenmikroskopie (SECM); Massenspektrometrie: Sekundärionen-MS (SIMS, SNMS). Anwendungen: Adsorption, Desorption, Katalyse, Korrosion, Adhäsion, Filmwachstum und Segregation.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe 1. H. Bubert and H. Jenett, Surface and Thin Film Analysis, Wiley-VCH, 3-527-30458-4;
2. H. Lüth, Surface and Interfaces of Solids, Springer, 3-540-42331-1

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Analytik von Festkörperoberflächen" (3SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0511	Wahlpflicht

Modultitel Nanostrukturierte Katalysatorsysteme

Modultitel (englisch) Nano Structured Catalytic Systems

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Technische Chemie (Reaktionstechnik)

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Nanostrukturierte Katalysatorsysteme" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 60 h Selbststudium = 90 h
- Übung "Nanostrukturierte Katalysatorsysteme" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden erlangen vertiefte Kenntnisse zum Einfluss der Nanostruktur auf die Eigenschaften von Katalysatoren.

Inhalt Katalysatorsysteme (Monolithe, Schüttungen, Mikrosysteme), Klassifizierung, Synthese, Charakterisierung, Anwendung, Bedeutung, Reaktionstechnische Modellierung.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Cybulski, Moulijn, Structured Catalysts and Reactors, Marcel Dekker, ISBN 0-8247-9921-6
Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Nanostrukturierte Katalysatorsysteme" (2SWS)
	Übung "Nanostrukturierte Katalysatorsysteme" (2SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0512	Wahlpflicht

Modultitel Nachhaltige Systeme in der Chemie

Modultitel (englisch) Sustainable Systems in Chemistry

Empfohlen für: 1./3. Semester

Verantwortlich Professur für Technische Chemie (Heterogene Katalyse)

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Wintersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Nachhaltige Systeme in der Chemie" (3 SWS) = 40 h Präsenzzeit und 55 h Selbststudium = 95 h
- Seminar "Nachhaltige Systeme in der Chemie" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 45 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 140 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden erlangen vertiefte Kenntnisse über nachhaltige Systeme in chemischen Anwendungen und können diese Kenntnisse eigenständig auf komplexe Fallbeispiele anwenden.

Inhalt Tools und Methoden zur Bewertung der Nachhaltigkeit von chemischen Prozessen und Produkten, Chemische Industrie als Vorreiter für die Entwicklung der nachhaltigen Chemie (politische Rahmenbedingungen, soziale Verantwortung, Praxisbeispiele), Katalyse als Schlüsseltechnologie für die nachhaltige Entwicklung, Grundlagen der Prozessintensivierung, Energetische und stoffliche Nutzung von Biomasse, -gas (nachwachsende Rohstoffe und Bioraffinerien), Stoffliche Nutzung von CO₂ als C1-Baustein (Stand und Perspektiven), Kopplung mit der Energiewirtschaft und erneuerbare Energien (Elektrolyseure, Power-to-X-Technologien, Energiespeicherung und wandlung, Wasserstoffwirtschaft)

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe

1. A. Lapkin, D. Constable (Editors), Green Chemistry Metrics, Wiley 2009, ISBN: 978-1-405-15968-5
2. F. Cavani, G. Centi, S. Perathoner, F. Trifiro (Editors), Sustainable Industrial Chemistry: Principles, Tools and Industrial Examples, Wiley 2009, ISBN: 978-3-527-31552-9
3. P. Imhof, J. van der Waal (Editors), Catalytic Process Development for Renewable Materials, Wiley 2013, ISBN: 978-3-527-33169-7

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Nachhaltige Systeme in der Chemie" (3SWS)
	Seminar "Nachhaltige Systeme in der Chemie" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-123-1327	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Materialwissenschaft
Modultitel (englisch)	Advanced Practical Course in Materials Science
Empfohlen für:	1./2./3. Semester
Verantwortlich	Professur für Technische Mineralogie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Materialwissenschaft" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie • M.Sc. Mineralogie und Materialwissenschaften • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden sind in der Lage in einem aktuellen Forschungsthema auf dem Gebiet der Materialwissenschaft verschiedene Analysen durchzuführen und gewinnen einen Einblick in die selbstständige Bearbeitung von Forschungsprojekten.
Inhalt	Mitarbeit in einem aktuellen Forschungsthema: Der Schwerpunkt liegt auf der Durchführung qualitativer und quantitativer Phasenanalysen mittels Röntgenbeugung, Computertomographie, Thermoanalyse.
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Materialwissenschaft" (10SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	09-121-1503	Wahlpflicht

Modultitel Computergestützte Wirkstoffentwicklung

Modultitel (englisch) Computer-aided Drug Discovery

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Institut für Wirkstoffentwicklung/Pharmazie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Computergestützte Wirkstoffentwicklung" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 60 h Selbststudium = 90 h
- Seminar "Computergestützte Wirkstoffentwicklung" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry

Ziele

Nach der aktiven Teilnahme am Modul sind die Studierenden in der Lage

- grundlegende Begriffe aus der Vorlesung zu definieren und zu erklären
- ausgewählte Verfahren und Algorithmen des virtuellen Wirkstoff-Screenings und Wirkstoff-Designs zu beschreiben und zu analysieren
- algorithmische Lösungsansätze zu erklären und diese selbstständig auf Problemstellungen anzuwenden
- Aufgabenstellungen praktisch in Form eines Software-basierten Verfahrens zu lösen.

Inhalt

Arten von virtuellen Wirkstoffbibliotheken (Fragment-basiert, Reaktions-basiert u.a.). Kodierung von chemischen Molekülen und Reaktionen. Molekül-Deskriptoren und ihre Verwendung für die Modellierung von Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (QSAR). Algorithmen des Liganden- und Rezeptor-basierten virtuellen Screenings (Methoden des Maschinellen Lernens, Liganden-Docking u.a.). Bedeutung und Anwendung von Pharmakophormodellen im virtuellen Screening. Modellierung von Rezeptor-Ligand-Interaktionen (Scoring Funktionen, Moleküldynamik, u.a.). Die Vorlesungsinhalte werden durch das Seminar, in dem aktuelle Forschungsarbeiten aus der computergestützten Wirkstoffentwicklung diskutiert werden, vertieft.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: 1 Referat (20 Min.) in Seminar</i>	
	Vorlesung "Computergestützte Wirkstoffentwicklung" (2SWS)
	Seminar "Computergestützte Wirkstoffentwicklung" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	11-122-1121	Wahlpflicht

Modultitel **Rezeptorbiochemie**

Modultitel (englisch) Receptor Biochemistry

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Bioorganische Chemie und Biochemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Rezeptorbiochemie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h
- Seminar "Rezeptorbiochemie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Voraussetzung für Modul 11-122-1122

Ziele

Die Studierenden kennen die Grundlagen der Signaltransduktion in eukaryotischen Zellen. Sie sind in der Lage, biochemische Assays zu entwickeln und auf aktuelle Fragestellungen der Signaltransduktion, der Testung von Wirkstoffen anzuwenden. Aktuelle Literatur zu diesem Themenkreis soll adäquat diskutiert werden können.

Inhalt

Prinzipielle Mechanismen der Signaltransduktion in Zellen, Kenntnisse der Hauptklassen der Rezeptoren, sowie deren Liganden und Signaltransduktionsmechanismen. Insbesondere werden Steroidrezeptoren, G-Protein-gekoppelte Rezeptoren, Tyrosinkinase gekoppelte Rezeptoren und liganden- und spannungsabhängige Ionenkanäle besprochen, der Möglichkeit zur Regulation, Entwicklung und Testung von Wirkstoffen, sowie Grundlagen der Assayführung für Membranproteine. Weitere Themen umfassen die Kenntnis der Funktion und die Mechanismen von Transportproteinen.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Rezeptorbiochemie" (2SWS)
	Seminar "Rezeptorbiochemie" (2SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	12-122-1511	Wahlpflicht

Modultitel	Grundlagen der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie
Modultitel (englisch)	Basics of Interaction of Electromagnetic Radiation with Matter
Empfohlen für:	2. Semester
Verantwortlich	Professur für Chemische Physik
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Sommersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Grundlagen der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie" (4 SWS) = 60 h Präsenzzeit und 90 h Selbststudium = 150 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy • M.Sc. Chemistry and Biotechnology
Ziele	Die Studierenden beherrschen die allgemeinen Grundlagen und die wesentlichen spektroskopischen Methoden und deren Anwendung.
Inhalt	<ul style="list-style-type: none"> - Introduction and history - Absorption and emission of radiation - Structure and symmetry - Nuclear magnetic resonance - Electron paramagnetic resonance - IR, Raman and UV/VIS spectroscopy - Laser and NLO effects in spectroscopy - X-ray and photoelectron spectroscopy - Moessbauer spectroscopy
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in der Lehrveranstaltung.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Grundlagen der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie" (4SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0423	Wahlpflicht

Modultitel **Oberflächenspektroskopie - Methoden und Anwendungen**

Modultitel (englisch) Surface Spectroscopy - Methods and Applications

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Physikalische Chemie der Oberflächen

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen • Vorlesung "Oberflächenspektroskopie - Methoden und Anwendungen" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 105 h Selbststudium = 150 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Mineralogie und Materialwissenschaft
- M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden kennen Gesetzmäßigkeiten der Festkörperoberflächenstruktur, der Gas-Festkörper-Wechselwirkung und des Dünnschichtwachstums und sind in der Lage, diese auf entsprechende Fragestellungen anzuwenden. Sie kennen wichtige Techniken der Oberflächenanalyse und können diese vergleichen und hinsichtlich ihrer Anwendung bewerten.

Inhalt Einführung zur Struktur von Festkörperoberflächen und Grenzflächen. Physikalische Grundlagen, Instrumentarien und Anwendungsbeispiele von Methoden der Oberflächenanalyse: Elektronenspektroskopie: Photo- (XPS, UPS) und Augerelektronenspektroskopie (AES), Energieverlustspektroskopie (EELS), Quantitative Laterallverteilungs- und Tiefenprofilanalyse des chemischen Zustands; Elektronenbeugung (LEED, XPD); Sekundärionenmassenspektrometrie (SIMS, SNMS). Anwendungen: Adsorption, Desorption, Katalyse, Filmwachstum und Segregation.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Oberflächenspektroskopie - Methoden und Anwendungen" (3SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0621	Wahlpflicht

Modultitel **Moderne Methoden der Theoretischen Chemie**

Modultitel (englisch) Modern Methods in Theoretical Chemistry

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Theoretische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Moderne Methoden der Theoretischen Chemie" (4 SWS) = 60 h Präsenzzeit und 60 h Selbststudium = 120 h
- Übung "Moderne Methoden der Theoretischen Chemie" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 15 h Selbststudium = 30 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele

Die Studierenden kennen die einschlägigen Techniken (siehe Inhalt) und können deren Anwendbarkeit auf verschiedene Systeme und Fragestellungen beurteilen. Die Studierenden sind in der Lage selbstständig Computersimulationen an Cluster- und periodischen Systemen durchzuführen und kritisch deren Gültigkeit einzuschätzen. Die Studierenden haben erste Grundkenntnisse über die Born-Oppenheimer-Näherung und die Beschränkung auf zeitunabhängige Phänomene hinaus gewonnen.

Inhalt

Methoden zur Berücksichtigung der Elektronenkorrelation (Post-Hartree-Fock-Verfahren, Dichtefunktionaltheorie), Methoden zur Berechnung sehr großer Systeme, Superzellansätze zur Berechnung periodischer Strukturen, Methoden zur Behandlung dynamischer Prozesse.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Moderne Methoden der Theoretischen Chemie" (4SWS)
	Übung "Moderne Methoden der Theoretischen Chemie" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0622	Wahlpflicht

Modultitel	Maschinelles Lernen: Grundlagen und Anwendungen in der Chemie
Modultitel (englisch)	Machine Learning: Fundamentals and Applications in Chemistry
Empfohlen für:	2. Semester
Verantwortlich	Professur für Theoretische Chemie des Materialdesigns
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Sommersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung mit integrierter Übung "Maschinelles Lernen: Grundlagen und Anwendungen in der Chemie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 60 h Selbststudium = 90 h • Seminar "Maschinelles Lernen: Grundlagen und Anwendungen in der Chemie" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Chemie • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Die Studierenden erhalten einen Einblick in das Gebiet der Künstlichen Intelligenz und deren Anwendung in der Chemie. Basierend auf den theoretischen Hintergründen moderner Maschinellem Lernmethoden wenden die Studierenden die gelernten Methoden in einem Übungsteil an. Dabei erhalten die Studierenden eine Einführung in die Programmiersprache Python, um künstliche Intelligenz verwenden zu können. Studierende erarbeiten die Übungen im Selbststudium. Im Seminar setzen sich Studierende mit Anwendungen der Methoden auseinander.
Inhalt	<ul style="list-style-type: none"> - Einführung in die Künstliche Intelligenz: Überwachtes Lernen, unbeaufsichtigtes Lernen und bestärkendes Lernen - Repräsentation von chemischen Systemen an künstlich intelligente Methoden: Wie können wir chemische Systeme übersetzen, sodass künstlich intelligente Methoden davon lernen können? - Regression: von linearer Regression über Ridge Regression zu tiefen neuronalen Netzen und deren Anwendung in der Chemie - Analyse von Big Data: Dimensionsreduktion, Clustering und Klassifikation - Molekular und Materialdesign mit generativen Modellen - Selbst-getriebene Laboratorien: Stand der Technik und Potential der KI in der Chemie
Teilnahmevoraussetzungen	Grundverständnis theoretischer Chemie
Literaturangabe	Pavlo Dral: "Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning" Christopher M. Bishop: "Pattern Recognition and Machine Learning" Ian Goodfellow, Yoshua Bengio and Aaron Courville: "Deep Learning" Weitere Hinweise zu Literaturangaben in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten

Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben.
Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung:	
Klausur* 60 Min., mit Wichtung: 2	Vorlesung mit integrierter Übung "Maschinelles Lernen: Grundlagen und Anwendungen in der Chemie" (2SWS)
Referat 20 Min., mit Wichtung: 1	Seminar "Maschinelles Lernen: Grundlagen und Anwendungen in der Chemie" (1SWS)

* Diese Prüfungsleistungen müssen bestanden sein.

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0642	Wahlpflicht

Modultitel Computerchemie für Festkörper

Modultitel (englisch) Computational Chemistry of Solids

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Theoretische Chemie komplexer Systeme

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Computerchemie für Festkörper" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 60 h
- Praktikum "Computerchemie für Festkörper" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 90 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry
- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology
- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy

Ziele Die Studierenden lernen Methoden kennen, die zur quantentheoretischen Beschreibung von Festkörpern geeignet sind. Sie erlernen die Grundlagen der elektronischen und vibronischen Struktur von Festkörpern und erhalten über Beispiele einen Einblick in aktuelle Forschungsfelder der Materialchemie.

Inhalt Kristallgitter, reziprokes Gitter, Sommerfeld-Modell, Bandstruktur, elektronische Zustandsdichte, Magnetismus, Phononen, Nanostrukturen, zweidimensionale Kristalle, topologische Isolatoren.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hofmann, Philip: Solid State Physics, Wiley-VCH
Weitere Hinweise zu Literaturangaben in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Computerchemie für Festkörper" (2SWS)
	Praktikum "Computerchemie für Festkörper" (3SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-1119	Wahlpflicht

Modultitel Trennmethoden und Moderne "-omics"-Techniken

Modultitel (englisch) Separation techniques and advanced "-omics"-techniques

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Bioanalytik

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Trennmethoden und Moderne "-omics"-Techniken" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 90 h
- Seminar "Moderne "-omics"-Techniken" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Chemie
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden kennen moderne analytische Hochdurchsatzmethoden zur Identifizierung und Quantifizierung komplexer Probengemische als Bestandteil "Hypothesen-freier" und "Hypothesen-getriebener" Forschungsansätze und sind in der Lage sachgerecht zu referieren.

Inhalt Die Identifizierung und Quantifizierung möglichst vieler Substanzen in komplexen Probengemischen, wie Körperflüssigkeiten erfordern die Kombination mehrerer Trenntechniken mit massenspektrometrischen Methoden. Vermittelt werden häufig eingesetzte Trenntechniken mit hoher Auflösung, einschließlich mehrdimensionaler chromatographischer und elektrophoretischer Trennungen. Die Möglichkeiten und Anforderungen dieser Techniken in Kombination mit schnellen hochauflösenden Massenspektrometern werden an Beispielen der Proteomics, Lipidomics, Peptidomics und Metabolomics ausführlich dargestellt und erarbeitet.

Teilnahmevoraussetzungen Teilnahme am Modul 13-122-0111. Die Teilnehmerzahl ist begrenzt.

Literaturangabe J.D. Watson & O.D. Sparkman: Mass spectrometry, Wiley Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung:	
Klausur* 90 Min., mit Wichtung: 3	Vorlesung "Trennmethoden und Moderne "-omics"-Techniken" (3SWS)
Referat 20 Min., mit Wichtung: 1	Seminar "Moderne "-omics"-Techniken" (1SWS)

* Diese Prüfungsleistungen müssen bestanden sein.

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0121	Pflicht

Modultitel	NMR an Biosystemen
Modultitel (englisch)	NMR on Biosystems
Empfohlen für:	2. Semester
Verantwortlich	Professur für Molekülspektroskopie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Sommersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "NMR an Biosystemen" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 60 h • Seminar "NMR an Biosystemen" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 45 h • Praktikum "NMR an Biosystemen" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 45 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	• M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	Kenntnis und Anwendung der wichtigsten NMR-Methoden zu Strukturaufklärung Spezielle Kenntnis von NMR an Biosystemen
Inhalt	Grundlagen der 2D-NMR Spektroskopie, Beschreibung der J-aufgelösten Techniken, verschiedene Formen von COSY, NOESY, und TOCSY, CH-Korrelationen wie HETCOR, HMQC, HSQC und HMBC, CC-Korrelationen wie INADEQATE und ADEQUATE [WS], Anwendung der oben genannte Techniken auf Proteine, DNA- und RNA-Fragmente
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	1. Jeremy K. Sanders, Brian K. Hunter: Modern NMR Spectroscopy, a guide for Chemists, Oxford University Press 1993 2. Stefan Berger, Siegmara Braun: 200 and More NMR Experiments, Wiley-VCH, 2004 3. http://www.uni-leipzig.de/~nmr/ANALYTIK/Studium
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: Praktikumsleistung</i>	
	Vorlesung "NMR an Biosystemen" (2SWS)
	Seminar "NMR an Biosystemen" (1SWS)
	Praktikum "NMR an Biosystemen" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0122	Wahlpflicht

Modultitel	Ausgewählte Themen der NMR-Spektroskopie
Modultitel (englisch)	Selected Topics of NMR Spectroscopy
Empfohlen für:	2. Semester
Verantwortlich	Professur für Molekülspektroskopie
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Sommersemester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Vorlesung "Ausgewählte Themen der NMR-Spektroskopie" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 50 h Selbststudium = 80 h • Praktikum "Ausgewählte Themen der NMR-Spektroskopie" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 30 h Selbststudium = 45 h
Arbeitsaufwand	5 LP = 125 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemistry and Biotechnology
Ziele	Die Studierenden verfügen über ein vertieftes Verstehen spezieller NMR-Methoden.
Inhalt	Das Modul besteht aus Spezialvorlesungen mit den folgenden Inhalten: Product Operator Formalismus 2D NMR-Spektroskopie NMR Spin-Systeme Dynamische NMR Schwach-orientierte Moleküle Festkörper NMR ausgewählter NMR-Kerne Hyperpolarisation NMR mit gepulsten Feldgradienten
Teilnahmevoraussetzungen	keine
Literaturangabe	1. M. Levitt: "Spin Dynamics", Wiley-VCH 2. H. Günther "NMR-Spetroscopy", Wiley-VCH, 3rd ed. 2013 Weitere Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in der Vorlesung.
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
<i>Prüfungsvorleistung: Praktikumsleistung</i>	
	Vorlesung "Ausgewählte Themen der NMR-Spektroskopie" (2SWS)
	Praktikum "Ausgewählte Themen der NMR-Spektroskopie" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0221	Pflicht

Modultitel **Anorganische Strukturanalyse**

Modultitel (englisch) Structural Analysis in Inorganic Chemistry

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professuren für Anorganische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen • Vorlesung "Anorganische Strukturanalyse" (4 SWS) = 60 h Präsenzzeit und 90 h Selbststudium = 150 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
• M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry
• M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden kennen moderne strukturanalytische Methoden zur Charakterisierung anorganischer Verbindungen.

Inhalt Röntgenstrukturanalyse: Grundlagen der Kristallographie, Röntgenbeugung am Kristall, Symmetriellehre (Punktgruppen und Raumsymmetrie), Strukturfaktoren, Fourier-Synthese, experimentelle Methoden, Strukturlösung und -verfeinerung, Phasenproblem; Ergebnisse und Interpretation von Einkristall-Röntgenstrukturanalysen; Datenbanken und Programmsysteme.
IR-Spektroskopie: Grundlagen, Spektrenvorhersage, ausgewählte Beispiele.
NMR-Spektroskopie: Grundlagen, Heterokerne (z.B. ^{19}F , ^{31}P , ^{207}Pb , ^{119}Sn), ausgewählte Beispiele.
Magnetochemie: Molekularer Magnetismus, Magnetische Suszeptibilität, Magnetische Eigenschaften von Koordinationsverbindungen, "Spin-only" Magnetismus, Magnetische Austauschwechselwirkungen, Einzelmolekül-Magnete.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in der Lehrveranstaltung.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Anorganische Strukturanalyse" (4SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0321	Wahlpflicht

Modultitel Highlights in der Naturstoffsynthese

Modultitel (englisch) Highlights in Natural Products Synthesis

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Organische Chemie

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Highlights in der Naturstoffsynthese" (3 SWS) = 45 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 90 h
- Seminar "Highlights in der Naturstoffsynthese" (1 SWS) = 15 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 60 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Der Studierenden erlernen am Beispiel herausragender Naturstoffsynthesen die Retrosynthese und Synthesepaltung komplexer organischer Strukturen.

Inhalt Naturstoffe sind eine wertvolle Quelle für die organische Chemie. Ihre einzigartige Struktur sowie biologische Aktivität machen sie zu einem idealen Ziel für synthetische Studien. Im Rahmen der Vorlesung werden komplexe Synthesen strukturell völlig unterschiedlicher Naturstoffe mit interessanten biologischen Aktivitäten vorgestellt (Prostaglandine, Alkaloide, Macrolide, Steroide, Terpene). Neben dem Erlernen moderner Synthesemethoden steht die Planung der Synthese im Fokus. Dazu werden die Zielmoleküle zunächst gedanklich auf kleinere und einfachere Fragmente zurückgeführt, die dann leichter synthetisierbar sind (Retrosynthese). Für eine erfolgreiche Retrosynthese ist das Erkennen sogenannter Retrons wichtig, struktureller Untereinheiten, die durch eine Synthese aufgebaut werden können.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe K. C. Nicolaou, Classics in Total Synthesis 1 und 2, Wiley-VCH; Hinweise zu Literaturangaben erfolgen in den Lehrveranstaltungen.

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Mündliche Prüfung 30 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Highlights in der Naturstoffsynthese" (3SWS)
	Seminar "Highlights in der Naturstoffsynthese" (1SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-122-0521	Wahlpflicht

Modultitel **Moderne Konzepte in der Katalyse**

Modultitel (englisch) Modern Concepts in Catalysis

Empfohlen für: 2. Semester

Verantwortlich Professur für Technische Chemie (Katalyse)

Dauer 1 Semester

Modulturnus jedes Sommersemester

Lehrformen

- Vorlesung "Heterogene Katalyse" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h
- Seminar "Moderne Konzepte in der Katalyse" (2 SWS) = 30 h Präsenzzeit und 45 h Selbststudium = 75 h

Arbeitsaufwand 5 LP = 150 Arbeitsstunden (Workload)

Verwendbarkeit

- M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
- M.Sc. Chemistry and Biotechnology

Ziele Die Studierenden verfügen über vertiefte Kenntnisse der Konzepte der Katalyse.

Inhalt Kinetik katalytischer Reaktionen, Katalysatorcharakterisierung, Feststoffkatalysatoren, bifunktionelle Katalysatoren, katalytische Reaktionsmechanismen, formselektive Katalyse, Katalysatordeaktivierung, industrielle katalytische Prozesse.

Teilnahmevoraussetzungen keine

Literaturangabe Chorkendorff, Niemantsverdriet, Concepts of Modern Catalysis and Kinetics, Wiley, ISBN 3-527-30574-2

Vergabe von Leistungspunkten Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Klausur 90 Min., mit Wichtung: 1	
	Vorlesung "Heterogene Katalyse" (2SWS)
	Seminar "Moderne Konzepte in der Katalyse" (2SWS)

Master of Science Structural Chemistry and Spectroscopy

Akademischer Grad	Modulnummer	Modulform
Master of Science	13-121-0632	Wahlpflicht

Modultitel	Vertiefungspraktikum Künstliche Intelligenz in der Theoretischen Chemie
Modultitel (englisch)	Practical Course Artificial Intelligence in Theoretical Chemistry
Empfohlen für:	3. Semester
Verantwortlich	Professur für Theoretische Chemie des Materialdesigns
Dauer	1 Semester
Modulturnus	jedes Semester
Lehrformen	<ul style="list-style-type: none"> • Praktikum "Vertiefungspraktikum Künstliche Intelligenz in der Theoretischen Chemie" (10 SWS) = 150 h Präsenzzeit und 150 h Selbststudium = 300 h
Arbeitsaufwand	10 LP = 300 Arbeitsstunden (Workload)
Verwendbarkeit	<ul style="list-style-type: none"> • M.Sc. Advanced Spectroscopy in Chemistry • M.Sc. Chemie • M.Sc. Structural Chemistry and Spectroscopy
Ziele	<p>Ziel des Vertiefungspraktikums ist es, Studierenden durch selbstständiges wissenschaftliches Arbeiten erste Einblicke in die Anwendung von maschinellen Lernmethoden für die (Theoretische) Chemie zu gewähren. Studierende sind in der Lage aktuelle Problemstellungen in der (theoretischen) Chemie in ein Problem der künstlichen Intelligenz zu transferieren und mit Hilfe von Methoden des maschinellen Lernens (überwachtes, unüberwachtes und verstärkendes Lernen), Lösungsansätze zu entwickeln.</p>
Inhalt	<p>Generieren von Trainingsdatensätzen mit Methoden der Theoretischen Chemie (DFT, Methoden für angeregte Zustände, semiempirische Methoden,...)</p> <p>Regressionsprobleme: Lernen von Beziehungen zwischen Struktur und Eigenschaften von Molekülen und Materialien (Kernel Ridge und Gaussian Process Regression, tiefe neuronale Netze)</p> <p>Klassifikationsprobleme: Gewinnung neuer Erkenntnisse anhand von Datenanalyse (Dimensionsreduktionsmethoden, Clustering,...)</p> <p>Molekular- und Materialdesign mit Hilfe von generativen Modellen</p>
Teilnahmevoraussetzungen	Grundlegende Kenntnisse in der Theoretischen Chemie
Literaturangabe	<p>Pavlo Dral: "Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning"</p> <p>Christopher M. Bishop: "Pattern Recognition and Machine Learning"</p> <p>Ian Goodfellow, Yoshua Bengio and Aaron Courville: "Deep Learning"</p>
Vergabe von Leistungspunkten	Leistungspunkte werden mit erfolgreichem Abschluss des Moduls vergeben. Näheres regelt die Prüfungsordnung.

Prüfungsleistungen und -vorleistungen

Modulprüfung: Praktikumsleistung, mit Wichtung: 1	
	Praktikum "Vertiefungspraktikum Künstliche Intelligenz in der Theoretischen Chemie" (10SWS)