

**Modulhandbuch für den  
Studiengang  
Bachelor of Science in Chemie**

## Inhaltsverzeichnis

<b>Modulhandbuch für den Bachelor-Studiengang Chemie</b>	
Modulplan für den Bachelor-Studiengang Chemie	1
Beschreibung der Module	
<b>1-4. Semester</b>	
Vorkurs zum Studium der Chemie und Biochemie	4
Allgemeine und Analytische Chemie (V + Ü + P)	5
Instrumentelle Analytische Chemie I (V + Ü)	6
Analytisch-chemisches Grundpraktikum (V + Ü + P)	7
Mathematik für Chemiker (V + Ü)	8
Anwendung mathematischer Verfahren in der Chemie (V + Ü)	9
Grundlagen der Physik I (V + Ü + P)	10
Grundlagen der Physik II (V + Ü)	11
Grundlagen der Anorganischen Chemie I (V + Ü + P)	13
Grundlagen der Anorganischen Chemie II (V + Ü)	14
Organische Chemie I (V + Ü)	15
Organische Chemie II (V + Ü)	16
Organisch - chemisches Grundpraktikum	17
Physikalische Chemie I (V + Ü)	18
Physikalische Chemie II (V + Ü + P)	19
Einführung in die Biochemie (V + Ü)	21
Methoden der Strukturaufklärung (V + Ü)	22
Grundlagen der Technischen Chemie (V + Ü)	23
Theorie der chemischen Bindung (V + Ü)	24
<b>5-6. Semester</b>	
Anorganische Chemie III (V + S)	25
Organische Chemie III (V + Ü)	26
Chemikalienrecht - Toxikologie - Ethik	27
F-Synthesepraktikum in Anorganischer Chemie	29
F-Synthesepraktikum in Organischer Chemie	31
Physikalische Chemie III (V + Ü + P)	32
Physikalische Chemie IV (V + Ü)	33
<b>Fortgeschrittene Theorie und Praxis des Wahlfaches</b>	
<i>Wahlvorlesung + Wahlpraktikum</i>	
Fortgeschritten Theorie und Praxis der Analytischen Chemie	35
<b>oder</b> Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Biochemie I	36
<b>oder</b> Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Technischen Chemie I	37
<b>oder</b> Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Theoretischen Chemie I	40
<b>Bachelor-Arbeit</b>	42

**Modulhandbuch für den Bachelor-Studiengang Chemie****Studienverlaufsplan für den Bachelor-Studiengang Chemie (Juni 2022)**

(1) Der folgende Studienplan gilt in Verbindung mit der Prüfungsordnung für den Bachelor-Studiengang Chemie. Es wird empfohlen, die Lehrveranstaltungen in der in Anlage 1 angegebenen Reihenfolge zu besuchen. Für einzelne Praktika ist die erfolgreiche Teilnahme an vorhergehenden Lehrveranstaltungen entsprechend Abs. 2 erforderlich.

(2) Die Zulassung zu den nachstehend genannten Praktika ist abhängig von dem Vorliegen eines Leistungsnachweises für die im Ausbildungsgang vorhergehenden Lehrveranstaltungen (Vorleistungen) oder der Teilnahme an vorbereitenden Lehrveranstaltungen gemäß der nachstehenden Zusammenstellung.

<b>Lehrveranstaltung</b>	<b>Zulassungsvoraussetzung</b>
Anorganisch-chemisches Grundpraktikum	Vorlesung Allgemeine und Analytische Chemie und Praktikum Allgemeine Chemie
Analytisch-chemisches Grundpraktikum	Vorlesung Allgemeine und Analytische Chemie und Praktikum Allgemeine Chemie
Organisch-chemisches Grundpraktikum	Organische Chemie I oder Organische Chemie II
Physikalisch-chemisches Grundpraktikum	Mathematik für Chemiker oder Physikalische Chemie I
F-Praktikum für Synthesechemie	Anorganisch-chemisches Grundpraktikum und Organisch-chemisches Grundpraktikum
Physikalisch-chemisches F-Praktikum	Physikalisch-chemisches Grundpraktikum und Teilnahme an Klausur Quantenmechanik und Spektroskopie (PC III)
Analytisch-chemisches F-Praktikum	Instrumentelle Analytische Chemie I und Teilnahme an Klausur Instrumentelle Analytische Chemie II
Theoretisch-chemisches Praktikum	Theoretische Chemie I
Technisch-chemisches Praktikum	Grundlagen der Technischen Chemie oder Technische Chemie I
Biochemisches Praktikum	Einführung in die Biochemie oder Biochemie I

(3) Sämtliche Module in Teil 1 des Modulplans (1. bis 4. Semester) sind Pflichtmodule. Für Teil 2 des Modulplans (5. bis 6. Semester) gelten die Regelungen zur Wahlfreiheit gemäß § 4 Abs. 2 der Prüfungsordnung. Die Zusatzfächer können aus der vom Prüfungsausschuss genehmigten Liste gewählt werden, die über das Prüfungsamt einsehbar ist. Hinweis: Ist die Aufnahme eines weiterführenden Master-Studiengangs geplant, so sind für die Wahl der Module in Teil 2 des Modulplans die Zugangsvoraussetzungen zu diesem Masterstudiengang zu beachten (qualifizierter Bachelor).

(4) Der Prüfungsausschuss kann in begründeten Ausnahmefällen Abweichungen von den Vorschriften der Absätze 1 und 2 bzw. des Modulplans selbst auf Antrag genehmigen.

V = Vorlesung, Ü = Übungen, S = Seminar, Pr = Praktikum, CP = Kreditpunkte für den jeweiligen Leistungsnachweis

Sem.	Modul/Lehrveranstaltung	V	Ü/S	Pr	CP
1-4	<b>Allgemeine und Analytische Chemie</b>	6	3	6	15
	Vorlesung Allgemeine und Analytische Chemie	6	3	-	11
	Praktikum Allgemeine Chemie	-	-	6	4
	<b>Instrumentelle Analytische Chemie I</b>	2	1	-	5
	<b>Analytisch-chemisches Grundpraktikum</b>	-	-	10	7
	<b>Mathematik für Chemiker</b>	3	1	-	6
	<b>Anwendung mathematischer Verfahren in der Chemie</b>	2	1	-	5
	<b>Grundlagen der Physik I</b>	2	1	2	6
	Physik I	2	1	-	4
	Physikalisches Grundpraktikum	-	-	2	2
	<b>Grundlagen der Physik II</b>	4	1	-	6
	Physik II	4	1	-	6
	<b>Grundlagen der Anorganischen Chemie I</b>	2	1	10	11
	Anorganische Chemie I	2	1	-	4
	Anorganisch-chemisches Grundpraktikum	-	-	10	7
	<b>Grundlagen der Anorganischen Chemie II</b>	2	1	-	5
	Anorganische Chemie II	2	1	-	5
	<b>Organische Chemie I</b>	3	1	-	5
	<b>Organische Chemie II</b>	3	1	-	7
	<b>Organisch-chemisches Grundpraktikum</b>	-	1	16	10
	Grundpraktikum mit Seminar	-	1	16	9
	Mündliche Abschlussprüfung	-	-	-	1
	<b>Physikalische Chemie I</b>	2	1	-	5
	Chemische Thermodynamik	2	1	-	5
	<b>Physikalische Chemie II</b>	2	3	6	9
	Reaktionskinetik und Transport	2	1	-	4
	Physikalisch Chemisches Grundpraktikum	-	2	6	5
	<b>Einführung in die Biochemie</b>	2	1	-	4
	<b>Methoden der Strukturaufklärung</b>	2	1	-	5
	<b>Grundlagen der Technischen Chemie</b>	2	1	-	4
	<b>Theorie der chemischen Bindung</b>	2	1	-	5
	<b>Summe: 1.-4. Semester</b>		<b>41</b>	<b>21</b>	<b>50</b>
5-6	<b>Anorganische Chemie III</b>	2	1	-	5
	<b>Organische Chemie III</b>	2	1	-	5
	<b>Chemikalienrecht - Toxikologie - Ethik</b>	2	1	-	5
	<b>F-Synthesepraktikum in Anorg. Chemie</b>	-	-	7	5
	<b>F-Synthesepraktikum in Organischer Chemie</b>	-	-	7	5

<b>Physikalische Chemie III</b>	2	2	5	9
Quantenmechanik und Spektroskopie	2	1	-	5
Physikalisch-Chemisches F-Praktikum	-	1	5	4
<b>Physikalische Chemie IV</b>	2	1	-	5
Statistische Thermodynamik	2	1	-	5
<b>Fortgeschrittene Theorie und Praxis des Wahlfaches</b>	2	2	5	9
<i>Wahlvorlesung</i>	2	1	-	5
- Instrumentelle Analytische Chemie II				
- Biochemie I				
- Technische Chemie I				
- Theoretische Chemie I				
<i>Wahlpraktikum *)</i>	-	1	5	4
- Analytisch-chemisches F-Praktikum				
- Biochemisches Praktikum				
- Technisch-chemisches Praktikum				
- Theoretisch-chemisches Praktikum				
<b>Bachelor-Arbeit</b>	-	-	-	12
<b>Summe: 5.-6. Semester</b>	<b>12</b>	<b>8</b>	<b>24</b>	<b>60</b>
<b>Summe: 1.-6. Semester</b>	<b>53</b>	<b>29</b>	<b>74</b>	<b>180</b>

\*) Es wird empfohlen, das Modul Chemikalienrecht - Toxikologie - Ethik vorzugsweise im ersten Semester statt im fünften Semester zu belegen.

\*\*) Auf Antrag an die Praktikumsleitung der 4 CP-Wahlfach-Praktika im 6. Fachsemester kann im Bedarfsfall durch eine Zusatzleistung ein zusätzlicher Kreditpunkt erworben werden.

#### Zusatzfächer 5. und 6. Semester

Lehrveranstaltungen aus den Bereichen

- Angewandte Informatik
- Betriebswirtschaft & Jura
- Philosophie der Naturwissenschaften
- Fremdsprachen (fortgeschrittene Kurse)
- anderer naturwissenschaftlicher Fächer

bis 30 CP

gemäß Liste geeigneter fachfremder  
Lehrveranstaltungen (Präzedenz, s.  
Prüfungsamt)

**Beschreibung der Module:**

<b>Vorkurs zum Studium der Chemie und Biochemie</b>					
Modul-Nr. 0	Credits 0 CP	Workload 30 h	Semester vor Sem 1	Turnus Zum WiSe	Dauer 1 Woche
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 12 h b) 13 h	<b>Selbststudium</b> 5 h	<b>Gruppengröße</b> 180 - 200 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>  Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls kennen Studierende <ul style="list-style-type: none"> <li>• die Einheiten des SI-Systems und die Einheiten der wichtigsten abgeleitend Größen und sind in der Lage hiermit bei einfachen Anwendungen richtig umzugehen</li> </ul> können Studierende <ul style="list-style-type: none"> <li>• mit dem Taschenrechner einfache Berechnungen zum Potenzieren und Logarithmieren auszuführen</li> <li>• den Kurvenverlauf einfacher Funktionen zu zeichnen und die Ableitungen dieser Funktionen zu berechnen</li> <li>• Grundlagen zum Aufbau von Atomen am Beispiel eines NaCl-Kristalls anwenden</li> <li>• gut vorbereitet und motiviert in das Studium starten</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> Berechnen von Potenzen und Logarithmen mit dem Taschenrechner; Kurvenverlauf und Ableitung einfacher Funktionen; Einheiten im SI-System und abgeleitete Größen: Dichte, Kräfte, Druck, Arbeit und Energie; elektrische Größen Stromstärke, Spannung und Widerstand; elektrisches Feld; Zustandsgleichung für Gase; Aufbau der Atome; Überlegungen zur Spektroskopie an Atomen und Molekülen; Einblick in den Nanokosmos					
<b>Lehrformen</b> Seminaristischer Unterricht, Gruppenarbeiten					
<b>Prüfungsformen</b> keine					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> es werden keine Kreditpunkte vergeben					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Studiengang BSc Chemie , Studiengang BSc Biochemie, Studiengang 2-Fächer BSc Chemie					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> A. Birkner					
<b>Sonstige Informationen</b>					

<b>Allgemeine und Analytische Chemie</b>					
Modul-Nr. 1	Credits 15 CP	Workload 450 h	Semester 1. Sem.	Turnus Nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Allgemeine und Analytische Chemie (V und Ü) b) Einführungspraktikum Allgemeine Chemie (EPAC)			<b>Kontaktzeit</b> a) 6 SWS b) 6 SWS	<b>Selbststudium</b> a) 160 h b) 110 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 150 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Keine					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach Ende dieses Moduls verfügen die Studierenden über grundlegende Kenntnisse zu den allgemeinen Prinzipien der Chemie und des chemischen Rechnens und können diese sicher anwenden. Außerdem erhalten sie erste Einblicke in das chemische Arbeiten im Labor. Die Studierenden sind mit der wissenschaftlichen Arbeitsweise und Problemlösung vertraut und können diese auf Probleme in verschiedenen Bereichen der Chemie anwenden.					
<b>Inhalt</b> Wissenschaftstheorie, Der analytische Prozess, Stöchiometrisches Rechnen, Chemische Statik: Stoffe, Verbindungen, Elemente, Stöchiometrielehre, Aufbau der Atome und des Periodensystems. Chemische Energetik: Enthalpie, Enthalpie, Kalorimetrie. Chemische Bindung: Ionenkristalle und Kugelpackungen, Moleküle und Orbitale, metallische Bindung, Koordinationsverbindungen. Strukturen von Molekülverbindungen, VSEPR-Modell. Chemische Kinetik: Geschwindigkeit chemischer Reaktionen, Geschwindigkeitsgesetze, Aktivierungsenergie und Katalyse. Chemisches Gleichgewicht: Redoxgleichgewichte. Trends im Periodensystem der Elemente. Säuren und Basen: Säure/Base Theorien pH-Wert, starke, schwache Säuren, pH-Wert Berechnung.					
<b>Lehrformen</b> a) Experimentalvorlesung, inverted class room, Lehrvideos (Selbststudium), Übungen, b) Praktikum, Sprache: Deutsch					
<b>Prüfungsformen</b> a) Klausur 180 min am Semesterende, es wird angeboten die Klausur in drei Teilen zu je 90 min (je 33% Wertung) während des Semesters zu schreiben. b) Teilnahme an Sicherheitsveranstaltungen, erfolgreiche Durchführung der Praktikumsversuche, Bestehen der Antestate und Abgabe der Protokolle zu den Versuchsdurchführungen.					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur, Teilnahme am Praktikum, Anteil der Modulnote: 100 %					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Biochemie, 2-Fach Bachelorstudiengänge mit Chemie als einem Fach, Teile des Moduls (z.B. der V und Ü) können in anderen Studiengängen als Grundlagen im Nebenfach Chemie angeboten werden.					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Gewichtet nach CP					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> Prof. Dr. Lars Borchardt, Prof. Dr. Rochus Schmid und alle Dozentinnen und Dozenten der Anorganischen Chemie und Analytischen Chemie					
<b>Sonstige Informationen</b>					

<b>Instrumentelle Analytische Chemie I</b>					
Modul-Nr. 2	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 2. Sem.	Turnus SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Vorlesung Instrumentelle Analytik I			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 26 h b) 2 SWS / 26 h	<b>Selbststudium</b> 98 h	<b>Gruppengröße</b> 150 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> <i>keine</i>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <u>Zielsetzung:</u> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls besitzen Studierende ein grundlegendes Verständnis über die Theorie und Praxis der wichtigsten photometrischen, chromatographischen, elektrochemischen und atomspektrometrischen Methoden der Instrumentellen Analytik. Er/Sie soll die Berechnung von Analysenergebnissen aus den experimentellen Messwerten sicher beherrschen und befähigt sein, die erhaltenen Messergebnisse kritisch zu beurteilen und mögliche Fehlerquellen zu erkennen. <u>Kompetenzen:</u> Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, grundlegende Methoden der instrumentellen Analytik zu verstehen.					
<b>Inhalt</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Elektroanalytische Methoden: Elektrogravimetrie, Coulometrie, Potentiometrie, Konduktometrie, Voltammetrie.</li> <li>– Spektroskopische Methoden: UV/VIS-Spektroskopie, Atomabsorptionsspektrometrie, Atomemissionsspektrometrie, Röntgenfluoreszenzanalyse.</li> <li>– Trennmethode: Flüssigkeitschromatographie, Gaschromatographie, Superkritische Fluidchromatographie.</li> <li>– Volumetrie: Redox-Titrationen und komplexometrische Titrationen</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b> <i>a) Vorlesung; b) Übung; c) e-learning Module im Moodle</i>					
<b>Prüfungsformen</b> <i>schriftliche Modulabschlussprüfung von 120 min</i>					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> <i>Bestehen der Klausur</i>					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> <i>BSc. Biochemie; MEd Chemie</i>					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> nach CP gewichtet					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> A. Rosenhahn, W. Schuhmann, K. Tschulik					
<b>Sonstige Informationen</b>					



<b>Analytisch-chemisches Grundpraktikum</b>					
Modul-Nr. 3	Credits 7 CP	Workload 210 h	Semester 3. Sem.	Turnus WS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Analytisch-chemisches Grundpraktikum			<b>Kontaktzeit</b> 12 SWS / 156 h	<b>Selbststudium</b> 54 h	<b>Gruppengröße</b> 80 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> <i>Leistungsnachweis Allgemeine und Analytische Chemie und Teilnahmenachweis Praktikum Allgemeine Chemie</i>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Zielsetzung: Erwerb breit angelegter Praxiskenntnisse der klassischen Verfahren der quantitativen und grundlegender Verfahren der instrumentellen Analyse; Einüben der spezifischen Arbeitstechniken der analytischen Chemie: Gerätekunde, Gerätebedienung und akribische Arbeitstechnik wie analytisches Wiegen, Filtrieren, Verdünnen, Reinigen, etc.; Erlernen des primären Protokollierens der experimentellen Ergebnisse in einem Laborjournal; Selbständige Auswertung der Versuchsergebnisse auch mit unterstützenden Rechnerprogrammen. Erlernen des Erstellens von kompletten Versuchsprotokollen mit Einleitung, Aufgabenstellung, theoretischen Grundlagen (Vorlesungsbezug) einschließlich der sicherheitstechnischen Aspekte, experimentellen Ergebnissen, Auswertung mit Diskussion und Fehlerbetrachtung.  <b>Kompetenzen:</b> Die Studierenden erwerben grundlegende praktische Kenntnisse zur chemischen Analytik. Darüber hinaus erwerben sie erste Erfahrungen in der qualitativen Bewertung von chemischen Experimenten.					
<b>Inhalt</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Sicherheitsunterweisung: Vermittlung praktischer Kenntnisse zur Arbeitssicherheit speziell in einem analytisch-chemischen Labor</li> <li>– Gravimetrie.</li> <li>– Volumetrie: Titereinstellung, Säure-Base-Titration; Fällungstitration; Komplexometrie; Redox-Titrationen</li> <li>– Photometrie</li> <li>– Elektrochemische Analyse: Potentiometrie; Elektrogravimetrie; Konduktometrie</li> <li>– Projektarbeit zur Analyse Technischer Produkte oder Verfahren der instrumentellen Analyse</li> <li>– Beurteilung und Validierung der erzielten Analysenergebnisse</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b> <i>Praktikum</i>					
<b>Prüfungsformen</b> <i>Sicherheits- und Eingangskolloquien vor den Versuchen, Überprüfung der Ergebnisse der Analysen sowie Versuchsprotokolle.</i>					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> <i>Erfolgreiche Anfertigung von schriftlichen Analysenprotokollen und die Durchführung einer Projektarbeit.</i>					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>					

nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> A. Rosenhahn, W. Schuhmann, K. Tschulik
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Mathematik für Chemiker</b>					
Modul-Nr. 4	Credits 6 CP	Workload 180 h	Semester 1. Sem.	Turnus WS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung Mathematik für Chemiker b) Übung Mathematik für Chemiker			<b>Kontaktzeit</b> a) 3 SWS/ 45h b) 2 SWS/ 30h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> a) ca. 200 Stud. b) je 25 Stud.
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• kennen Studierende für den Studiengang Chemie bzw. Biochemie grundlegende anwendungsrelevante Konzepte und Methoden der Mathematik, insb. der Analysis und Statistik.</li> <li>• beherrschen Studierende relevante Rechentechniken sowie eine logische und strukturierte Herangehensweise an komplexe Problemstellungen.</li> <li>• können Studierende Anwendungen der Mathematik in der Chemie bzw. Biochemie nachzuvollziehen und auf ähnliche Anwendungskontexte übertragen.</li> <li>• können Studierende mit grundlegenden anwendungsrelevanten mathematischen Konzepten sowie mathematischen Modellvorstellungen für das naturwissenschaftliche Arbeiten umgehen.</li> <li>• können Studierende logisch und mit einem angemessenen Maß an Abstraktion eigenständig aber auch in Teams mathematisch präzise an Problemlösungen arbeiten.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Grundlagen zur Mengenlehre, Zahlensystemen (inkl. komplexer Zahlen) sowie Abbildungen</li> <li>2. Spezielle Funktionen (trigonometrische Funktionen, Exponentialfunktion, Logarithmus)</li> <li>3. Folgen und Reihen (inkl. Potenzreihen) und Konvergenzuntersuchungen</li> <li>4. Stetigkeit von Funktionen sowie Grenzwertuntersuchungen</li> <li>5. Differentialrechnung (Ableitungen, totales Differential, Taylorreihen)</li> <li>6. Integralrechnung (Integrationsregeln, bestimmte und uneigentliche Integrale, Fourierreihen)</li> <li>7. Gewöhnliche Differentialgleichungen (nur der homogene lineare Fall in beliebiger Ordnung)</li> <li>8. Grundlagen der deskriptiven Statistik (Lage- und Streumaße, Korrelation)</li> <li>9. Grundlegende Begriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung</li> <li>10. Diskrete und kontinuierliche Verteilungen</li> <li>11. Symmetrische Konfidenzintervalle und Regressionsrechnung</li> <li>12. Das Gauß'sche Fehlerfortpflanzungsgesetz und Zentraler Grenzwertsatz</li> <li>13. Einblick in das Testen von Hypothesen</li> </ol>					
<b>Lehrformen</b> <i>Vorlesung, seminaristischer Unterricht, Gruppenarbeiten,</i>					
<b>Prüfungsformen</b>					

Klausur; Es ist der Erwerb von Bonuspunkten in drei vorlesungsbegleitenden Miniklausuren möglich.
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestandene Modulklausur
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen) Studiengang BSc Chemie , Studiengang BSc Biochemie
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> E. Glasmachers
<b>Sonstige Informationen</b> Die Veranstaltung wird von einem Moodle-Kurs mit Material zur Vorlesung und den Übungen begleitet

<b>Anwendung Mathematischer Verfahren in der Chemie (Mathematik II)</b>					
Modul-Nr. 5	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 2. Sem.	Turnus Jedes SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 28 h b) 1 SWS / 14 h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> Ca.100-150 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <b>Zielsetzung:</b> Die Teilnehmer sollen in die Lage versetzt werden, mathematische Methoden aus dem Bereich der Algebra und der Operator- und Variationsrechnung zur Lösung von Problemen in der Theoretischen und Physikalischen Chemie anzuwenden. <b>Kompetenzen:</b> In dieser Vorlesung vertiefen die Teilnehmer die in der Erstsemestervorlesung erarbeiteten mathematischen Methoden der Chemie und erweitern diese im Hinblick auf die Vorlesungen der Physikalischen und der Theoretischen Chemie in den folgenden Semestern. Durch konkrete Anwendungsbeispiele wird ein Praxisbezug hergestellt, und die Einsatzmöglichkeiten von Computern zur Lösung typischer Aufgabenstellungen werden erläutert und durch geeignete Experimente ergänzt.					
<b>Inhalt</b> 1. Anwendungen der Vektor- und Matrixrechnung: Vektorraum, Skalarprodukt und Norm, lineare (Un)Abhängigkeit, Basisvektoren, Matrizen als Abbildungen von Vektoren, Rechenregeln der Matrixrechnung (Hintereinanderausführung/Verkettung, Inverses, Transponierung), spezielle Matrizen (z.B. unitär, selbstadjungiert) und Determinanten zur Beschreibung von z.B. optischen Strahlengängen, Molekülstrukturen, Phasenraumtrajektorien. Einsatz von modernen Rechenmethoden in der Chemie (z.B. Rechnen mit sehr großen Matrizen) 2. Anwendungen des Rechnens mit Funktionen: Abbildungen von Funktionen (z.B. zur Beschreibung von Symmetrioperationen) und deren Rechenregeln (Hintereinanderausführung, Inverses, Kommutatoren z.B. Heisenbergsche Vertauschungsrelation), Funktionenräume, Vollständigkeitsrelation, Hilberträume, Darstellung von Funktionen und funktionswertigen Abbildungen mit Hilfe einer Basis, Entwicklung mit Gaussfunktionen oder ebenen Wellen als Basis in der Quantenchemie. Fourierentwicklung und -analyse (z.B. in der Molekülspektroskopie). Darstellungstheorie für Punktgruppen. Erste Demonstrationen von Einsatzmöglichkeiten der Computerchemie 3. Systeme von linearen (Differential-)Gleichungen: homogene und inhomogene lineare Gleichungssysteme, Matrixform, Lösbarkeit und Lösungsverfahren, Systeme von homogenen Differentialgleichungen und Anwendungen in der Physikalischen Chemie und der Theoretischen Chemie, z. B. in der Kinetik (Reaktionen erster Ordnung, Michaelis-Menten Kinetik) und der Beschreibung von Molekülschwingungen (Infrarotspektroskopie)					

<p>4. Grundbegriffe der Variationsrechnung: Bestimmung und Charakterisierung von Extremstellen, Funktionen mehrerer Variablen, Gradienten, Hesse-Matrix, Optimierungen mit Randbedingungen (Methode der Lagrange-Multiplikatoren, z.B. in der Molekulardynamik), Zusammenhang mit Fehlerrechnung und Anpassen („Fitten“) von Funktionen.</p> <p>5. Matrix- und Operator-Eigenwertprobleme: Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren von Matrizen, Anwendungen von Matrixeigenwertproblemen in der Molekülorbital-Theorie (z.B. Hückel-Modell) und zur Berechnung von Molekülschwingungen (z.B. Normalmodenanalyse in der IR-Spektroskopie), Operator-Eigenwertproblem am Beispiel einfacher quantenmechanischer Modellprobleme (z.B. Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator)</p>
<p><b>Lehrformen</b></p> <p>a) Vorlesung (2 SWS)</p> <p>b) Übungen (1 SWS)</p>
<p><b>Prüfungsformen</b></p> <p>Klausur</p>
<p><b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b></p> <p>Bestandene Modulklausur</p>
<p><b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b></p> <p>Modul kann CP-relevant in den Studiengang B.Sc. Biochemie integriert werden (als Zusatzfach „Chemie“)</p>
<p><b>Stellenwert der Note für die Endnote</b></p> <p>Nach CP gewichtet</p>
<p><b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b></p> <p>L. Schäfer, C. Hättig</p>
<p><b>Sonstige Informationen</b></p> <p>Modul kann CP-relevant in den Studiengang B.Sc. Biochemie integriert werden (als Zusatzfach „Chemie“)</p>

<b>Grundlagen der Physik I</b>					
Modul-Nr. 6	Credits 6 CP	Workload 180 h	Semester 1. u. 2. Sem.	Turnus jährlich	Dauer 2 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b>			<b>Kontaktzeit</b>	<b>Selbststudium</b>	<b>Gruppengröße</b>
<p>a) Vorlesung Physik I</p> <p>b) Physikalisches Grundpraktikum</p>			<p>a) 5 SWS/ 40 h</p> <p>b) 2 SWS/ 30h</p>	<p>a) 80 h</p> <p>b) 30 h</p>	<p>a) ca. 200 Stud.</p> <p>b) je 25 Stud.</p>
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>					
<p>Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• kennen Studierende die Grundprinzipien der klassischen Physik durch Vortrag und durch Vorführung von Experimenten.</li> <li>• verstehen Studierende grundlegende physikalische Fragestellungen.</li> <li>• können Studierende einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten erarbeiten.</li> <li>• kennen und erfassen Studierende Phänomene und Vorgänge in der Natur an ausgewählten Versuchsaufbauten der Experimentalphysik.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b>					
<p><b>Grundeinheiten der Physik:</b> Grundeinheiten (Basiseinheiten) = SI-Einheiten, Festlegung der Grundeinheiten, Kennzeichnung der Zehnerpotenzen, Messungen und Messfehler, Kurvenanpassung</p> <p><b>Mechanik. Kinematik des Massenpunktes:</b> Geradlinige Bewegung eines Massenpunktes, Räumliche, nicht geradlinige Bewegung eines Massenpunktes, Gleichförmige Kreisbewegung,</p>					

<p><b>Dynamik des Massenpunktes:</b> Kraft, Newtonschen Axiome, Kräftegleichgewichte, Arbeit, Leistung, Energie, Impuls und Impuls-Erhaltungssatz, Drehmoment, Drehimpuls, Drehimpuls Erhaltungssatz, der starre Körper,</p> <p><b>Der feste deformierbare Körper (Elastizität):</b> Aufbau eines idealen Festkörpers, Zug, Druck, Schub, das Hookesche Gesetz, plastische Verformung,</p> <p><b>Statik von Flüssigkeiten und Gasen:</b> Grenzflächen von Flüssigkeiten, Hydrostatik, Statik der Gase, strömende Flüssigkeiten (und Gase), Kontinuitätsgleichung, Bernoullische Gleichung, innere Reibung einer Flüssigkeit, laminare und turbulente Strömung.</p> <p><b>Schwingungen und Wellen. Schwingungen:</b> Freie ungedämpfte harmonische Schwingung, freie gedämpfte (harmonische) Schwingung, erzwungene Schwingungen,</p> <p><b>Wellen:</b> Allgemeine Eigenschaften und Klassifizierung, Mathematische Beschreibung einer eindimensionalen harmonischen Welle, Reflexion von Wellen, stehende Wellen, Schwebung, Doppler-Effekt, Akustik (Lehre von Schallwellen in Gasen)</p> <p><b>Pflichtveranstaltung:</b> Einführungsseminar „Bestimmung von Momentangeschwindigkeiten“ oder „Radioaktiver Zerfall einer kurzlebigen Quelle“ und Strahlenschutzunterweisung.</p> <p><b>Praktikum Teil I:</b> Ausgewählte klassische Experimente aus dem Bereich der Experimentalphysik.</p> <p><b>Praktikum Teil II:</b> Ausgewählte Versuche aus dem Bereich der Elektrizitätslehre.</p>
<p><b>Lehrformen</b> Vorlesung, seminaristischer Unterricht, Gruppenarbeiten</p>
<p><b>Prüfungsformen</b> a) Bestandene Modulklausur b) Schriftliche Vorbereitung von Versuchen, mündliche Eingangsbefragung, Durchführung und Auswertung der Experimente, Anfertigen von Versuchsprotokollen.</p>
<p><b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> c) Bestandene Modulklausur d) 8 testierte Versuche im Physikalischen Praktikum</p>
<p><b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Studiengang BSc Chemie , Studiengang BSc Biochemie</p>
<p><b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet</p>
<p><b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> F.H. Heinsius, D. Meyer</p>
<p><b>Sonstige Informationen</b></p>

<b>Grundlagen der Physik II</b>					
Modul-Nr. 7	Credits 6 CP	Workload 160 h	Semester 2. Sem.	Turnus SoS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung Physik II b) Übung Physik II			<b>Kontaktzeit</b> a) 4 SWS/ 56 h b) 1 SWS/ 14 h	<b>Selbststudium</b> 90 h	<b>Gruppengröße</b> ca. 200 Stud.
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Vorkenntnisse Mathematik aus der Oberstufe und mathematische Vorkurse, Vorlesung Physik I					

**Lernziele (learning outcomes)**

Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls

- kennen Studierende die Grundprinzipien der klassischen Physik durch Vortrag und durch Vorführung von Experimenten und kurze Einführung in die Quantenphysik.
- verstehen Studierende grundlegende physikalische Fragestellungen.
- können Studierende einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten erarbeiten.

**Inhalt**

**Elektrizitätslehre:** Elektrische Ladung, Elektrische Feldlinien, elektrisches Feld, Spannung, Kapazität eines Kondensators, elektrischer Strom, Stromstärke und Wirkungen, der elektrische Widerstand, Ohmsches Gesetz, Stromkreise, Kirchhoff'sche Gesetze, Arbeit und Leistung des elektrischen Stroms, Messungen von I, U, R,

**Magnetisches Feld und Induktion:** Die magnetische Kraft, magnetisches Feld, Kräfte im Magnetfeld, Magnetische Induktion, Energiegehalt des magnetischen und elektrischen Feldes, Materie im elektrischen und magnetischen Feld, die Maxwell'schen Gleichungen, Zeitabhängige Ströme und Spannungen, der Wechselstromgenerator, Wechselstromwiderstände, der Transformator,

**Ein- und Ausschaltvorgänge:** Schwingkreis,

**Mechanismen der elektrischen Leitung:** elektrische Leitungen in Flüssigkeiten, elektrische Leitung in Metallen, elektrische Leitung in Halbleitern, Leitende Kunststoffe, Elektrizitätsleitung im Vakuum,

**Elektromagnetische Wellen:** Analogiebetrachtung von mechanischen und elektromagnetischen Wellenerscheinungen, Elektromagnetische Wellen,

**Optik:** Natur des sichtbaren Lichtes,

**Stahlenoptik (Geometrische Optik):** Strahlen und Wellenfronten, Reflexion von ebenen Wellen, Brechung von ebenen Wellen, Optische Abbildungen,

**Wellenoptik:** Interferenz, Kohärenzbedingung, Interferenz nach Reflexion und Brechung, Interferenz nach Beugung, Polarisation von Lichtwellen, der Laser,

**Quantenphysik:** Eindimensionale Schrödingergleichung, Pauliprinzip

**Lehrformen**

Vorlesung, seminaristischer Unterricht

**Prüfungsformen**

Klausur

**Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten**

Bestandene Modulklausur

**Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)**

Studiengang BSc Chemie , Studiengang BSc Biochemie

**Stellenwert der Note für die Endnote**

Nach CP gewichtet

**Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende**

F.H. Heinsius

**Sonstige Informationen**

<b>Grundlagen der Anorganischen Chemie I</b>					
Modul-Nr. 8	Credits 11 CP	Workload 330 h	Semester 2. Sem.	Turnus nur SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Anorganische Chemie I b) Anorganisch-chemisches Grundpraktikum			<b>Kontaktzeit</b> a) 45 h b) 80 h	<b>Selbststudium</b> a) 75 h b) 130 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 120
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> a) Keine b) Klausur zur Vorlesung Allgemeine Chemie und Einführungspraktikum Allgemeine Chemie					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls  a) verfügen die Studierenden über grundlegende Kenntnisse <ul style="list-style-type: none"> <li>• der Stoffchemie und labor- und großtechnische Darstellungsverfahren anorganischer Hauptgruppenverbindungen.</li> <li>• von Symmetrie und qualitativer Bindungstheorie.</li> <li>• der Tendenzen von Struktur und Reaktivität in den Hauptgruppen des Periodensystems der Elemente.</li> </ul> b) können die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> <li>• praktische chemische Arbeiten im Bereich der Anorganischen Synthesechemie selbständig durchführen und die hergestellten Präparate mittels klassischer und moderner Analysemethoden untersuchen</li> <li>• die erlernten Kenntnisse der apparativen und handwerklichen Grundlagen mit dem vertieften theoretischen Wissen zu verbinden und auf neue anorganische Synthesen anwenden</li> <li>• konkrete Kenntnisse über den Umgang mit Gefahrstoffen anwenden</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> a) Die Vorlesung fokussiert sich auf die Chemie anorganischer Verbindungen mit dem Schwerpunkt Hauptgruppen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Tendenzen im Periodensystem</li> <li>• Darstellung und Vorkommen der Elemente</li> <li>• Großtechnische Prozesse</li> <li>• Grundlagen und Grenzen von Modellkonzepten</li> <li>• Clusterverbindungen</li> <li>• Symmetrie und Gruppentheorie</li> <li>• Element-Wasserstoffverbindungen von elektronenarm bis elektronenreich</li> <li>• Element-Halogen, Element-Sauerstoff- und Elementkohlenstoffverbindungen</li> <li>• Extreme Bindungssituationen wie Edelgasverbindungen</li> </ul> b) Das Praktikum fokussiert sich auf praktische Arbeiten mit den Schwerpunkten <ul style="list-style-type: none"> <li>• Chemie der Haupt- und Nebengruppenelemente</li> <li>• Komplexe Salze im wässrigen Medium</li> <li>• Synthesen in nichtwässrigen Lösungsmitteln</li> </ul>					

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlagen der Festkörperchemie von kristallinen Verbindungen und intermetallischen Phasen</li> <li>• Nebengruppenelemente in verschiedenen Oxidationsstufen</li> <li>• Analytische und spektroskopische Methoden zur Substanzcharakterisierung: Refraktometrie, Polarometrie, IR-/Ramanspektroskopie, Lumineszenzspektroskopie, Röntgenpulverdiffraktometrie</li> </ul>
<b>Lehrformen</b> a) Vorlesung mit Übungen und begleitendem e-learning Modul b) Praktikum mit begleitenden Seminaren und begleitendem e-learning
<b>Prüfungsformen</b> a) Klausur (120min.) am Semesterende b) Online-Antestate und mündliche Antestate vor der praktischen Durchführung der Synthesen, Protokolle nach Fertigstellung der 6 Pflichtpräparate sowie einer Auswahl aus mindestens 5 Wahlpräparaten
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> a) Bestehen der Modulklausur b) Bestehen der Antestate vor der präparativen Arbeit (Fragen zur Theorie, Stöchiometrie, Laborsicherheit), erfolgreiche Synthese der zum Bestehen notwendigen Präparate innerhalb der limitierten Praktikumszeit, Vorlage eines testierten Protokolls für jedes Präparat
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Bachelor-Studiengänge der Chemie und Biochemie; Optionalbereich.
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> L. Borchardt, B. Mallick, V. Däschlein-Gessner
<b>Sonstige Informationen</b>

Grundlagen der Anorganischen Chemie II					
Modul-Nr. 9	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 4. Sem.	Turnus Nur SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b>			<b>Kontaktzeit</b>	<b>Selbststudium</b>	<b>Gruppengröße</b>
a) Anorganische Chemie II (V) b) Anorganische Chemie II (Ü)			a) 2 SWS b) 1 SWS	a) 45 h b) 60 h	Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 80 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Keine					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach erfolgreichem Abschluss dieses Moduls besitzen die Studierenden grundlegende Kenntnisse in folgenden Gebieten: - Koordinations-/Komplexchemie - Stoffchemie der Metalle  Sie können: - Bindungszustände beschreiben und - die Reaktivität und Eigenschaften von Übergangsmetall-Komplexen aufgrund derer elektronischen Zustände vorhersagen					
<b>Inhalt</b>					



Koordinationschemie: Historischer Hintergrund, Aufbau einer Komplexverbindung, Metall- und Ligandenklassifizierung, Ligandenfeld-/Kristallfeld-/Molekülorbitaltheorie, Symmetrie, Reaktionen von Komplexverbindungen, Eigenschaften von häufig verwendeten Liganden Metalle: Definition, Eigenschaften von Metallen (chemisch, physikalisch, mechanisch, strukturell)
<b>Lehrformen</b> -seminaristischer Unterricht - Projektarbeiten, - Gruppenarbeiten, - digitale Lehrformate (hybride Vorlesung)
<b>Prüfungsformen</b> - Abgabe von mind. 50% der Übungsaufgaben bis zum jeweils folgenden Seminar - Klausur (120min.) am Semesterende
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Erfolgreiche Abgabe von Übungsaufgabenserien Bestandene Modulabschlussklausur
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Studiengang Biochemie, Zweifach-Bachelor
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> Prof. Metzler-Nolte, Prof. Apfel und Dozentinnen und Dozenten der Anorganischen Chemie
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Organische Chemie I</b>					
Modul-Nr. 10	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 2. Sem.	Turnus nur SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Organische Chemie I			<b>Kontaktzeit</b> 4 SWS / 52 h	<b>Selbststudium</b> 98 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 240
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> keine					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> <li>• kennen Studierende das Basiswissen der Organischen Chemie</li> <li>• verstehen Studierende strukturelle und mechanistische Grundlagen der Organischen Chemie</li> <li>• können Studierende die Reaktivitäten im Bereich von funktionalisierten Alkanen, Alkenen und Alkinen einschätzen</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Struktur und Bindungen organischer Moleküle</li> <li>• Übersicht über funktionelle Gruppen, Stoffklassen und Naturstoffe</li> <li>• Herstellung, Eigenschaften und grundlegende Reaktionen von Alkanen, Halogenalkanen, Alkoholen, Alkenen und Alkinen</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b>					

Inverted Classroom: Videos als Lehrmaterial; im Hörsaal Übungen und zusätzliche Erläuterungen; ergänzendes Tutorium
<b>Prüfungsformen</b> Klausur (120min.) am Semesterende
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur
<b>Verwendung des Moduls</b> Pflichtmodul in den Bachelor-Studiengängen der Chemie und Biochemie; als theoretisches Basiswissen für das Modul Praktische Organische Chemie
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> G. Dyker, F. Schulz
<b>Sonstige Informationen</b> e-learning-Modul, Link: <a href="http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2/dyker/Vorlesungen.html">http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2/dyker/Vorlesungen.html</a>

<b>Organische Chemie II</b>					
Modul-Nr. 11	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 3. Sem.	Turnus nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Organische Chemie II			<b>Kontaktzeit</b> 4 SWS / 52 h	<b>Selbststudium</b> 98 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 200
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> Es wird zuvor der erfolgreiche Abschluss des Moduls Organische Chemie I empfohlen.					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Diese Lehrveranstaltung erweitert das Basiswissen der Studierenden in Organischer Chemie. Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> <li>• verstehen Studierende erweiterte strukturelle und mechanistische Grundlagen der Organischen Chemie.</li> <li>• verstehen Studierende weiterführende organisch-chemische Fragestellungen.</li> <li>• können Studierende fachspezifische Lösungsmöglichkeiten erarbeiten.</li> <li>• können Studierende Reaktivitäten im Bereich von Aromaten, Carbonylverbindungen und Heterocyclen einschätzen.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Chemie der Aromaten; Farbstoffe, Polymere</li> <li>• Eigenschaften, Herstellung und Reaktionen von Carbonylverbindungen</li> <li>• Amine und Heterocyclen</li> <li>• Nachhaltigkeit und Atomökonomie</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b> Inverted Classroom: Videos als Lehrmaterial; im Hörsaal Übungen und zusätzliche Erläuterungen; ergänzendes Tutorium					
<b>Prüfungsformen</b> Klausur (120min.) am Semesterende					

<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen) Pflichtmodul in den Bachelor-Studiengängen der Chemie und Biochemie; als theoretisches Basiswissen für das Modul Praktische Organische Chemie.
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> G. Dyker, F. Schulz
<b>Sonstige Informationen</b> e-learning-Modul, Link: <a href="http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2/dyker/Vorlesungen.html">http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2/dyker/Vorlesungen.html</a>

Organisch-chemisches Grundpraktikum					
Modul-Nr. 12	Credits 11 CP	Workload 330 h	Semester 4. Sem.	Turnus SoS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Praktikum mit Seminar b) Mündliche Abschlussprüfung			<b>Kontaktzeit</b> 18 SWS / 216h	<b>Selbststudium</b> 114 h	<b>Gruppengröße</b> Ca. 140 pro Jahr (96 Praktikums- Plätze semester- begleitend, 44 im Blockpraktikum)
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Der erfolgreiche Abschluss mindestens eines der Module Organische Chemie I oder Organische Chemie II.					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> <li>• kennen Studierende ein apparatives und praktisches Verständnis der Grundoperationen der Organischen Synthese</li> <li>• Studierende erwerben die Fähigkeit, einfache Synthesevorschriften im Bereich der Organischen Chemie praktisch nachzuvollziehen.</li> <li>• Sind die Studierenden vertraut mit den grundlegenden Sicherheitsvorschriften in der Organischen Chemie</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> Organisch-chemische Reaktionen und Verfahren wie Esterbildung, Herstellung von Derivaten organischer Säuren, Elektrophile Aromatische Substitution, Nukleophile Substitution, Additionen, Wittig-Reaktion, Grignard-Reaktionen, Radikalreaktionen, Darstellung von Enaminen, Hydroborierung, Photoreaktionen, Racemattrennung. Organisch-chemische Trennverfahren wie Destillation, Sublimation, Kristallisation und Chromatographie. Einfache analytische Methoden, UV, IR, NMR. Grundlegende Sicherheitsaspekte der organischen Chemie (Betriebsanweisungen, Abfalltrennung, Kennzeichnung von Gefahrstoffen)					
<b>Lehrformen</b> Praktikum					
<b>Prüfungsformen</b> Eingangskolloquium zu jedem der Versuche, zu testierende Abgabe der Präparate, zu testierende Versuchsprotokolle, Abschlusskolloquium					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Erfolgreiches absolvieren der Praktikumsversuche, sowie der mündlichen Abschlussprüfung					
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen)					

Praxis-orientierte Grundlage für das Modul F-Synthesepaktikum Organische Chemie; Pflichtmodul in dem Bachelor-Studiengang der Chemie.
<b>Stellenwert der Note für die Endnote:</b> Unbenotet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> S. Huber (Modulbeauftragter), L. Gooßen, F. Schulz, G. Dyker, C. Merten
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Physikalische Chemie I</b>					
Modul-Nr. 13	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 3. Semester	Turnus WS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Physikalische Chemie I: Thermodynamik			<b>Kontaktzeit</b> 3 SWS, 45 h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> 120 Studierende Übungsgruppen : 30
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Vorkenntnisse in Allgemeiner Chemie.					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Absolventen dieses Moduls erwerben ein grundlegendes Verständnis der Grundlagen der chemischen Thermodynamik und ihrer Anwendungen auf Reinstoffe, Gemische, an Oberflächen und in der Elektrochemie. Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, grundlegende Fragestellungen der physikalischen Chemie zu verstehen und einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten zu erarbeiten.					
<b>Inhalt</b> 1. Grundbegriffe: SI-System, Definition einiger Grundbegriffe, Gasgesetze, Aggregation, mathematische Eigenschaften von Zustandsfunktionen, zwischenmolekulare Wechselwirkungen. 2. Hauptsätze der Thermodynamik: 1. Hauptsatz, 2. Hauptsatz, 3. Hauptsatz, Verknüpfung der Hauptsätze. 3. Anwendungen: Phasengleichgewichte von Reinstoffen, Elektrolytlösungen.					
<b>Lehrformen</b> Vorlesung (2 SWS, 30 h), Übung (1 SWS, 15 h).					
<b>Prüfungsformen</b> Schriftliche Abschlussklausur von 120 min.					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur.					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> B.Sc. Chemie.					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet.					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> M. Havenith-Newen, G. Schwaab.					
<b>Sonstige Informationen</b>					

<b>Physikalische Chemie II</b>
--------------------------------

Modul-Nr. 14	Credits 9 CP	Workload 270 h	Semester 4. Semester	Turnus SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Physikalische Chemie II: Reaktionskinetik und Transport b) Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum			<b>Kontaktzeit</b> a) 3 SWS, 45h b) 8 SWS, 100h	<b>Selbststudium</b> a) 75 h b) 50 h	<b>Gruppengröße</b> 120 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> a) Vorkenntnisse in Allgemeiner Chemie. b) Vorkenntnisse in Mathematik, Physik und Physikalischer Chemie nachgewiesen durch: Mathematik für Chemiker I oder Physikalische Chemie I für Chemiker.					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <b>a) Physikalische Chemie II</b> Zielsetzung: Absolventen dieses Moduls haben Grundkenntnisse zum molekularen Verständnis physikalischer Eigenschaften von Gasen erhalten. Die kinetische Ordnung einer chemischen Reaktion kann ermittelt werden und die Konzentrationsänderungen lassen sich durch Wahl einer geeigneten Geschwindigkeitsgleichung quantitativ beschreiben und analysieren. Es können sinnvolle Rückschlüsse auf den molekularen Mechanismus der Reaktion gezogen werden. Kompetenzen: Die Studierenden können physikalische Eigenschaften von Gasen mit molekularen Größen quantitativ in Beziehung setzen. Sie können die Geschwindigkeit von Reaktionen, d. h. den zeitlichen Verlauf von Konzentrationsänderungen analysieren und hinsichtlich eines zugrundeliegenden Reaktionsmechanismus interpretieren. <b>b) Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum</b> Nach Ende des Praktikums haben Studierende ein apparatives und theoretisches Verständnis grundlegender experimenteller Techniken der Physikalischen Chemie erworben. Sie werden in der Lage sein, die durchgeführten Experimente in schriftlichen Berichten und einem Seminarbeitrag darzustellen. Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, durchgeführte Experimente schriftlichen zu dokumentieren und erzielte Ergebnisse in einem Seminarbeitrag darzustellen.					
<b>Inhalt</b> <b>a) Physikalische Chemie II</b> I. Kinetische Theorie der Gase 1. Molekulares Bild des Gases, Geschwindigkeitsverteilungen und –mittelwerte 2. Mittlere freie Weglänge, Stoßzahlen, Stöße auf Oberflächen II. Transporterscheinungen 3. Viskosität und Wärmeleitfähigkeit von Gasen 4. Diffusion 5. Elektrische Leitfähigkeit in Flüssigkeiten 6. Diffusion III. Chemische Reaktionskinetik 7. Geschwindigkeitsgesetze einfacher chemischer Reaktionen und ihre Integration 8. Reaktionsordnung und Halbwertszeiten 9. Experimentelle Methoden der chemischen Kinetik					

10. Zusammengesetzte Reaktionen (Folge-, Parallel-, Rückreaktionen)
11. Vorgelagerte Gleichgewichte, Quasistationarität
12. Homogene und heterogene Katalyse
13. Radikal- und Kettenreaktionen, Explosionen
14. Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten (Arrhenius)

### **b) Physikalisch-Chemisches Grundpraktikum**

Apparative Methoden: Elektrodentypen, Kalorimeter, Vakuumanlagen, Gasanlagen, Physikalische und Chemische Sensoren, Datenaufnahme per Computer, Laser.

Themengebiete: Phasendiagramm, Kalorimetrie, Elektromotorische Kraft, Elektrolyte, Reibung, Mischungen, Oberflächenspannung, Diffusion, Leitfähigkeit, Ionenbeweglichkeit, Kinetische Funktionen, Strukturbestimmung, Spektroskopie, Fehleranalyse.

Präsentationstechniken: Optimale Gestaltung einer Präsentation.

#### **Lehrformen**

- a) Vorlesung, Übung
- b) Praktikum, Seminar

#### **Prüfungsformen**

- a) Schriftliche Abschlussklausur von 120 min
- b) Schriftliche Berichte, 15-20-minütige Präsentation

#### **Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten**

- a) Bestehen der Klausur
- b) Fachlich korrekte Darstellung der Einzelversuche in schriftlichen Berichten sowie fachlich korrekte Präsentation des zugewiesenen Themas

#### **Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)**

- a) B.Sc. Chemie, Optionalbereich
- b) B.Sc. Chemie, B.Sc. Biochemie, 2-Fach B.Sc. Chemie

#### **Stellenwert der Note für die Endnote**

Nach CP gewichtet

#### **Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende**

Dozenten der Physikalischen Chemie

#### **Sonstige Informationen**

- a) Vorbereitungsmaterialien zum Selbststudium befinden sich im Moodle
- b) Vor jedem Versuch ist ein Sicherheitskolloquium abzulegen. Spezielle Sicherheitsunterweisungen erfolgen z.B. bei Versuchen, in denen Laser eingesetzt werden

<b>Einführung in die Biochemie</b>					
Modul-Nr. 15	Credits 4 CP	Workload 120 h	Semester 4. Sem.	Turnus SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Einführung in die Biochemie (184200)			<b>Kontaktzeit</b> 42 h	<b>Selbststudium</b> 8 h 7	<b>Gruppengröße</b> ca. 200 Stud.
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> keine					
<b>Lernziele</b> Die Vorlesung vermittelt Grundkenntnisse über den molekularen Aufbau lebender Systeme. Es wird ein grundlegendes Verständnis für wichtige Grundbausteine, für die Biochemie wichtige Reaktionen und den Aufbau unterschiedlicher Zellkompartimente entwickelt. Darüber hinaus werden grundlegende Vorstellungen der Funktion von Membran-, Transport- und Motorproteinen, Signalübertragungsketten sowie der hormonellen Koordination größerer Organsysteme erarbeitet. Nach Abschluss der Vorlesung können die Teilnehmer grundlegende biochemische Fragestellungen verstehen und einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten erarbeiten.					
<b>Inhalt</b> Die Vorlesung beschäftigt sich mit den folgenden Themen: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Elemente des Lebens, Wasser als Lösungsmittel und die Regulation des pH-Wertes in Biosystemen</li> <li>• Kohlenstoffverbindungen, funktionelle Gruppen in Biomolekülen und energiereiche Bindungen</li> <li>• Aminosäuren, Peptidbindung und allgemeine Proteinstruktur</li> <li>• Struktur und Funktion von Nukleotiden</li> <li>• Zucker: Energiespeicher und Marker für Proteine</li> <li>• Grundlagen des Stoffwechsels,</li> <li>• Lipidzusammensetzung der Zellmembran, Membranproteine und Verankerung von Proteinen</li> <li>• Transport über Membranen I: Transportproteine und Ionenpumpen</li> <li>• Transport über Membranen II: Struktur und Funktion von K<sup>+</sup>-Kanälen und potenzialaktivierten Ionenkanälen</li> <li>• Zellkompartimente und ihre Funktion</li> <li>• Zytoskelett, Motorproteine und Zellbewegung</li> <li>• Prinzipien der Signaltransduktion am Beispiel der 7-Transmembranrezeptoren</li> <li>• Koordination der Funktion verschiedener Organe durch Hormone</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b> Vorlesung					
<b>Prüfungsformen</b> Klausur					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote:</b> nach CP gewichtet					

<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> a) R. Stoll
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Methoden der Strukturaufklärung</b>					
Modul-Nr. 16	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 5. Sem.	Turnus nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Methoden der Strukturaufklärung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 28 h b) 1 SWS / 14 h	<b>Selbststudium</b> 108 h	<b>Gruppengröße</b> Alle im Fachsemester eingeschriebenen Studierenden, ca. 100
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> Vorkenntnisse in Allgemeiner Chemie					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <b>Zielsetzung:</b> Die Teilnehmer sollen am Ende des Kurses in der Lage sein, selbständig die Struktur unbekannter chemischer Verbindungen anhand Ihrer UV-, IR-, MS- und NMR-Spektren zu bestimmen. Weiterhin sollen theoretische Grundlagen <b>Kompetenzen:</b> Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, die in der eigenständigen Laborarbeit hergestellten Substanzen zu charakterisieren und Strukturen zu verifizieren.					
<b>Inhalte:</b> <b>UV/VIS-Spektroskopie:</b> Messtechnik, Elektronenanregung und Molekülstruktur, Extinktion, Chromophore, $\pi$ - $\pi^*$ und $n$ - $\pi^*$ -Übergänge, UV/VIS-Spektren organischer Substanzklassen. <b>IR-Spektroskopie:</b> Messtechnik (Probenformen, Ablauf der Messung), wichtige theoretische Grundlagen (Oszillatoren, Obertöne, Fermi-Resonanz, Auswahlregeln, etc.), Identifizierung funktioneller Gruppen in komplexen Verbindungen anhand von Gruppenfrequenzen, Isotopeneffekte, Einfluß von Medium und Aggregation auf IR-Spektren; Grundlagen der Raman-Spektroskopie <b>Massenspektrometrie:</b> Aufbau von Massenspektrometern, Ionisations- (EI, FAB, ESI, MALDI) und Detektionstechniken, Charakteristische Zerfallsmuster organischer Verbindungen. <b>NMR-Spektroskopie:</b> <i>Physikalische und messtechnische Grundlagen:</i> Makroskopische Magnetisierung, Vektormodell, Relaxation, Probenbereitung, einfache Pulsprogramme, Fouriertransformation zu 1D- und 2D-NMR-Spektren, Breitbandige und selektive Anregung bzw. Entkopplung; 2D-Spektren - COSY, HMQC. <i>Spektrale Parameter und molekulare Struktur:</i> Chemische Verschiebungen in $^1\text{H}$ - und $^{13}\text{C}$ -NMR Spektren - elektronische Umgebung, Anisotropie, Ringstrom, Lösungsmiteleinfluß und intermolekulare Aggregation, Voraussagen von chemischen Verschiebungen durch Inkrementsysteme und empirische Programme; Strukturabhängigkeit skalarer Kopplungen (Karplus-Gleichung), dipolare Kopplung und Populationstransfer, NMR-Spektren von Heterokernen - $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{29}\text{Si}$ , exemplarisch Übergangsmetalle (z.B. Pt) und Kerne mit Quadrupolmomenten; Homonukleare und heteronukleare Spinsysteme <b>Kombination von spektroskopischen Techniken und chemischem Wissen zur Strukturaufklärung unbekannter Stoffe:</b> Welche Technik für welche Fragestellung? Welche spektrale Information ist hinreichend für die Identifizierung einer Struktureigenschaft - welche Daten sind nur Hinweise. Einsatz von Spektrendatenbanken (Praxis am PC). Problemlösungen in den Übungen.					
<b>Lehrformen</b> a) Vorlesung; b) Übung					
<b>Prüfungsformen</b> Klausur (120min.) am Semesterende					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b>					



Bestandene Modulklausur
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen) Bachelor-Studiengänge der Chemie und Biochemie; Optionalbereich.
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> C. Merten
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Grundlagen der Technischen Chemie</b>					
Modul-Nr. 17	Credits 4 CP	Workload 120 h	Semester 4. Sem.	Turnus nur SoSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Grundlagen der Technischen Chemie, Vorlesung mit Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 28 h b) 1 SWS / 14 h	<b>Selbststudium</b> 75 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Grundkenntnisse in Allgemeiner, Anorganischer, Organischer und Physikalischer Chemie					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <u>Zielsetzung:</u> Nach Abschluss dieses Moduls sollen die Studierenden ein grundlegendes Verständnis der wichtigsten Problemstellungen der Technischen Chemie haben, die wichtigsten Stoff- und Energieverbände der Chemiewirtschaft kennen und einfache Aufgaben zur Bilanzierung von chemischen Verfahren, zur Umsatzberechnung bei idealen Reaktoren, zur Beschreibung von Wärme- und Stoffübergang sowie zur Wirtschaftlichkeitsbeurteilung lösen können. <u>Kompetenzen:</u> Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, grundlegende Fragestellungen der industriellen Praxis der Chemie zu verstehen, Entwicklungstendenzen zu erkennen und einfache Probleme zu formalisieren bzw. quantitativ zu erfassen.					
<b>Inhalt</b> 1. Verfahren und Stoffverbund: Beziehungen zwischen Einzelverfahren und Stoffverbund, Rohstoffe/typische Produkte der chemischen Industrie und ihre Eigenschaften/Qualitätsmerkmale, Zwischenproduktebenen zwischen Rohstoff und Produkt 2. Allgemeine chemische Technologie: ökonomische Aspekte, Energie- und Rohstoffsituation, Sicherheits- und Umweltaspekte (Strategien im Umgang mit Abprodukten, mit toxischen, brennbaren, explosiven Stoffen), Wassermanagement 3. Reaktoren: kontinuierliche, diskontinuierliche Reaktionsführung, Reaktorgestaltung in Abhängigkeit vom Phasenbestand, von der Wärmetönung, von der Desaktivierungsgeschwindigkeit des Katalysators; ideale Reaktoren: Bilanzierung, Verweilzeitfunktion, Umsatzberechnung 4. Thermische Trennverfahren: Rektifikation, Absorption, Extraktion, Adsorption, Kristallisation – zugrunde liegende Gleichgewichte und apparative Realisierung 5. Mechanische Aufschluss- und Trennverfahren (Brechen, Mahlen, Sedimentieren, Zentrifugieren, Zyklon, Filter, Flotation), elektrostatische und magnetische Verfahren (Elektrofilter, elektrostatisches, magnetisches) Scheiden 6. Energiemanagement: Grundlagen der Wärmeübertragung (Triebkräfte, Mechanismen), Wärmetauscher, Verdampfer, Öfen, Kälteerzeugung 7. Stoffaustausch: Triebkraft, Mechanismen; Stoffaustausch über Phasengrenzflächen, Rolle der Austauschfläche und der Turbulenz, Stoffaustausch in Trenn- und Reaktionsapparaten 8. Grundformen der Förderaggregate/Kompressoren 9. Technische Katalyse: Grundbegriffe, Grundformen; Elementarschritte der heterogenen Katalyse, Kopplung Reaktion-Stofftransport (qualitativ), Einsatzbereiche der heterogenen, homogenen, Biokatalyse 10. Wichtige Prozessstränge der chemischen Industrie: 1. Synthesegaserzeugung (Basis Erdgas), -aufbereitung, -verwendung, Technologie exothermer Gleichgewichtsreaktionen am Beispiel Ammoniaksynthese;					

2. vom Erdöl zum Kraftstoff: Übersicht über Raffinerieprozesse; 3. vom Erdöl zum Kunststoff: Monomerproduktion (Steam Cracker, Aufbau von Monomerstrukturen), Polymer-aufbaureaktionen, Polymerisationsverfahren, Massenpolymere; 4. Schwefelsäure und Kreislaufwirtschaft; 5. Funktionalisierung von Kohlenwasserstoffen (über Sauerstoff, über Chlor, über Stickstoff); 6. technische Elektrochemie.
<b>Lehrformen</b> a) Vorlesung; b) Übung
<b>Prüfungsformen</b> Klausur
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Bachelor-Studiengang Chemie; 2-Fach Studiengang Bachelor of Arts; Master of Education
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> B. Mei, M. Muhler
<b>Sonstige Informationen</b> Vorlesungsmaterialien werden über moodle-Kurse publiziert

Theorie der Chemischen Bindung					
Modul-Nr. 18	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 3. Sem.	Turnus Jedes WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 28 h b) 1 SWS / 14 h	<b>Selbststudium</b> 75 h	<b>Gruppengröße</b> Ca.200 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <u>Zielsetzung:</u> Die Teilnehmer sollen Grundkenntnisse in der quantenchemischen Beschreibung der chemischen Bindung, der MO-Theorie und der klassischen Molekulardynamik erlangen. <u>Kompetenzen:</u> Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, die Natur der chemischen Bindung grundlegend zu verstehen und selbstständig auf (einfache) Moleküle mit unterschiedlichen Elektronenkonfigurationen anzuwenden. Die vermittelten Grundideen der Molekulardynamik erlauben es, Möglichkeiten und Beschränkungen dieser Methode grob zu beurteilen. Damit erwerben sie die nötigen theoretischen Grundkompetenzen für weiterführende Lehrveranstaltungen.					
<b>Inhalt</b> 1. Quantenmechanische Grundlagen (Welle-Teilchen-Dualismus, Wellenfunktionen, Operatoren, Unschärferelation, Schrödingergleichung, Erwartungswerte, Eigenwerte) 2. Quantenmechanische Behandlung von Einteilchensystemen (Teilchen im Kasten, Tunneleffekt, harmonischer Oszillator, H-Atom, Atomorbitale, Knotenregel, Quantenzahlen) 3. Allgemeine Konzepte bei der Beschreibung der Eigenschaften mehratomiger Moleküle (Born-Oppenheimer-Näherung, Potentialflächen, topologische Charakterisierung (Gleichgewichtstrukturen, Übergangszustände, Intermediate, Isomere), Schwingungsspektren (harmonische Analyse, Normalmoden), Kraftfeldapproximation) 4. Grundkonzepte der Molekulardynamik mit Kraftfeldern (Newtonsche Mechanik, Integratoren, Randbedingungen, Valenzkraftfelder, Berechnung klassischer Observable) 5. Molekülorbitale zweiatomiger Moleküle (LCAO-Ansatz für $H_2^+$ und $H_2$ , Molekülorbitale für homo- und heteronukleare zweiatomige Moleküle, MO-Diagramme, kanonische und lokalisierte MOs, Hückel-Theorie) 6. Mehrelektronensysteme (Pauli-Prinzip, Spin, Aufbauprinzip, Elektronenkonfiguration, Notation, Grundideen von Hartree-Fock Theorie und Kohn-Sham Dichtefunktionaltheorie)					

7. Chemische Bindung in kleinen mehratomigen Molekülen (Hybridisierung, Lokalisierung von Bindungen, Lewis Strukturen, Mehrzentrenbindungen)
<b>Lehrformen</b> c) Vorlesung (2 SWS) d) Übungen analytisch („Papier und Bleistift“) mit Präsentation der Ergebnisse und deren Diskussionen in Kleingruppen bzw. digital („hands-on“) im Computerlabor (1 SWS bzw. Blockkurs)
<b>Prüfungsformen</b> Klausur
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestandene Modulklausur
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> Modul kann CP-relevant in den Studiengang B.Sc. Biochemie integriert werden (als Zusatzfach „Chemie“)
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> D. Marx, C. Hättig
<b>Sonstige Informationen</b> Modul kann CP-relevant in den Studiengang B.Sc. Biochemie integriert werden (als Zusatzfach „Chemie“)

<b>Anorganische Chemie III</b>					
Modul-Nr. 19	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 5. Sem.	Turnus nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> Anorganische Chemie III a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> c) 2SWS/30 h d) 1 SWS/15 h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 70
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> Keine					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls verfügen die Studierenden über grundlegende Kenntnisse über                             <ul style="list-style-type: none"> <li>ausgewählte und allgemeine Konzepte der fortgeschrittenen Anorganischen Molekülchemie.</li> <li>unterschiedliche Stoffklassen der element- und metallorganischen Chemie</li> <li>Tendenzen von Struktur und Reaktivität in den Haupt- und Nebengruppen des Periodensystems der Elemente</li> <li>Fachgebiets-übergreifende Anwendungen der Verbindungen</li> <li>Symmetrie und Bindungstheorien.</li> </ul> </li> <li>Darüber hinaus sind die Studierenden in der Lage, ihre Kenntnisse selbständig zur Analyse und Bearbeitung intellektuell anspruchsvoller Fragestellungen in der modernen anorganischen Molekülchemie einzusetzen und zum Lösen von Problemen anzuwenden.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> Die Vorlesung fokussiert sich auf die Chemie der metall- und elementorganischen Verbindungen <ul style="list-style-type: none"> <li>Tendenzen im Periodensystem</li> <li>Organyle der s-, p- und d-block Elemente</li> </ul>					

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bindungstheoretische Betrachtungen der Verbindungen</li> <li>• Darstellung, Strukturen, Eigenschaften und Reaktivitäten</li> <li>• Spektroskopische Methoden zur Aufklärung von Strukturen und Bindungssituationen</li> <li>• Anwendungen der Verbindungen in der Materialchemie und Katalyse</li> <li>• Aktuelle Entwicklungen wie niedervalente Hauptgruppen-Verbindungen und Aktivierung kleiner Moleküle</li> </ul>
<b>Lehrformen</b> Vorlesung mit Übungen und begleitendem e-learning Modul
<b>Prüfungsformen</b> Klausur (bis zu 120min.) am Semesterende
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Modulklausur
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen) -
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> V. Däschlein-Gessner N. Metzler-Nolte und Dozenten der Anorganischen Chemie
<b>Sonstige Informationen</b>

Organische Chemie III					
Modul-Nr. 20	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 5. Sem.	Turnus Nur WS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS / 28 h b) 1 SWS / 14 h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 200
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Vorkenntnisse in Organischer Chemie					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <b>Zielsetzung:</b> Dieses Modul soll den Studierenden moderne Methoden der Organischen Synthese vermitteln. Absolventen haben ein vertieftes Verständnis auf dem Gebiet der Carbokationen-, Radikal- und Carbenchemie sowie auf den Gebieten Carbanionen, Stereochemische Konzepte und Enolate <b>Kompetenzen:</b> Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, Literatur zu den Themen Carbokationen, Radikale und Carbene, Carbanionen, Stereochemische Konzepte und Enolate fachlich einzuordnen.					
<b>Inhalt</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Carbokationen (Thermochemie, Umlagerungsreaktionen, Nucleophile Substitution)</li> <li>2. Radikale und Radikalreaktionen (Darstellung von Radikalen, ESR-Spektroskopie, Thermochemie, Radikalreaktionen)</li> <li>3. Diradikale und Carbene (Erzeugung von Carbenen, Carbenreaktionen)</li> <li>4. Chemie der Carbanionen ( Struktur und Reaktivität von Carbanionen, Basizität, Nukleophilie)</li> <li>5. Stereochemische Konzepte (Prochiralität, Stereo- und Regioselektivität, Diastereo- und Enantioselektivität, thermodynamische und kinetische Kontrolle)</li> <li>6. Enolate (Aldolreaktion, Allylierungen, C-C Verknüpfungen über Ylide, enantioselektive Katalyse).</li> </ol>					
<b>Lehrformen</b> Vorlesung, Übungen					
<b>Prüfungsformen</b>					

120-minütige Klausur
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Bestehen der Klausur
<b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen) BSc. Biochemie, BSc. Chemie
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> S. Huber, L. Gooßen
<b>Sonstige Informationen</b> Vorbereitungsmaterialien zum Selbststudium und Übungsaufgaben befinden sich auf dem Blackboard

<b>Chemikalienrecht – Toxikologie - Ethik</b>					
Modul-Nr. 21	Credits 5 CP	Workload 120 h	Semester 1. Sem.	Turnus Nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung b) Übung			<b>Kontaktzeit</b> a) 2 SWS b) 2 SWS	<b>Selbststudium</b> 75 h	<b>Gruppengröße</b> Sämtliche im Fachsemester eingeschriebene Studierende, ca. 150 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Keine					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <u>Zielsetzung:</u> Gegenstand der Vorlesung ist die Vermittlung von toxikologischen Grundlagen, eine Einführung in das Gefahrstoffrecht und basierend auf der Empfehlung der Studienkommission der GDCh von 2015, eine Diskussion über ethische Fragen in der Chemie. Ein weiterer Fokus liegt hierbei auf die jüngsten Änderungen im Chemikalienrecht wie REACH, der Chemikalienverbotsverordnung und der Gefahrstoffverordnung. <u>Kompetenzen:</u> Nach Ende dieses Moduls soll der/die Student/Studentin die Prüfung zur eingeschränkten Sachkunde für das Inverkehrbringen von gefährlichen Stoffen und Zubereitungen gemäß § 5 der Chemikalien-Verbotsverordnung ablegen. Das theoretische Verständnis wird vertieft durch praktische Fallbeispiele					
<b>Inhalte:</b> Grundlagen Toxikologie; Wirkungen auf die Umwelt Grundkenntnisse der Gefahrstoffkunde: Physikalische und chemische Eigenschaften; Einstufungen von Gefahrstoffen nach GHS und CLP Grenzwerte, Genese, Anwendbarkeit, Sinnhaftigkeit Rechtsordnung, Chemikaliengesetz: Grundzüge, Aufbau des Gesetzes Gefahrstoffverordnung: Grundzüge, Aufbau der Verordnung, Begriffe, Gefährlichkeitsmerkmale Chemikalien-Verbotsverordnung: Verbote, Erlaubnis- und Anzeigepflichten, Sachkunde REACH, die europäische Chemikalienverordnung Grundkenntnisse sonstiger verwandter Rechtsnormen Verwaltungs-, Straf- und Ordnungswidrigkeiteneinrecht gemäß ChemVV, GefahrstoffV Informationen zur Gefahrenabwehr: Sicherheitskonzepte Ethische Fragen in der Chemie					

Als Vorbereitung für die Prüfung der eingeschränkten Sachkunde nach § 11  
Chemikalienverbotsverordnung :

Prüfungsinhalte von Anhang I und II der Bekanntmachung, Hinweise und Empfehlungen zum  
Sachkundenachweis gemäß § 11 der Chemikalien-Verbotsverordnung vom 17. Mai 2018

Anhang I: Grundlagen

1. Grundlagen des europäischen und deutschen Chemikalienrechts (REACH-Verordnung (EG) Nr. 1907/2006, CLP-Verordnung (EG) Nr. 1272/2008, Biozidprodukte-Verordnung (EU) Nr. 528/2012, ChemG)
2. Chemikalien-Verbotsverordnung
3. Gefahrstoffverordnung
4. Grundkenntnisse sonstiger verwandter Rechtsnormen auf nationaler und EU-Ebene
5. Grundbegriffe der Gefahrstoffkunde und mit der Verwendung verbundene Gefahren
6. Informationen zur Gefahrenabwehr und Erste Hilfe
7. Straf- und Ordnungswidrigkeitenrecht

Anhang II: Abgabe und Bereitstellung von Stoffen und Gemischen nach Anlage 2 der  
ChemVerbotsV,  
die nicht Biozidprodukte bzw. Pflanzenschutzmittel sind

1. Physikalische und chemische Eigenschaften
2. Grundkenntnisse der Toxikologie
3. Wirkungen gefährlicher Stoffe auf die Umwelt
4. Spezielle Eigenschaften wichtiger Stoffgruppen
5. Möglichkeiten der Gefahrenabwehr
6. Kenntnisse der REACH-Verordnung (EG) Nr. 1907/2006
7. Kenntnisse zur CLP-Verordnung (EG) Nr. 1272/2008
8. Kenntnisse der TRGS

#### **Lehrformen**

a) Vorlesung, eLearning, Übungen,

#### **Prüfungsformen**

Klausur

#### **Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten**

Bestehen der Klausur

#### **Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)**

Biochemie, 2-Fach Bachelorstudiengänge mit Chemie als einem Fach, das Modul kann in  
anderen Studiengängen angeboten werden.

#### **Stellenwert der Note für die Endnote**

Gewichtet nach CP

#### **Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende**

Dr. Klaus Merz

#### **Sonstige Informationen**

Vorbereitungsmaterialien befinden sich im dazugehörigen Moodlekurs

<b>F-Synthesepraktikum in Anorganischer Chemie</b>					
Modul-Nr. 22	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 5. Sem.	Turnus Nur WiSe	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) F-Synthesepraktikum in Anorganischer Chemie			<b>Kontaktzeit</b> 130 SWS	<b>Selbststudium</b> 20 h	<b>Gruppengröße</b> Max. 40 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> <i>Bestandenes anorganisch-chemisches Grundpraktikum und Organisch-chemisches Grundpraktikum</i>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>  Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> <li>• können Studierende mehrstufige Synthesen (anorganische, organische, metallorganische und bioanorganische Präparate) eigenständig durchführen und mechanistisch interpretieren.</li> <li>• können Studierende sicherer mit der Vakuumtechnik, Schutzgastechnik, Trocknung von Lösungsmitteln sowie die Anwendung von spektroskopischen Methoden zur Strukturaufklärung (IR-, UV-, NMR-Spektroskopie, Massenspektrometrie), Chromatographie und Diffraktometrie (Pulver und Einkristall) umgehen.</li> <li>• können Studierende erworbene Fertigkeiten und Kenntnissen zum selbständigen Arbeiten in wissenschaftlichen Projekten nutzen.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> Themenverzeichnis: Hauptgruppenelemente, Übergangsmetalle, Elementorganik, Liganden, Cluster, Aggregate, Synthese von reaktiven und komplexen organischen Verbindungen, Anwendung analytischer Methoden zur Strukturaufklärung. Synthesemethoden: Vakuumtechnik, Schutzgastechnik (Schlenktechnik, Substanztransfer in einer Glovebox, Lösemitteltransfer unter Schutzgas, Filtration unter Schutzgas, Abfüllen von NMR-Proben unter Schutzgas), Aufreinigungstechniken: Säulenchromatographie, Umkristallisieren, Sublimation, fraktionierte Destillation und fraktionierte Kondensation, Umgang mit Gefahrstoffen, selbstentzündliche Reagenzien, Transfer mit Spritze und Septum, Umgang mit toxischen / carcinogenen Substanzen, Umgang mit geruchsbelästigenden Stoffen, im Mikromaßstab: Umgang mit potentiell explosiven Substanzen Charakterisierungsmethoden: NMR in Lösung und im Festkörper, Einkristall- und Pulverdiffraktometrie, IR, UV/VIS.					
<b>Lehrformen</b> Projektarbeiten					
<b>Prüfungsformen</b> 1. Sicherheitsgespräch am Beginn des Praktikums; 2. Sicherheits- und Eingangsgespräch vor jedem Versuch; 3. Synthese des Präparats (Ausbeute: min 50% der Literaturangabe?); 4. Dokumentieren der Versuchsdurchführung des Praktikumspräparats im Laborjournal 5. Anfertigung eines Versuchsprotokolls zu dem Praktikumspräparat					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Die erfolgreiche Durchführung der Laborpräparate, Anfertigung von schriftlichen Berichten zu den Praktikumspräparaten sowie die Teilnahme an dem Vorbereitungsseminar.					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>					

Nach CP gewichtet
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b>
Dr. Klaus Merz
Alle Dozent:innen der Anorganischen Chemie
<b>Sonstige Informationen</b>



<b>F-Synthesepraktikum in Organischer Chemie</b>					
Modul-Nr. 23	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 5. Sem.	Turnus Einmal jährlich (nur Im WS)	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> <b>Praktikum</b>			<b>Kontaktzeit</b> 7 SWS / 105 h	<b>Selbststudium</b> 45 h	<b>Gruppengröße</b> Ca. 100 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> <i>Bestandenes Grundpraktikum in Organischer Chemie (für Biochemiker zusätzlich: Bestandenes Praktikum Bioorganische Chemie), Kenntnisse in Organischer Chemie, insb. sicherheitsrelevanter Aspekte</i>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> <li>• sind die Studierenden in der Lage, mehrstufige organisch chemische Synthesen eigenständig durchzuführen und mechanistisch zu interpretieren.</li> <li>• besitzen Studierende die Fähigkeiten zum sicheren Umgang mit der Vakuumtechnik, Schutzgastechnik, Trocknung von Lösungsmitteln sowie der Anwendung von spektroskopischen Methoden zur Strukturaufklärung (IR-, UV-, NMR-Spektroskopie, Massenspektrometrie) und Chromatographie.</li> <li>• sind Techniken und Fertigkeiten in ihrer Vielfalt an Hand von didaktischen und forschungsrelevanten Präparaten erworben und vertieft worden. Das F-Praktikum für Synthesechemie soll den Übergang von den erworbenen Fertigkeiten und Kenntnissen in den präparativen Grundpraktika hin zum selbständigen Arbeiten in wissenschaftlichen Projekten ermöglichen.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Synthese von reaktiven und komplexen organischen Verbindungen in mehrstufigen Synthesen, Stereo- und enantioselektive Synthesen,</li> <li>– Anwendung analytischer Methoden zur Strukturaufklärung. (NMR, IR, UV/VIS, Dünnschichtchromatographie, Gaschromatographie, Massen-spektrometrie)</li> <li>– Synthesemethoden: Vakuumtechnik, Schutzgastechnik</li> <li>– Aufreinigungstechniken: Säulenchromatographie, Umkristallisieren, Sublimation, fraktionierte Destillation und fraktionierte Kondensation</li> <li>– Umgang mit Gefahrstoffen, selbstentzündliche Reagenzien, Transfer mit Spritze und Septum, Umgang mit toxischen / carcinogenen Substanzen, Umgang mit geruchsbelästigenden Stoffen</li> </ul>					
<b>Lehrformen</b> <i>Praktikum</i>					
<b>Prüfungsformen</b> Sicherheitsgespräch am Beginn des Praktikums; Sicherheits- und Eingangsgespräch vor jedem Versuch, Synthese des Präparats (Ausbeute: min 50% der Literaturangabe); Skizzieren der Versuchsdurchführung des Praktikumspräparats im Laborjournal Anfertigung eines Versuchsprotokolls zu dem Praktikumspräparat					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> Die erfolgreiche Anfertigung von schriftlichen Berichten zu den Praktikumspräparaten					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> B.Sc. Chemie / B.Sc. Biochemie					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> Prof. Dr. Lukas Goossen, Prof. Dr. Stefan Huber, Prof. Dr. Gerald Dyker, Prof. Dr. Frank Schulz, Prof. Dr. Christian Merten, Dr. Wolf Matthias Pankau, Dr. Dirk Grote, Irina Graf					

**Sonstige Informationen**

keine

**Physikalische Chemie III**

Modul-Nr. 24	Credits 9 CP	Workload 270 h	Semester 5. + 6. Sem.	Turnus jährlich	Dauer 2 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b>			<b>Kontaktzeit</b>	<b>Selbststudium</b>	<b>Gruppengröße</b>
a) Physikalische Chemie III: Quantenmechanik und Spektroskopie			3 SWS, 45 h	140 h	90 Studierende
b) Physikalisch-chemisches Praktikum für Fortgeschrittene			3 SWS, 55 h		30 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
a) Vorkenntnisse in Mathematik, Physik und Physikalischer Chemie.					
b) Erfolgreiche Teilnahme am Physikalisch-chemischen Grundpraktikum und Physikalische Chemie III für Chemiker und Biochemiker					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>					
a) Zielsetzung: Absolventen dieses Moduls haben die physikalischen Grundlagen verschiedener spektroskopischer Methoden und Grundkenntnisse in der Spektroskopie von Atomen und Molekülen erworben. Kompetenzen: Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, grundlegende spektroskopische Fragestellungen zu verstehen und einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten zu erarbeiten.					
b) Nach Ende des Praktikums soll die Studentin/ der Student					
<ul style="list-style-type: none"> <li>- ein fortgeschrittenes apparatives und theoretisches Verständnis wichtiger experimenteller Techniken der Physikalischen Chemie erworben haben.</li> <li>- in der Lage sein, eine quantitative Genauigkeitsabschätzung für eine durchgeführte Messung zu machen.</li> <li>- in der Lage sein, ein durchgeführtes Experiment in Form eines schriftlichen Berichtes darzustellen.</li> <li>- in der Lage sein, ein ausgewähltes Thema der Physikalischen Chemie in einem mündlichen Seminarbeitrag vorzustellen.</li> </ul>					
<b>a) Inhalt</b>					
1. Experimentelle Hinweise auf Quanteneffekte					
2. Quantenmechanische Grundlagen der Spektroskopie: Wellenpakete, Operatoren, Schrödingergleichung					
3. Anwendung auf einfache QM-Systeme (freies Teilchen, Reflexion an Barriere, Tunneleffekt)					
4. Anwendung auf lokalisierte Systeme in einer Dimension: Teilchen im Kasten, Harmonischer Oszillator					
5. Verallgemeinerungen auf räumlich begrenzte Systeme: Separationsansatz, Drehimpuls, mehrdimensionales Teilchen im Kasten, H-Atom					
6. Mehrelektronensysteme, Photoelektronenspektroskopie					
7. Molekülorbitale und chemische Bindung, Born-Oppenheimer-Näherung, Elektronenkonfigurationen einfacher Moleküle, Termschema					
8. Rotations- und Schwingungsspektren einfacher Moleküle, Absorptions- und Ramanspektroskopie					
9. Elektronische Anregung, Fluoreszenz und Phosphoreszenz.					

<b>b) Praktische Inhalte</b>
Laser-induzierte Fluoreszenz-Spektroskopie, Infrarot-Spektroskopie, UV/VIS-Spektroskopie, Elektronenbeugung (LEED), Oberflächen-Plasmonenresonanz-Spektroskopie, Gitterenergie von Argon, Mehrschichten-Adsorption BET, Dipolmoment, Laser-Mikroskopie, Rasterkraftmikroskopie, Rastertunnelmikroskopie, Protein-Wechselwirkungen, Teilchen im Kasten.
<b>Lehrformen</b>
a) Vorlesung, Übung b) Praktikum, Seminar
<b>Prüfungsformen</b>
a) Schriftliche Abschlussklausur von 120 min b) Eingangskolloquium zu jedem Versuch, Anfertigung von schriftlichen Berichten zu jedem Versuch, erfolgreiche Darstellung eines Themas in einem Seminarvortrag.
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b>
Bestehen der Klausur.
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>
B.Sc. Chemie, B.Sc. Biochemie.
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>
Nach CP gewichtet.
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b>
Dozenten der Physikalischen Chemie
<b>Sonstige Informationen</b>
Im elektronischen Lernsystem der RUB werden ein Skript und zusätzliche Lehrmaterialien angeboten. Diese Vorlesung ist in Kombination mit dem Physikalisch-Chemischen Fortgeschrittenenpraktikum Zulassungsvoraussetzung für den Studiengang Master of Science in Chemistry der Fakultät.

<b>Physikalische Chemie IV</b>					
Modul-Nr. 25	Credits 5 CP	Workload 150 h	Semester 6. Semester	Turnus SS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Physikalische Chemie IV: Statistische Thermodynamik			<b>Kontaktzeit</b> 3 SWS, 45 h	<b>Selbststudium</b> 105 h	<b>Gruppengröße</b> 90 Studierende

<p><b>Teilnahmevoraussetzungen:</b> Kenntnis der Inhalte der Vorlesungen Physikalische Chemie I-III.</p>
<p><b>Lernziele (learning outcomes)</b></p> <p>Zielsetzung: Die Studentin/der Student soll ein grundlegendes Verständnis der statistisch-thermodynamischen Beschreibung der Eigenschaften der Materie erwerben. Ausgehend von den Grundlagen der statistischen Thermodynamik werden fundamentale Zusammenhänge durch Anwendungen auf Gase, Flüssigkeiten, Festkörper und Polymere erarbeitet.</p> <p>Kompetenzen: Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, den Zusammenhang zwischen makroskopischen Größen und Eigenschaften zugrundeliegender Teilchen zu verstehen und makroskopische Größen und Phänomene aus den Eigenschaften individueller Moleküle bzw. Bausteine, aus denen das makroskopische System besteht, zu berechnen.</p>
<p><b>Inhalt</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Grundlagen der statistischen Thermodynamik: Verteilungen und Mittelwerte, Mikro- und Makrozustände, Kombinatorik, Stirling-Näherung, Binomialverteilung, Grundlagen der Boltzmann-Statistik, Statistische Ensemble, Zustandssumme und Verteilung</li> <li>Berechnung thermodynamischer Funktionen aus der Zustandssumme: Innere Energie, Wärmekapazität, Entropie, Freie Energie, Druck, Enthalpie, Freie Enthalpie</li> <li>Quantenmechanische Herleitung der Zustandssummen: Zustandssummen der Translation, Rotation, Vibration, elektronischen Anregung, Kernanregung</li> <li>Gesamtzustandssumme von Molekülen</li> <li>Quantenstatistik: Fermi-Dirac, Bose-Einstein, Übergang zur Boltzmann-Verteilung</li> <li>Anwendung auf mono- und polyatomige Gase: ideales Gas, van-der-Waals-Gleichung, ortho- und para-Wasserstoff</li> <li>Anwendungen auf Flüssigkeiten und Festkörper: Einstein-Modell und Debye-Modell, Dulong-Petit-Gesetz, Bändermodell</li> <li>statistisch-thermodynamische Beschreibung von chemischen Gleichgewichten</li> <li>statistische Behandlung von Polymeren.</li> </ol>
<p><b>Lehrformen</b></p> <p>Vorlesung (2 SWS, 30 h), Übung (1 SWS, 15 h).</p>
<p><b>Prüfungsformen</b></p> <p>Schriftliche Abschlussklausur von 120 min.</p>
<p><b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b></p> <p>Bestehen der Klausur.</p>
<p><b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b></p> <p>B.Sc. Chemie.</p>
<p><b>Stellenwert der Note für die Endnote</b></p> <p>Nach CP gewichtet.</p>
<p><b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b></p> <p>C. Herrmann, PC-Dozenten.</p>
<p><b>Sonstige Informationen</b></p>

<b>Fortgeschritten Theorie und Praxis der Analytischen Chemie</b>					
Modul-Nr. 26	Credits 9 CP	Workload 120 h	Semester 5./6. Sem.	Turnus WS/SoS	Dauer 2 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Vorlesung Instrumentelle Analytik II b) Analytisch-chemisches F-Praktikum			<b>Kontaktzeit</b> 3 SWS / 39 h 5 SWS / 35 h	<b>Selbststudium</b> 105 h 85 h	<b>Gruppengröße</b> 60 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b> a) keine b) Leistungsnachweise „Instrumentelle Analytik und II“					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b> <b>Zielsetzung:</b> Nach Ende dieses Moduls soll der/die Student/Studentin ein fortgeschrittenes apparatives und theoretisches Verständnis über die Praxis sowie die möglichen analytischen Anwendungsbereiche wichtiger Methoden der Oberflächenanalytik, Elektroanalytik und Sensorik besitzen. Er/sie soll in der Lage sein, experimentelle Ergebnisse für die einzelnen Methoden auszuwerten und kritisch zu beurteilen.  <b>Kompetenzen:</b> Die Studierenden erwerben theoretische und praktische Kenntnisse im Bereich der modernen instrumentellen Analytik. Darüber hinaus erwerben sie fundierte Kenntnisse in der Auswertung und Bewertung von Analysemethoden.					
<b>Inhalt</b> a) Die Vorlesung behandelt folgende instrumentellen analytische Methoden: – Oberflächenanalytik: Reflektion an Oberflächen, Spektroskopische Ellipsometrie, Röntgen- und Neutronenreflektometrie, Röntgen- und Neutronenreflektometrie, ATR-FTIR. – Elektroanalytik: Cyclische Voltammetrie, Differenz-Puls-Voltammetrie, Stripping-Voltammetrie – Bioanalytik: Immunoassays, Enzymatische Analytik – Sensorik: Ionenselektive Elektroden, Chemische Sensoren, Biosensoren  b) Folgende Methoden werden im Praktikum vorgestellt: – Analytische Trennverfahren: Hochleistungsflüssigchromatographie (HPLC) – Molekülspektroskopie und Strukturanalytik: Atomabsorptionsspektroskopie (AAS), Kernspinresonanzspektroskopie (NMR), Massenspektrometrie, Oberflächenplasmonenresonanzspektroskopie (SPR) – Elektroanalytik: Zyklische Voltammetrie (CV), Elektrochemische Quarzkristallmikrowaage (EQCM)					
<b>Lehrformen</b> i) Vorlesung; ii) Übung; iii) e-learning Module im Moodle, iv) Praktikum					
<b>Prüfungsformen</b> a) schriftliche Modulabschlussprüfung von 120 min b) Sicherheits- und Eingangskolloquien vor den Versuchen, Überprüfung der Ergebnisse der Analysen sowie Versuchsprotokolle.					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> a) Bestehen der Klausur, b) erfolgreiche Anfertigung von schriftlichen Berichten zu den Praktikumsaufgaben.					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b> BSc. Chemie					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b> nach CP gewichtet					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> A. Rosenhahn, W. Schuhmann, K. Tschulik					
<b>Sonstige Informationen</b>					

<b>Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Biochemie I</b>					
Modul-Nr. 27	Credits 9 CP	Workload 240 h	Semester 3. Sem.	Turnus nur WS	Dauer 1 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b>			<b>Kontaktzeit</b>	<b>Selbststudium</b>	<b>Gruppengröße</b>
a) Biochemie I (184320, 184321)			a) 42 h	a) 108 h	ca. 70
b) Praktikum Biochemische Arbeitstechniken (184322)			b) 40 h	b) 50 h	Teilnehmer
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
a) keine, Vorkenntnisse aus der Einführung in die Biochemie sind aber dringend empfohlen					
b) keine					
<b>Lernziele</b>					
a) Die Vorlesung vermittelt Kenntnisse über die molekularen und zellulären Funktionen von Proteinen, Lipiden und dem Stoffwechsel sowie über deren zelluläre Kompartimentierung und Regulation. Nach Abschluss der Vorlesung können die Teilnehmer die erlernten Kenntnisse auf die Regulation von Enzymen, Metabolismus, molekulare Motoren und auf Grundzüge der Signaltransduktion übertragen.					
b) Im Praktikum lernen die Teilnehmer grundlegende biochemische Techniken. Nach Abschluss des Praktikums können die Teilnehmer selbständig biochemische Versuche nach Versuchsskript durchführen und in zum Verständnis ausreichender Detailtiefe protokollieren und auswerten.					
<b>Inhalt</b>					
a) Die Vorlesung beschäftigt sich mit xxx:					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aminosäuren und Peptiden: allgemeine Struktur, Zusammensetzung, Vorkommen, Eigenschaften, Peptidbindung, Hierarchien in der Proteinstruktur, Ramachandran Diagramm, Kollagen-Tripelhelix</li> <li>• Faltung von Proteinen: nicht-kovalente schwache Wechselwirkungen, Faltung des Trypsininhibitors, Chaperone: GroEL und GroES</li> <li>• Aminosäure- und Proteinanalytik: Immunoblotting, zweidimensionale Elektrophorese, Affinitätschromatographie, Ultrazentrifugation, Gelchromatographie, Salzfällung</li> <li>• Enzymkinetik: Michaelis-Menten, enzymatische Katalyse, Mechanismen</li> <li>• Biologische Membranen: Membranlipide, Membranproteine, Glykoproteine</li> <li>• Transport durch biologische Membranen: erleichterte Diffusion, primäre und sekundäre Membrantransportsysteme, Ionophoren (Gramicidin)</li> <li>• Lipoproteine: Transport von Triacylglyceriden, LDL: Modell, Rezeptor, Endocytose, Recycling</li> <li>• Fettsäurestoffwechsel: Fettsäuresynthetase-Zyklus, Vergleich: Abbau/Biosynthese, Regulation, Energiebilanz</li> <li>• Arachidonsäurestoffwechsel: Prostaglandine, Prostacycline, Thromboxane II</li> <li>• Energiestoffwechsel: Glykolyse, Glukoneogenese, Pyruvat-Decarboxylase</li> <li>• Krebszyklus (Tricarbonsäurezyklus): Regulation, mitochondrialer Membrantransport</li> <li>• Membrangebundene ATP-Synthese: Protonengradient, Bakteriorhodopsin, Elektronentransport, mitochondriale Elektronentransportkette, ATPase: Rotationsmechanismus 3</li> <li>• Pentosephosphatweg: oxidativer und nicht oxidativer Zweig</li> <li>• Abbau von Aminosäuren: Transaminierung, Desaminierung, Harnstoffzyklus, Kopplung Harnstoffzyklus-Citratcyclus, Koordination des Stoffwechsels</li> </ul>					
b) Vor dem Praktikum findet eine Sicherheitsunterweisung statt, in der Kenntnisse zur Arbeitssicherheit im biochemischen Labor, zum Umgang mit Gefahrstoffen und deren Entsorgung vermittelt werden. Im Praktikum werden fünf Versuche durchgeführt:					

<ul style="list-style-type: none"> <li>• BA-1: Isolierung von <math>\alpha</math>-Lactalbumin aus Rohmilch                             <ul style="list-style-type: none"> <li>– Fraktionierte Fällung von Milchproteinen</li> <li>– Weitere Aufreinigung des <math>\alpha</math>-Lactalbumins durch Gelfiltrationschromatographie</li> </ul> </li> <li>• BA-2: Untersuchung von <math>\alpha</math>-Lactalbumin                             <ul style="list-style-type: none"> <li>– Bestimmung der Proteinmenge in den Fraktionen der Gelfiltration aus BA-1</li> <li>– Analyse der Fällungsschritte und der Fraktionen der Gelfiltration aus BA-1 durch SDS-Polyacrylamid-Gelelektrophorese</li> </ul> </li> <li>• BA-3: Isolierung von Phospholipasen aus Pflanzen und deren Analyse mittels fluoreszierender Lipide                             <ul style="list-style-type: none"> <li>– Isolierung von Phospholipasen aus Weizenkeimlingen</li> <li>– Verdau von Lipiden mit Phospholipasen</li> <li>– Dünnschichtchromatographische Auftrennung der verdauten Lipide</li> </ul> </li> <li>• BA-4: Isolierung von Glykogen aus Leber                             <ul style="list-style-type: none"> <li>– Extraktion von Glykogen aus Schweineleber</li> <li>– Analyse des Zeitverlaufs der sauren und enzymatischen (Speichel) Hydrolyse des Glykogens</li> </ul> </li> <li>• BA-5: Charakterisierung von Urease                             <ul style="list-style-type: none"> <li>– Bestimmung der Ureasekonzentration</li> <li>– Messung der Enzymaktivität der Urease mit einem gekoppelten optischen Test</li> </ul> </li> </ul>
<b>Lehrformen</b> a) Vorlesung mit Übung und begleitendem e-Learning-Modul b) Praktikum
<b>Prüfungsformen</b> a) Klausur b) Antestat, Versuchsdurchführung, Versuchsprotokoll
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b> a) Bestehen der Klausur b) Bestehen des Antestats, der Versuchsdurchführung und des Versuchsprotokolls für alle fünf Versuche
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>
<b>Stellenwert der Note für die Endnote:</b> a) nach CP gewichtet (5 CP) b) unbenotet (3 CP)
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b> T. Günther-Pomorski, S. Neumann, D. Wolters, D. Tapken, M. Hollmann, R. Stoll
<b>Sonstige Informationen</b>

<b>Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Technischen Chemie I</b>					
Modul-Nr. 28	Credits 9 CP	Workload 150 h	Semester 5. + 6. Sem.	Turnus jährlich	Dauer 2 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Technische Chemie I: Chemische Verfahrenstechnik b) Technisch-chemisches Praktikum			<b>Kontaktzeit</b> a) 3 SWS / 45 h b) 7 SWS / 105 h	<b>Selbststudium</b> 120 h	<b>Gruppengröße</b> a) Studierende, die das Wahlfach belegen b) 16 Praktikumsplätze

**Teilnahmevoraussetzungen:**

- a) Grundkenntnisse in Allgemeiner, Anorganischer, Organischer und Physikalischer Chemie
- b) Leistungsnachweise für Grundlagen der Technischen Chemie oder Technische Chemie I: Chemische Verfahrenstechnik

**Lernziele (learning outcomes)**

- a) **Zielsetzung:** Nach Ende dieses Moduls sollen die Studierenden die Grundlagen der Reaktorauswahl und -auslegung, der Gestaltung und Auslegung von Wärme- und Stoffaustauschapparaten, der Berechnung von Druckverlusten sowie der Auslegung von Rektifikations- und Absorptionskolonnen beherrschen und einfache Probleme in diesen Bereichen selbständig lösen können. Sie sollen die Grundlagen und apparative Ausgestaltung von Adsorptions- und Extraktionsanlagen sowie von Misch- und Filtrationsaggregaten kennen.  
**Kompetenzen:** Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, grundlegende technisch-chemische Fragestellungen zu verstehen und einfache fachspezifische Lösungsmöglichkeiten zu erarbeiten.
- b) **Zielsetzung:** Nach Abschluss dieses Moduls sollen die Studierenden wichtige Grundoperationen der Trenntechnik, der Wärme-, Stoff- und Impulsübertragung sowie die idealen Reaktoren aus eigener Anschauung kennen. Sie sollen die Grundlagen der Reaktorwahl und -auslegung, der Gestaltung und Auslegung von Wärme- und Stoffaustauschapparaten, der Berechnung von Druckverlusten sowie der Auslegung von Rektifikations- und Absorptionskolonnen sicher beherrschen, anwenden und auch komplexere Anwendungsfälle zutreffend diskutieren können.  
**Kompetenzen:** Die Studierenden erwerben die Fähigkeit, mit Stofftrennanlagen (u.a. Destillation, Absorption) und Wärmetauschern im größeren Labormaßstab umzugehen. Sie stärken ihre Kompetenz, Ergebnisse von Experimenten hinsichtlich ihrer Aussagekraft zu bewerten, experimentelle Unregelmäßigkeiten zu erkennen, ihre Ergebnisse vor Kolleginnen und Kollegen vorzutragen und zu diskutieren.

**Inhalt**

Umsatzberechnung in idealen Reaktoren: Stoffbilanzen, Ableitung des Umsatzes unter vereinfachenden Nebenbedingungen (Idealität, Isothermie, etc.), ideale isotherme Reaktoren, Verweilzeitfunktionen idealer Reaktoren

**Einführung in die Systematik der Grundoperationen:** Begriffsbestimmung, kurzer Überblick  
Strömungslehre: Bernoulli-, Kontinuitätsgleichung; Grundsituationen des Impulstransports, vom Newtonschen Reibungsgesetz zur Druckverlustgleichung, Strömungsprofile der laminaren Strömung/Hagen-Poiseuille, Reynoldszahl, Ähnlichkeitstheorie und Kriteriengleichungen, Berechnung von Druckverlusten; Pumpen und Pumpenkennlinien

Mechanische Grundoperationen: Rühren – Grundprozesse und Grundgleichungen, apparative Ausführung; statische Mischer; Filtrieren – Grundprozesse, Grundformen, Filtergleichung, apparative Ausführungen; Mahlen und Brechen; Klassieren

Wärme- und Stofftransport: Grundsituationen des Wärme- und Stofftransports; Transportgleichungen für molekulare Mechanismen sowie allgemeine Beschreibung, molekulare und allgemeine Intensitätsparameter, Ähnlichkeitstheorie, dimensionslose Kennzahlen, Ermittlung der Transportparameter über Kriteriengleichungen; Beispiele: Berechnung von Druckverlusten (Rohrströmung, Schüttung), Berechnung von Wärmetauschern, Höhe von Transfereinheiten in Füllkörperkolonnen

**Thermische Trennverfahren:**

Rektifikation: Gleichgewichts- und Bilanzlinien im McCabe-Thiele-Diagramm, HTU-NTU-Konzept für Füllkörperkolonnen, Methoden der Vielstoffdestillation, Azeotrop- und Extraktivdestillation;

Absorption: Gleichgewichts- und Bilanzlinien im McCabe-Thiele-Diagramm, praktische Aspekte von Absorptionsverfahren, Beispiele;

Adsorption: Gleichgewichtsdarstellung, Adsorption als instationärer Prozess, Festbettadsorber, cyclische Adsorptionsbatterien, Druckwechseladsorption;

Extraktion: Gleichgewichts- und Bilanzlinien im McCabe-Thiele-Diagramm (Nichtmischbarkeit von Lösungs- und Extraktionsmittel), Darstellung von Dreistoffsystemen im Dreiecksdiagramm, Polstrahlverfahren zur Bilanzierung von Extraktionsanlagen.



<p><b>Praktische Inhalte</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Rektifikation: Bestimmung der theoretischen Trennstufenzahl einer Kolonne, Lösung einer Trennaufgabe durch Realisierung eines vorausgerechneten Rücklaufverhältnisses, Seminar: McCabe-Thiele-Diagramm (vertieft), Eigenschaften realer Böden</li> <li>2. Extraktion von Benzoesäure aus wässriger Lösung durch Cyclohexan in einer Mixer-Settler-Batterie, Seminar zu Phasengleichgewicht, Auslegung der Extraktion im McCabe-Thiele Diagramm und nach Nash und Hunter</li> <li>3. Prinzipien der Strömungsmesstechnik: Normblende, Kapillar-Strömungsmessern Massendurchflussregler, Rotameter, Seminar: Strömungstechnische Grundlagen der Messverfahren</li> <li>4. Wärmeübergang: Doppelrohrwärmetauscher, Seminar: Arbeit mit dem VDI-Wärmeatlas</li> <li>5. Filtration: Ermittlung von Konstanten der Filtergleichung, Seminar: Mechanische Trennprozesse</li> <li>6. Verweilzeitverteilung in idealen Reaktoren: Impuls- und Sprungantwort in CSTR, Strömungsrohr, Kaskade, Seminar zu Verweilzeitverteilungen idealer Reaktoren</li> <li>7. Umsatz in idealen Reaktoren: Kinetik einer Esterhydrolyse in Satzreaktor, CSTR, Kaskade und Strömungsrohr, Umsatzberechnung auch unter Einsatz der Verweilzeitfunktion, Seminar zur Umsatzberechnung</li> <li>8. Wirbelschicht: Ermittlung der Fluidisierungsgeschwindigkeit und der Wärmeaustauscheigenschaften einer Wirbelschicht, Seminar: Reaktionstechnisches Potenzial von stationären und instationären Wirbelschichten</li> <li>9. Adsorption: Durchbruchkurve und Desorptionscharakteristik eines Festbettadsorbers, Seminar: Adsorptionsisotherme und Durchbruchkurve</li> </ol> <p>Absorption: Bestimmung der Austauschfläche eines Absorbers durch den Umsatz einer schnellen, bei bekannter Phasengrenzfläche unabhängig charakterisierten Reaktion, Seminar: Reaktionen über die fluid-fluid-Phasengrenze</p>
<p><b>Lehrformen</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Vorlesung / Übung</li> <li>b) Praktikum</li> </ol>
<p><b>Prüfungsformen</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Klausur</li> <li>b) Aktive Teilnahme</li> </ol>
<p><b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b></p> <p>Bestehen der Klausur</p>
<p><b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b></p> <p>Bachelor-Studiengänge der Chemie und Biochemie; Optionalbereich</p>
<p><b>Stellenwert der Note für die Endnote</b></p> <p>Nach CP gewichtet</p>
<p><b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b></p> <p>M. Muhler, B. Mei</p>
<p><b>Sonstige Informationen</b></p> <p>Vorlesungsmaterialien werden über <i>moodle</i>-Kurse publiziert. Ein detailliertes Skript zur Vorlesung wird zur Verfügung gestellt.</p> <p>Praktikumsunterlagen werden über <i>moodle</i>-Kurse publiziert</p>

Fortgeschrittene Theorie und Praxis der Theoretischen Chemie I					
Modul-Nr. 29	Credits 9 CP	Workload 270 h	Semester 5. + 6. Sem.	Turnus jährlich	Dauer 2 Semester
<b>Lehrveranstaltungen</b> a) Theoretische Chemie I: Vorlesung/Übung b) Theoretisch-Chemisches Praktikum			<b>Kontaktzeit</b> a) 3 SWS / 42 h b) 6 SWS / 60 h	<b>Selbststudium</b> 165 h	<b>Gruppengröße</b> Ca. 20 Studierende
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>					
a) Die Teilnehmer erwerben Kenntnisse über die wichtigsten Methoden der Theoretischen Chemie in den Bereichen Elektronenstruktur, Molekülstruktur und Molekulardynamik. <b>Kompetenzen:</b> Über das Erlernen der Grundlagen der verschiedenen Methoden der Theoretischen Chemie hinaus erwerben die Studierenden die Fähigkeit, die jeweiligen Limitierungen und praktischen Einsatzmöglichkeiten der Methoden zu bewerten. Damit vermittelt diese Vorlesung auch insbesondere die nötigen Grundlagen für das Theoretisch-Chemische Praktikum im Folgesemester.					
b) Erfolgreiche Teilnahme an der das Praktikum vorbereitenden Lehrveranstaltung „Theoretische Chemie I: Grundlagen“ (sowie der vorausgehenden Pflichtvorlesung „Theorie der Chemischen Bindung“)					
<b>a) Inhalt</b>					
1. <b>Born-Oppenheimer-Separation:</b> Schrödingergleichungen für Elektronen- und Kernbewegung, BO-Potentialflächen, Gültigkeit, nichtadiabatische Korrekturen					
2. <b>Molekulardynamik:</b> Newton/Lagrange/Hamilton Formulierung, Grundbegriffe der Statistischen Mechanik, Boltzmannverteilung, freie Energien, Parameterisierungen von Kraftfeldern, kondensierte Materie, Eigenschaften von Integratoren, Trajektorien, Auswertung, statische Messgrößen, radiale Verteilungsfunktionen, Zeitkorrelationsfunktionen					
3. <b>Vertiefung Theoretischer Grundlagen:</b> kanonische Quantisierung, Darstellungen, Hilbertraum, Ununterscheidbarkeit und Symmetrisierungspostulat, Drehimpulsformalismus und Spin,					
4. <b>Rechenmethoden:</b> Variationsprinzip und Variationsverfahren (Grundzustand); Störungstheorie (nichtentartet, zeitunabhängig)					
5. <b>Hartree-Fock-Theorie und Elektronenkorrelation:</b> LCAO Ansatz, Roothaan-Hall Gleichungen, (Standard-) Basissätze, Koopmans' Näherung, dynamische und nichtdynamische Elektronenkorrelation, Fermi-Korrelation, kurz- und langreichweitige Coulombkorrelation, Elektronencusp, Grundideen von Mehrdeterminantenansätzen (MCSCF, CI), Coupled Cluster (CC) Verfahren, Vielteilchenstörungstheorie (MP)					
6. <b>Dichtefunktionaltheorie:</b> Hohenberg-Kohn-Theoreme, Kohn-Sham-Verfahren, lokale Dichtenäherung und Gradientenkorrekturen, Hybridfunktionale.					
<b>b) Praktische Inhalte</b>					
Das Praktikum umfasst vier ungefähr gleichgewichtige Teilbereiche. In den Blöcken „Quantenchemie (QC)“ und „Molekulardynamik (MD)“ sollen die in der Vorlesung behandelten Methoden praktisch angewendet werden. Eine „Programmieraufgabe“ soll an die selbständige Methodenentwicklung als einen wichtigen Teilbereich der Theoretischen Chemie heranführen und in dem Block „Theoretische Grundlagen“ ein über die Vorlesung hinausgehendes Grundlagenwissen selbständig erarbeitet werden.					
1. <b>Quantenchemische Rechnungen:</b> Geometrieoptimierung von Molekülen, Hartree-Fock (HF) und Dichtefunktionalmethoden (DFT), wellenfunktionsbasierte Korrelationsmethoden (z.B. CI, CC, MP2, MCSCF), Methodenvergleich, Berechnung von Potentialflächen, Bestimmung von Gleichgewichtsstrukturen und Übergangszuständen, Analyse und Visualisierung der					

<p>elektronischen Struktur, IR-Spektren in harmonischer Näherung, Berechnung von elektronisch angeregten Zuständen</p> <p>2. <b>Molekulardynamik:</b> Car-Parrinello ab initio MD Simulation der Protonenwanderung in Wasser (Grotthuss-Mechanismus der Strukturdiffusion), Anwendung von molekülmechanischen Kraftfeldern (MM) in klassischer MD zur Simulation eines Proteins in Wasser, Analyse von Trajektorien in Ort und Zeit</p> <p>3. <b>Programmieraufgabe:</b> Entwicklung eines einfachen Computerprogramms (z.B. in Fortran oder C unter Verwendung von Bibliotheksroutinen) zur numerischen Integration von Bewegungsgleichungen in MD Simulationen</p> <p>4. <b>Theoretische Grundlagen:</b> z.B. Symmetrieanalyse von Schwingungsspektren (Gruppentheorie), Spinzustände von Mehrelektronensystemen (CI)</p>
<p><b>Lehrformen</b></p> <p>a) Vorlesung, Übungen analytisch und Präsentation der Ergebnisse, Diskussion in Kleingruppen.</p> <p>b) Praktische Computerchemie im „virtuellen Labor“ von der Theorie zum Ergebnis: Nutzung von Programmpaketen, die auch in der aktuellen Forschung genutzt werden, um selbständig unter qualifizierter Anleitung Standardprobleme aus den Bereichen Elektronen- und Molekülstruktur sowie Molekulardynamik auf leistungsfähigen Servern einschliesslich modernster Visualisierung zu bearbeiten. Selbständige Entwicklung unter qualifizierter Anleitung eines einfachen Computerprogramms in einer Programmiersprache freier Wahl mit einer Pilotanwendung. Verfassen von schriftlichen Versuchsprotokollen und Besprechung bzw. Diskussion der dargestellten Ergebnisse im integrierten Seminar.</p>
<p><b>Prüfungsformen</b></p> <p>a) Mündliche oder schriftliche Abschlussprüfung gem. Ankündigung</p> <p>b) Qualifizierte schriftliche Versuchsprotokolle für jeden Versuch</p>
<p><b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b></p> <p>a) Bestehen der Abschlussprüfung</p> <p>b) Testierung der rechtzeitig eingereichten schriftlichen Versuchsprotokolle</p>
<p><b>Verwendung des Moduls</b> (in anderen Studiengängen)</p> <p>Studiengang B.Sc. Biochemie</p>
<p><b>Stellenwert der Note für die Endnote</b></p> <p>Nach CP gewichtet</p>
<p><b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b></p> <p>a) D. Marx, C. Hättig</p> <p>b) L. Schäfer zusammen mit J. Behler, C. Hättig, D. Marx und anderen Dozenten der Theoretischen Chemie</p>
<p><b>Sonstige Informationen</b></p> <p>Multimedial aufbereitete Unterlagen auf der Homepage des Praktikums innerhalb den Seiten „Lehre“ des Lehrstuhls für Theoretische Chemie zusammen mit digitalen Inhalten z.B. zu numerischen Techniken, theoretischen Methoden, Referenzdaten und Forschungsliteratur.</p>

<b>Bachelor-Arbeit in Chemie</b>					
Modul-Nr. 30	Credits 12 CP	Workload 360 h	Semester 6. Sem.	Turnus	Dauer 3 Monate
<b>Lehrveranstaltungen</b>			<b>Kontaktzeit</b>	<b>Selbststudium</b>	<b>Gruppengröße</b>
a) Praktische Labortätigkeit b) Schriftliche Hausarbeit					
<b>Teilnahmevoraussetzungen:</b>					
<b>Lernziele (learning outcomes)</b>					
Die Bachelor-Arbeit ist eine schriftliche Hausarbeit, basierend auf praktischer experimenteller Tätigkeit und ist weiterführend angelehnt an eines der F-Praktika. Nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• können Studierende innerhalb einer vorgegebenen Frist einen wissenschaftlichen Befund erheben, darstellen und auswerten.</li> </ul>					
<b>Inhalt</b>					
Das Thema der Bachelor-Arbeit ist weiterführend angelehnt an eines der F-Praktika. Die Arbeit muss zu einer Veranstaltung des Teils II des Basis-Studiums angefertigt werden. Chemisch-orientierte Bachelor-Arbeiten müssen zu einem Themenbereich aus einem der folgenden Praktika angefertigt werden: F-Praktikum für Synthesechemie, Physikalisch-chemisches F-Praktikum, Analytisch-chemisches F-Praktikum, Biochemisches Praktikum, Technisch-chemisches Praktikum oder Theoretisch-chemisches Praktikum.					
<b>Lehrformen</b>					
Experimentelle Projektarbeit, schriftliche Hausarbeit					
<b>Prüfungsformen</b>					
Bewertung der Bachelorarbeit durch zwei Gutachter					
<b>Voraussetzungen für die Vergabe von Kreditpunkten</b>					
Bewertung durch die zwei Prüfer/innen mit „ausreichend“ oder besser					
<b>Verwendung des Moduls (in anderen Studiengängen)</b>					
Studiengang BSc Biochemie					
<b>Stellenwert der Note für die Endnote</b>					
Nach CP gewichtet					
<b>Modulbeauftragte/r und hauptamtlich Lehrende</b>					
Im B. Sc.-Studiengang Chemie tätige Hochschullehrer/innen und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen					
<b>Sonstige Informationen</b>					