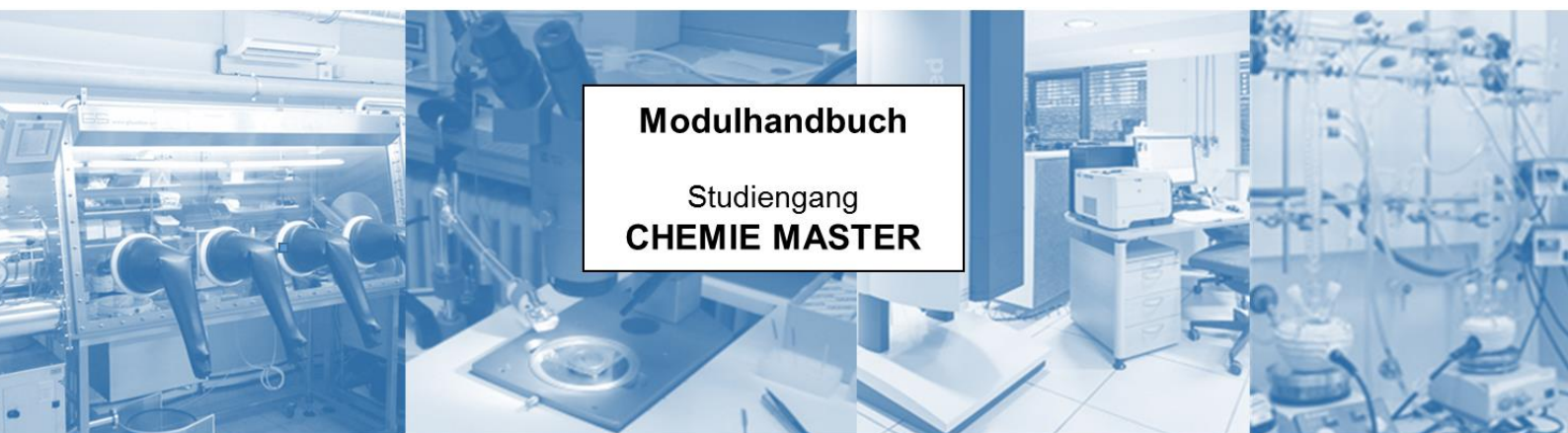


**FAKULTÄT FÜR  
CHEMIE UND  
GEOWISSENSCHAFTEN**



**UNIVERSITÄT  
HEIDELBERG**  
ZUKUNFT  
SEIT 1386



**Modulhandbuch**

Studiengang  
**CHEMIE MASTER**

Fassung vom 23.11.2016

Zur Prüfungsordnung vom 28.09.2016

Vollzeitstudiengang, Regelstudienzeit vier Semester, 120 LP

# Inhaltsverzeichnis

I.	Qualifikationsziele und Überblick über den Studiengang.....	1
1.	Präambel: Qualifikationsziele der Universität Heidelberg.....	1
2.	Qualifikationsziele des Masterstudiengangs Chemie .....	1
3.	Überblick über den Studiengang und Modellstudienplan .....	2
II.	Modulbeschreibungen .....	4
	Pflichtmodule .....	4
	Modul Spek: „Angewandte Spektroskopische Methoden“ .....	4
	Modul AC_F: Praktikum/Seminar Moderne Aspekte der Anorganischen Chemie.....	4
	Modul OC_F: Organisches Forschungspraktikum .....	5
	Modul PC_F: Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum.....	5
	Modul MP: Mündliche Abschlussprüfung.....	6
	Modul MA: Masterarbeit .....	7
	Wahlpflichtmodule.....	8
	Wahlpflichtmodule Anorganische Chemie.....	8
	Modul AC-Z1: Koordinationschemie und Supramolekulare Chemie.....	8
	Modul AC-Z2: Hauptgruppenelementchemie .....	8
	Modul AC-Z3: Physikalische und theoretische Methoden der Anorganischen Chemie .....	9
	Modul AC-Z4: Bioanorganische Chemie .....	9
	Modul AC-Z5: Reaktivität Metallorganischer Komplexe und Molekulare Katalyse .....	10
	Modul AC-Z6: Chemie der Materialien .....	10
	Modul AC-S: Spezialvorlesung Anorganische Chemie.....	11
	Wahlpflichtmodule Organische Chemie .....	11
	Modul OC-Z1: Organische Materialien .....	11
	Modul OC-Z2: Heterozyklen .....	12
	Modul OC-Z3: Metallvermittelte organische Synthesen.....	12
	Modul OC-Z4: Aromaten und Heteroaromaten.....	13
	Modul OC-Z5: Stereochemie .....	14
	Modul OC-Z6: Synthese und Retrosynthese .....	14
	Modul OC-S: Spezialvorlesung Organische Chemie.....	15
	Wahlpflichtmodule Physikalische Chemie .....	16
	Modul PC-Z1: Statistische Theorie der Materie .....	16
	Modul PC-Z2: Einführung in die Quantentheorie .....	16
	Modul PC-Z3: Aufbau der Materie und Spektren.....	17
	Modul PC-Z4: Molekulare Kinetik .....	17
	Modul PC-Z5: Oberflächenchemie .....	18

Modul PC-Z6: Biophysikalische Chemie.....	18
Modul PC-S: Spezialvorlesung Physikalische Chemie .....	19
Wahlmodul / Vertiefungsfach .....	20
Vertiefungsfach Bioanorganische Chemie.....	20
Vertiefungsfach Biochemie.....	20
Vertiefungsfach Biophysikalische Chemie.....	21
Vertiefungsfach Homogene Katalyse .....	22
Vertiefungsfach Molekulares Modellieren.....	23
Vertiefungsfach Radiochemie.....	24
Vertiefungsfach Reaktive Strömungen (10 LP) .....	25
Vertiefungsfach Theoretische Chemie.....	26
Anhang.....	28
i. Hinweise zu den Prüfungsleistungen.....	28
ii. Hinweise zum Auslandsaufenthalt.....	28
iii. Kontaktdaten .....	29

# **I. Qualifikationsziele und Überblick über den Studiengang**

## **1. Präambel: Qualifikationsziele der Universität Heidelberg**

Anknüpfend an ihr Leitbild und ihre Grundordnung verfolgt die Universität Heidelberg in ihren Studiengängen fachliche, fachübergreifende und berufsfeldbezogene Ziele in der umfassenden akademischen Bildung und für eine spätere berufliche Tätigkeit ihrer Studierenden.

Das daraus folgende Kompetenzprofil wird als ein für alle Disziplinen gültiges Qualifikationsprofil in den Modulhandbüchern aufgenommen und in den spezifischen Qualifikationszielen sowie den Curricula und Modulen der einzelnen Studiengänge umgesetzt:

- Entwicklung von fachlichen Kompetenzen mit ausgeprägter Forschungsorientierung;
- Entwicklung transdisziplinärer Dialogkompetenz;
- Entwicklung von personalen und Sozialkompetenzen;
- Förderung der Bereitschaft zur Wahrnehmung gesellschaftlicher Verantwortung auf Grundlage der erworbenen Kompetenzen.

## **2. Qualifikationsziele des Masterstudiengangs Chemie**

Studiengang übergreifendes Ziel ist der Erwerb einer weiterführenden Ausbildung in Chemie. Das Masterstudium mit der Möglichkeit der Schwerpunktbildung vermittelt den Studierenden die dafür erforderlichen Kenntnisse und Fähigkeiten. Absolventinnen und Absolventen erlangen die Fähigkeit, die Eigenschaften chemischer Verbindungen tiefer gehend zu überblicken und Methoden zur Lösung anspruchsvoller Problemstellungen aktueller Forschungsgebiete selbständig anzuwenden.

Erklärtes Ziel ist es die Studierenden zu verantwortlichem Handeln, selbständigem Denken und eigenständigem Forschen zu befähigen.

Das breit angelegte, forschungsorientierte, wissenschaftliche Masterstudium bereitet auf die vielfältigen Tätigkeitsfelder eines Chemikers / einer Chemikerin in Industrie, an Forschungsinstituten, Hochschulen, im Öffentlichem Dienst und andere mehr vor.

Da sich die Methoden und Verfahren, aber auch die Tätigkeitsbereiche ständig wandeln, ist es das nachdrückliche Ziel des Studiengangs, den Studierenden die dazu erforderlichen Kenntnisse so zu vermitteln, dass sie sich nach Beendigung des Studiums schnell mit neuen Entwicklungen vertraut machen, in neue Gebiete einarbeiten und selbst zu weiteren Entwicklungen ihres Fachgebiets in Wissenschaft und Technik beitragen können.

Der Masterstudiengang ist stark forschungsorientiert und baut konsekutiv auf dem sechssemestrigen Bachelorstudiengang Chemie auf.

Es wird begrüßt, wenn ein Teil des Studiums im Ausland absolviert wird. Auslandsaufenthalte während des Masterstudiums werden von der Ruprecht-Karls Universität daher nachdrücklich unterstützt.

### 3. Überblick über den Studiengang und Modellstudienplan

#### Pflichtmodule (83 LP)

	Modulname	LV	SWS	Empf. Sem.	LP
Spek	Angewandte spektroskopische Methoden	Vorlesung mit Übungen	4	1- 3	5
AC_F	Moderne Aspekte der Anorganischen Chemie	Forschungspraktikum/ Seminar	--	1 - 3	10
OC_F	Organisches Forschungspraktikum	Forschungspraktikum/ Seminar	--	1 - 3	10
PC_F	Phys.-Chem. Forschungspraktikum	Forschungspraktikum/ Seminar	--	1 - 3	10
MP	Mündliche Abschlussprüfung	Masterprüfung	--	3	18
MA	Masterarbeit	Masterarbeit	--	4	30

#### Wahlpflichtmodule (27 LP)

Es muss gewählt werden:

- 1) Je zwei Module aus AC-Z1-6, OC-Z1-6 und PC-Z1-6
- 2) Je ein Modul AC\_S, OC\_S und PC\_S oder entsprechend ein weiteres Z-Modul

	Modulname	LV	SWS	Empf. Sem.	LP
AC-Z1	Koordinationschemie und Supramolekulare Chemie	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC-Z2	Hauptgruppenelement-chemie	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC-Z3	Physikalische und theoretische Methoden der Anorganischen Chemie	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC-Z4	Bioanorganische Chemie	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC-Z5	Reaktivität Metallorganischer Komplexe und Molekulare Katalyse	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC-Z6	Chemie der Materialien	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
AC_S	Semesterweise wechselndes Angebot	Vorlesung	2	1-3	3
OC-Z1	Organische Materialien	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC-Z2	Heterozyklen	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC-Z3	Metallvermittelte organische Synthesen	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC-Z4	Aromaten und Heteroaromaten	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC-Z5	Stereochemie	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC-Z6	Synthese und Retrosynthese	Zyklusvorlesung	2	1-3	3
OC_S	Semesterweise wechselndes Angebot	Vorlesung	2	1-3	3

PC-Z1	Statistische Theorie der Materie	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC-Z2	Einführung in die Quantentheorie	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC-Z3	Aufbau der Materie und Spektren	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC-Z4	Molekulare Kinetik	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC-Z5	Oberflächenchemie	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC-Z6	Biophysikalische Chemie	Zyklusvorl./Übungen	2 + 2	1-3	3
PC_S	Semesterweise wechselndes Angebot	Vorlesung	2	1-3	3

### **Wahlmodule / Vertiefungsfach (10 LP)**

Aus den angebotenen Vertiefungsfächern muss eines ausgewählt werden, in welchem Lehrveranstaltungen im Umfang von 10 LP zu absolvieren sind.

Für Studierende mit anderem Vorabschluss als B. Sc. (Chemie) können hier Vorgaben durch den Prüfungsausschuss gemacht werden.

Aus folgenden Vertiefungsfächern kann gewählt werden:

- Bioanorganische Chemie
- Biochemie
- Biophysikalische Chemie
- Homogene Katalyse
- Molekulares Modellieren
- Radiochemie
- Reaktive Strömungen
- Theoretische Chemie

## II. Modulbeschreibungen

### Pflichtmodule

#### **Modul Spek: „Angewandte Spektroskopische Methoden“**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Kenntnisse zu modernen spektroskopischen Analysemethoden (z.B. Multikern- und paramagnetische NMR-, EPR-, UV-VIS-, Schwingungs-Spektroskopie, Oberflächen-spektroskopie) werden erworben. Das Modul besteht aus Vorlesungen und Übungen auf den verschiedenen Gebieten.

Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, die zu einer chemischen Fragestellung passende spektroskopische Untersuchungsmethode zu identifizieren und damit erhaltene Resultate zu interpretieren.

*b) Lehrformen:*

Vorlesung und Übungen mit Spektrenauswertungen

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Abschlussklausur

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 5 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Klausur gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 150 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester (Vorlesungszeit)

#### **Modul AC\_F: Praktikum/Seminar Moderne Aspekte der Anorganischen Chemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Fortgeschrittene Kenntnisse und Fertigkeiten der präparativ-synthetischen und analytischen modernen anorganischen Chemie werden erworben. Auch das Zusammenfassen wissenschaftlicher Ergebnisse wird, ebenso wie die wissenschaftliche Argumentation und Diskussion, geübt. Das Modul besteht aus einem Praktikum und einem begleitenden Seminar.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls beherrschen die Studierenden anspruchsvolle Experimentier- und Analysetechniken der anorganischen Chemie und können selbständig die Erfolgskontrolle und Auswertung der Experimente durchführen. Weiterhin können sie die Ergebnisse der eigenen Forschungsarbeit protokollieren und sowohl schriftlich als auch mündlich diskutieren.

*b) Lehrformen:* Praktikum, Seminar

Das Praktikum wird von einem einstündigen Seminar begleitet, in dem den Studierenden aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen vermittelt werden.

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master)

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Grundlage für die Vergabe von Leistungspunkten ist die Abschlussarbeit, die von jedem Studierenden anzufertigen ist sowie die Präsentation der Ergebnisse der eigenen Arbeiten und deren Einordnung.

f) *Leistungspunkte und Noten:* Es werden 10 Leistungspunkte vergeben.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Semester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

Praktikum: 6 Wochen

## **Modul OC\_F: Organisches Forschungspraktikum**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die methodischen und theoretischen Kenntnisse der präparativen organischen Chemie werden erworben und abgerundet. Es werden Einblicke in das selbständige wissenschaftliche Arbeiten an aktuellen Problemen der Forschung im Bereich der organischen Chemie gegeben. Dies bezieht die Planung der Vorgehensweise für die Untersuchung neuartiger wissenschaftlicher Fragestellungen mit ein. Dazu erfolgt eine Zuordnung zu Doktoranden entsprechender Arbeitsgruppen. Im zugehörigen Seminar werden aktuelle Fragestellungen anhand von zugeteilten Vortragsthemen behandelt. Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls haben die Studierenden vertiefte Kenntnisse in einem Forschungsschwerpunkt der organischen Chemie. Sie beherrschen anspruchsvolle Experimentier- und Analysetechniken der organischen Chemie und können selbständig die Erfolgskontrolle und Auswertung der Experimente durchführen. Weiterhin können sie die Ergebnisse der eigenen Forschungsarbeit protokollieren und sowohl schriftlich als auch mündlich diskutieren.

b) *Lehrformen:* Forschungspraktikum, Seminar

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Vorlage eines schriftlichen Forschungsberichts und die Präsentation der Ergebnisse im jeweiligen Arbeitsgruppenseminar.

f) *Leistungspunkte und Noten:* Es werden 10 Leistungspunkte vergeben.

Die Note des Moduls wird aus der Bewertung des Forschungsberichtes und der Präsentation mit anschließender Diskussion im jeweiligen Arbeitsgruppenseminar gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Semester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

Praktikum: 6 Wochen, ganztägig

Seminar: 1-stündig, jeweils in der Vorlesungszeit an vorgegebenen Terminen.

## **Modul PC\_F: Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Das Praktikum dient der Erweiterung und Vertiefung der im Bachelor-Studiengang erworbenen Kenntnisse und experimentellen Fertigkeiten. Ziel ist es, den Umgang mit



komplexeren modernen physikalisch-chemischen Apparaturen zu erlernen und zu üben, das Verständnis für anspruchsvolles experimentelles physikalisch-chemisches Arbeiten zu fördern sowie die zugehörigen theoretischen Grundlagen nachhaltig zu vertiefen. Ein integraler Bestandteil ist das Seminar zum Praktikum, in dem sich jeder Teilnehmer ein vorgegebenes Themengebiet der aktuellen Physikalischen Chemie eigenständig erarbeitet und im Rahmen eines wissenschaftlichen Vortrages präsentiert. Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls beherrschen die Studierenden den Umgang mit komplexen physikalisch-chemischen Apparaturen und das selbstständige experimentelle Arbeiten damit. Sie verfügen über die Fertigkeit, experimentelle Untersuchungen im Bereich der wissenschaftlichen Forschung und Entwicklung selbständig zu planen und eigenständig durchzuführen, sowie die Ergebnisse zu interpretieren und sowohl verbal als auch schriftlich zu präsentieren. Insbesondere verfügen sie über die Fähigkeit, Informationen zur wissenschaftlichen Problemlösung selbständig zu identifizieren, zu beschaffen und kritisch zu analysieren.

*b) Lehrformen:* Praktikum, Seminar

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten ist die erfolgreiche Durchführung der praktischen Forschungsarbeit, die Anfertigung eines schriftlichen Forschungsberichts sowie die Präsentation der Forschungsarbeit im Seminar.

*f) Leistungspunkte und Noten:* Es werden 10 Leistungspunkte vergeben.

Die Note des Moduls wird aus der Note für die praktische Forschungsarbeit, den Forschungsbericht und der Seminarleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:*

Praktikum und Seminar in jedem Semester. Das Praktikum wird auch als Blockkurs in der vorlesungsfreien Zeit angeboten.

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

## **Modul MP: Mündliche Abschlussprüfung**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Vertiefte Kenntnisse der Anorganischen, Organischen und Physikalischen Chemie werden abgefragt. Moderne Entwicklungen des Faches, wie sie z.B. in Vortragsveranstaltungen der Chemischen Gesellschaft Heidelberg oder des Lieseberg-Kolloquiums aufgezeigt werden, sollen verstanden werden.

Die Studierenden erkennen die übergreifenden Zusammenhänge der Teilgebiete der Chemie und können diese fachlich korrekt formulieren und diskutieren.

*b) Lehrformen:* entfällt

*c) Voraussetzung für Teilnahme:*

Alle Module des Masterstudiengangs Chemie müssen erfolgreich absolviert sein (außer Modul Masterarbeit).

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Die mündliche Abschlussprüfung wird als Kollegialprüfung vor drei Prüfern, die die Fächer Anorganische, Organische und Physikalische Chemie repräsentieren müssen, als Einzelprüfung abgelegt. In dieser Prüfung soll der Prüfling nachweisen, dass er einen guten Überblick über das Fach hat und die Zusammenhänge des Prüfungsgebietes und der Lehrinhalte der einzelnen Module erkennt. Gegenstand der mündlichen Abschlussprüfung sind auch Vorträge z. B. aus den Vortragsveranstaltungen der Chemischen Gesellschaft Heidelberg. Jeder Prüfling gibt dabei mindestens drei Vorträge an. Die Prüfung dauert etwa 60 Minuten.

*f) Leistungspunkte und Noten:* Es werden 18 Leistungspunkte vergeben.

*g) Häufigkeit des Angebots:*

In jedem Semester werden mindestens zwei Prüfungstermine angeboten

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 540 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul MA: Masterarbeit**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Ein Arbeitsthema aus einem Teilgebiet der Chemie soll innerhalb der vorgegebenen Zeit in der wissenschaftlichen Arbeit selbstständig nach wissenschaftlichen Methoden bearbeitet werden. Das Ergebnis wird schriftlich in der Masterarbeit, die eine Zusammenfassung enthält, festgehalten.

Die Studierenden sind in der Lage, sich mit ihrem im Studium erworbenen Wissen ein neues (interdisziplinäres) Thema eigenständig zu erarbeiten und die notwendige Literaturrecherche durchzuführen. Sie können weitgehend selbstständig moderne Methoden der Chemie einsetzen und die Experimente planen, aufbauen, durchführen und dokumentieren. Die Ergebnisse ihrer Untersuchungen können sie eigenständig auswerten, schriftlich formulieren und kritisch diskutieren.

*b) Lehrformen:* entfällt

*c) Voraussetzung für Teilnahme:*

Alle studienbegleitenden Teilprüfungen der Lehrveranstaltungs-Module müssen erfolgreich absolviert sein. Das Thema der Masterarbeit kann erst nach dem Modul MP "Mündliche Abschlussprüfung" ausgegeben werden.

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Die Bewertung erfolgt durch zwei Prüfer, der Betreuer soll der erste Prüfer sein. **Das Modul muss spätestens vier Wochen nach erfolgreichem Abschluss des Moduls MP "Mündliche Abschlussprüfung" begonnen werden.**

*f) Leistungspunkte und Noten:* Es werden 30 Leistungspunkte vergeben.

*g) Häufigkeit des Angebots:* Fortlaufend

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 900 Stunden.

*i) Dauer:*

6 Monate, in Ausnahmefällen auf Antrag 3 Monate Verlängerung

## Wahlpflichtmodule

Im Wahlpflichtbereich müssen insgesamt 27 LP eingebracht werden, wobei auf die Bereiche Anorganische, Organische und Physikalische Chemie jeweils 9 LP entfallen.

### Wahlpflichtmodule Anorganische Chemie

Aus dem Wahlpflichtangebot der Anorganischen Chemie müssen 3 Module absolviert werden. Unter den gewählten Modulen müssen zwei Zyklusvorlesungen (AC-Z) sein. Das dritte Modul kann wahlweise eine weitere Zyklusvorlesung oder eine Spezialvorlesung (AC-S) sein.

#### Modul AC-Z1: Koordinationschemie und Supramolekulare Chemie

##### *a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Kenntnisse zu Reaktionstypen und Eigenschaften (z.B. Magnetismus, optische Eigenschaften) von Koordinationsverbindungen. Prinzipien der Supramolekularen Chemie. Herstellung und Eigenschaften ausgewählter supramolekularer Verbindungen wie z.B. metallorganischen Netzwerke (MOF - metal organic framework) und Einzelmolekülmagneten werden vermittelt.

Die Studierenden können Reaktivitäten und physikalische Eigenschaften von Koordinationsverbindungen auf einem fortgeschrittenen Niveau erklären.

##### *b) Lehrformen: Vorlesung*

##### *c) Voraussetzung für Teilnahme: keine*

##### *d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Master).*

##### *e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten* Bestehen der Klausur zur Vorlesung

##### *f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

##### *g) Häufigkeit des Angebots: in jedem Wintersemester*

##### *h) Arbeitsaufwand: Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.*

##### *i) Dauer: 1 Semester*

#### Modul AC-Z2: Hauptgruppenelementchemie

##### *a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Besonders wichtige Aspekte der Hauptgruppenelementchemie sind Gegenstand dieses Moduls. Die Studierenden lernen Fragestellungen aus der Grundlagenforschung (z.B. Bindungsmodelle) kennen und wenden ihre erworbenen Kenntnisse auf aktuelle Entwicklungen, beispielsweise in den Bereichen Halbleitermaterialien, Batterien und Katalyse an. Schließlich werden Hauptgruppenelement-Cluster und Modelle zum Verständnis ihrer speziellen Bindungssituation behandelt.

Die Studierenden können Reaktivitäten und physikalische Eigenschaften von Hauptgruppenelement-Verbindungen auf einem fortgeschrittenen Niveau erklären.

##### *b) Lehrformen: Vorlesung*

##### *c) Voraussetzung für Teilnahme: keine*

##### *d) Verwendbarkeit des Moduls: Chemie (Master).*

##### *e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul AC-Z3: Physikalische und theoretische Methoden der Anorganischen Chemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Grundlagen von spektroskopischen und anderen analytischen Methoden und ihre Anwendungen, molekulares Modellieren von Struktur und Eigenschaften molekularer Verbindungen, Grundlagen und Anwendung von Magnetismus werden vermittelt.

Die Studierenden können durch Anwendung gruppentheoretischer Methoden Bindungen über Molekülorbitale beschreiben und optische sowie Schwingungsspektren interpretieren. Sie kennen verschiedene Methoden zur Modellierung molekularer Verbindungen und können magnetische Eigenschaften verschiedener Stoffe modellhaft beschreiben.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul AC-Z4: Bioanorganische Chemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die Vorlesung behandelt die Rolle von anorganischen Elementen, insbesondere von Metallionen, in biologischen Systemen. Insbesondere soll ein grundlegendes Verständnis der Struktur und Funktionsweise ausgewählter Metalloproteine (z.B. sauerstofftransportierende Proteine wie Hämoglobin) und Metalloenzyme vermittelt werden. Ein weiterer Aspekt ist die Anwendung von Metallverbindungen als Medikamente (z.B. Platinkomplexe gegen Krebs) und in der medizinischen Diagnostik.

Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, Aufbau, Reaktivität und Funktionsweise von Metalloenzymen zu erklären und die Strategien zur Herstellung von Biokonjugaten zu beschreiben. Weiterhin können sie deren medizinische Anwendungen (Diagnostik und Therapeutika) zusammenfassen.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul AC-Z5: Reaktivität Metallorganischer Komplexe und Molekulare Katalyse**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die Vorlesung beschäftigt sich mit Bindungsmodellen und Reaktionsmechanismen metallorganischer Komplexe.

Die Studierenden können nach Abschluss des Moduls die Eigenschaften und Reaktionstypen metallorganischer Komplexe erklären und können dies auf aktuelle Entwicklungen und Anwendungen im Gebiet der molekularen Katalyse übertragen.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul AC-Z6: Chemie der Materialien**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Dieses Modul vermittelt Kenntnisse über Synthese, Aufbau und Eigenschaften wichtiger Festkörper. Eingeschlossen sind besonders interessante und aktuelle Anwendungsgebiete von Funktionsmaterialien z.B. Solarzellen, Feldeffekt-Transistoren, Licht-emittierende Dioden, Speicher-materialien, Wirt-Gast-Chemie in porösen Materialien, elektronische und elektro-optische Bauteile und generell Nanotechnologie.

Die Studierenden können nach Abschluss des Moduls die Synthesestrategien und Eigenschaften von Materialien auf einem fortgeschrittenen Niveau erklären.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul AC-S: Spezialvorlesung Anorganische Chemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Dieses Modul vermittelt Kenntnisse in einem aktuellen Teilgebiet der anorganischen Chemie. Es stehen semesterweise wechselnde Themen zur Verfügung, die im Vorlesungsverzeichnis ausgewiesen werden.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Wird zu Beginn der Veranstaltung von den Dozierenden bekannt gegeben.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Semester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Wahlpflichtmodule Organische Chemie**

Aus dem Wahlpflichtangebot der Organischen Chemie müssen 3 Module absolviert werden. Unter den gewählten Modulen müssen zwei Zyklusvorlesungen (OC-Z) sein. Das dritte Modul kann wahlweise eine weitere Zyklusvorlesung oder eine Spezialvorlesung (OC-S) sein.

### **Modul OC-Z1: Organische Materialien**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die Grundlagen und ausgewählte Beispiele der Synthese, der Struktur, der Eigenschaften und der Anwendung organischer Materialien werden behandelt. Dabei werden sowohl molekulare als auch polymere Systeme behandelt. Das Hauptaugenmerk fällt dabei auf halbleitende organische Materialien.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, Bezüge zu Grundlagen und Anwendungen organischer Materialien die Mensch, Gesellschaft, Umwelt und Technologie umfassen, herzustellen. Sie können ihre Kenntnisse bezüglich verschiedener Strukturklassen und Funktionen organischer Materialien anwenden und ihr erworbenes Wissen zur Entwicklung empirischer Regeln vernetzen.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-Z2: Heterozyklen**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die Grundlagen der Synthese, der Struktur und der Eigenschaften sowie die Bedeutung von heterozyklischen organischen Verbindungen werden behandelt. Die Aspekte Nomenklatur, Chemilumineszenz, energetische Materialien, Naturstoffe, Verwendung von Heterozyklen in Pharmaka und Agrochemikalien, Toxizität, Chemilumineszenz, Liganden für Metallkomplexe, Katalyse, Acidität sowie thermische und thermodynamische Stabilität stellen Bezüge zu Mensch, Gesellschaft, Umwelt und Industrie her. Reaktionsklassen werden besprochen und empirische Regeln vermittelt.

Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, Heterozyklen zu klassifizieren und deren Synthesewege, Reaktivität und Eigenschaften zu erläutern.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-Z3: Metallvermittelte organische Synthesen**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Kenntnisse zu den großen Klassen der metallorganischen Verbindungen und Reaktionen werden in diesem Modul erworben. Dabei wird der Anwendung in der organischen Synthese besondere Aufmerksamkeit gewidmet. Übergangsmetall-katalysierte Reaktionen bilden einen Schwerpunkt. Das Modul besteht aus einer Vorlesung und Übungen im Rahmen der Vorlesung zur Vertiefung der erworbenen Kenntnisse und Anwendung auf Reaktionsbeispiele.

Nach erfolgreicher Teilnahme am Modul OC-Z3 kennen die Studierenden die wichtigsten metallvermittelten organischen Reaktionen, insbesondere Nickel- und Palladium-katalysierte C-C- und C-X-Verknüpfungsreaktionen, C-H-Aktivierung, Hydrierungen

inkl. enantioselektiver Hydrierreaktionen, Hydroformylierung, Konzepte der dynamischen kinetischen Racematspaltung, Reaktionen mit Fischer- und Schrock-Carbenen, Alken- und Alkin-Metathese, Allylkomplexe und Eisen in der organischen Synthese und sind in der Lage Reaktionen zu planen, Problemstellungen zu erkennen und zu lösen. Die Studierenden können Strategien zur Untersuchung und Aufklärung metallvermittelter Reaktionen entwickeln. Die Studierenden sind in der Lage wissenschaftliche Sachverhalte vor einer Gruppe zu präsentieren und zu diskutieren.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-Z4: Aromaten und Heteroaromaten**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Der Aromatizitätsbegriff wird anhand ausgesuchter Beispiele erklärt und diskutiert. Dabei wird auf die Entwicklung dieses Begriffs in Form von Theorien eingegangen; von der ursprünglichen Begriffsbildung bis hin zu aktuellen Definitionen und Kriterien. Mit diesem Wissen werden anschließend die [n]Annulene und deren Eigenschaften besprochen. In diesem Zusammenhang werden Synthesestrategien zu dieser Verbindungsklasse an Beispielen nähergebracht. Ein weiteres Unterkapitel behandelt die Heteroaromaten, hauptsächlich 5- und 6-gliedriger Ringe. Hier ist das Lernziel die Unterschiede und Gemeinsamkeiten zu den entsprechenden carbocyclischen Verbindungen zu verstehen. Des Weiteren werden Synthesen und Eigenschaften ausgedehnter aromatischer und heteroaromatischer Systeme (planar sowie gekrümmt), Fullerene und Kohlenstoffnanoröhren vorgestellt, ebenso wie Möbius-Aromaten. Abschließend widmet sich ein erheblicher Teil (ca. 1/3) der Vorlesung der Verwendung aromatischer Verbindungen in der organischen Elektronik.

Es werden Grundprinzipien von organischen Feldeffekttransistoren (OFETs), organischen Leuchtdioden (OLEDs) und organischen Solarzellen (OSCs) an ausgewählten Beispielen erläutert.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, Verbindungen bezüglich ihres Aromatizitäts-Charakters nach heutigem Kenntnisstand einzuordnen. Darüber hinaus verfügen die Studierenden über Grundlagen der organischen Elektronik (Aufbau und Funktionsprinzip von OFET-, OSC- und OLED-Bauteilen) und können anhand notwendiger und hinreichender Kriterien abschätzen, ob eine organische Verbindung potentiell interessant für die Verwendung in der organischen Elektronik ist.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).



e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-Z5: Stereochemie**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Es werden die Grundlagen der Beschreibung von dreidimensionalen Molekülstrukturen organischer Verbindungen erworben. Zusätzlich werden die wichtigsten Arbeitstechniken der Trennung, Charaktisierung und selektiven Synthese von Stereoisomeren vermittelt und an Beispielen vertieft. Das Modul besteht aus einer Vorlesung und Übungen im Rahmen der Vorlesung zur Vertiefung der erworbenen Kenntnisse und Anwendung auf Reaktionsbeispiele.

Nach erfolgreicher Teilnahme am Modul OC-Z5 kennen die Studierenden die Nomenklatur zur Beschreibung stereogener Verbindungen, das Topizitätskonzept, physikalische Eigenschaften chiraler Verbindungen, die Charakterisierung und Bestimmung der Absolutkonfiguration von Enantiomeren, supramolekulare Verbindungen und ihre Host-Guest-Wechselwirkung und können diese auf die verschiedensten Stoffklassen anwenden und Problemstellungen in der Stereochemie erkennen, lösen und diskutieren. Zudem kennen die Studierenden die wichtigsten Klassen der asymmetrischen Synthese und können dieses Wissen bei der Planung neuer Reaktionssequenzen anwenden und einsetzen.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-Z6: Synthese und Retrosynthese**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Es werden grundlegende Kenntnisse der Retrosynthese und Synthese komplexer Funktionsverbindungen und Naturstoffe erworben.

Qualifikationsziel ist das Verständnis und die selbständige Erarbeitung von Syntheserouten.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul OC-S: Spezialvorlesung Organische Chemie**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Die Studierenden lernen auf einem fortgeschrittenen Niveau Kenntnisse in einem aktuellen Teilgebiet der organischen Chemie. Es stehen semesterweise wechselnde Themen zur Verfügung, die im Vorlesungsverzeichnis ausgewiesen werden.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Wird zu Beginn der Veranstaltung von den Dozierenden bekannt gegeben.

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Semester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

## **Wahlpflichtmodule Physikalische Chemie**

Aus dem Wahlpflichtangebot der Physikalischen Chemie müssen 3 Module absolviert werden. Unter den gewählten Modulen müssen zwei Zyklusvorlesungen (PC-Z) sein. Das dritte Modul kann wahlweise eine weitere Zyklusvorlesung oder eine Spezialvorlesung (PC-S) sein.

### **Modul PC-Z1: Statistische Theorie der Materie**

#### *a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Wahrscheinlichkeit, Entropie, Zustandssummen, Hauptsätze der Thermodynamik, Spezifische Wärme, Ideale Quantengase.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls die theoretischen Verfahren zur statistischen Beschreibung von Vielteilchen-Systemen verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden Experimente zur Thermodynamik selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-Z2: Einführung in die Quantentheorie**

#### *a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Physikalische Begriffe der Klassischen Mechanik, Formalismus der Quantenmechanik, eindimensionale Quantensysteme: Harmonischer Oszillator, Quantenmechanik in drei Raumdimensionen: Wasserstoff-Atom, Elektronenspin, Mehrelektronensysteme, Elektronische Bewegung in Molekülen u. Molekülbindung.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls komplexere quantenmechanische Phänomene verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden Experimente zur Quantenmechanik selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-Z3: Aufbau der Materie und Spektren**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

In der Vorlesung werden vertiefende Kenntnisse der Licht-Materie Wechselwirkungen und Spektrallinien vermittelt. Beginnend mit der Rotations- und Rotations-Schwingungsspektroskopie werden bis zur Elektronen-Spektroskopie von Mehrelektronen-Atomen und Molekülen moderne Spektroskopieverfahren und ihre Anwendungen auf quantenmechanischer Basis behandelt.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls die theoretischen Grundlagen moderner Spektroskopieverfahren verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden spektroskopischen Experimente selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-Z4: Molekulare Kinetik**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

In der Vorlesung werden vertiefende Kenntnisse aus dem Bereich der theoretischen Beschreibung und experimentellen Untersuchung der molekularen Dynamik und Kinetik von chemischen Elementarreaktionen und Reaktionsmechanismen vermittelt: Mathematische und quantenchemische Grundlagen zur Beschreibung der chemischen Reaktionskinetik und Dynamik, experimentelle Methoden der molekularen Kinetik und Dynamik, Elementarreaktionen und Reaktionsmechanismen, statistische und dynamische Theorien zur Berechnung von Geschwindigkeitskonstanten chemischer Elementarreaktionen.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls die Grundlagen der modernen molekularen Reaktionskinetik und Dynamik verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden reaktionskinetischen Experimente selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Klausurnote gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-Z5: Oberflächenchemie**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

In der Vorlesung werden vertiefende Kenntnisse der modernen Oberflächenchemie vermittelt: Mathematische Beschreibung von Oberflächen- und Adsorbat-Strukturen, theoretische Beschreibung und experimentelle Verfahren zur Untersuchung der Kinetik und Thermodynamik von Adsorption, Desorption und Oberflächenreaktionen, Mechanismen der heterogenen Katalyse (z. B. Ammoniaksynthese, Autoabgas-Katalyse), moderne spektroskopische Methoden zur Oberflächen- und Adsorbat-Charakterisierung und zur Untersuchung von heterogen katalysierten Reaktionsprozessen auf Oberflächen.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls die theoretischen und experimentellen Grundlagen der Oberflächenchemie verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden Experimente zur Oberflächenchemie selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

b) *Lehrformen:* Vorlesung

c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* in jedem Wintersemester

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

i) *Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-Z6: Biophysikalische Chemie**

a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Grundlagen der Membranbiophysik und Nervenleitung, Biophysik des Kerns, Photosynthese, Einzelmolekül-Biophysik.

Die Studierenden können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls die Grundlagen der modernen Biophysikalischen Chemie verbal und analytisch formulieren. Sie besitzen weiterhin die Fähigkeit, die Resultate der im Rahmen des Moduls PC\_F (Physikalisch-Chemisches Forschungspraktikum) auszuführenden biophysikalischen Experimente selbständig zu analysieren, zu interpretieren und zu quantifizieren.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Bestehen der Klausur zur Vorlesung

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Sommersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

### **Modul PC-S: Spezialvorlesung Physikalische Chemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Dieses Modul vermittelt spezielle Kenntnisse in einem aktuellen Teilgebiet der Physikalischen und Biophysikalischen Chemie. Es stehen semesterweise wechselnde Themen zur Verfügung, die im Vorlesungsverzeichnis ausgewiesen werden. Die Studierenden besitzen nach erfolgreichem Abschluss des Moduls Kenntnisse auf einem ausgesuchten Teilgebiet der Physikalischen bzw. Biophysikalischen Chemie und haben die Fähigkeit erworben, die in den Zyklusvorlesungen vermittelten Kenntnisse auf aktuelle Forschungsthemen anzuwenden.

*b) Lehrformen:* Vorlesung

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*  
Wird zu Beginn der Veranstaltung von den Dozierenden bekannt gegeben.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 3 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* in jedem Semester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 90 Stunden.

*i) Dauer:* 1 Semester

## Wahlmodul / Vertiefungsfach

Aus den angebotenen Vertiefungsfächern muss eines ausgewählt werden, in welchem dann Lehrveranstaltungen im Umfang von 10 LP einzubringen sind.

Für Studierende mit einem anderen grundständigen Abschluss als ein 100 % Bachelorstudiengang Chemie können hier Vorgaben durch den Prüfungsausschuss gemacht werden.

### Vertiefungsfach Bioanorganische Chemie

#### a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Im Rahmen dieses Moduls werden fortgeschrittene Kenntnisse im Bereich der Bioanorganischen Chemie vermittelt. Die Bioanorganische Chemie ist ein interdisziplinäres Forschungsgebiet, dessen Ziel die Aufklärung der Funktion und Wirkung klassisch-anorganischer Elemente (insbesondere Metalle) in biologischen Systemen ist. Behandelt werden unter anderem die Rolle von Metallionen in Proteinen und speziell Enzymen und Anwendungen von Metallverbindungen als Diagnostika und Medikamente. Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls sollen die Studierenden ein grundlegendes Verständnis der Funktionen und Wirkungen klassisch-anorganischer Elemente (v.a. Metallionen) in Biosystemen erworben haben. Sie sollen darüber hinaus in der Lage sein, ein Forschungsthema selbständig zu bearbeiten, dabei die Thematik experimentell und theoretisch zu durchdringen und die Ergebnisse im Rahmen eines Vortrags darzustellen.

#### b) *Lehrformen:*

Vorlesung (2 SWS, 3 LP), 4-wöchiges Forschungspraktikum (7 LP)

#### c) *Voraussetzung für Teilnahme:* keine

d) *Verwendbarkeit des Moduls:* Insbesondere Chemie (Master). Generell einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter Studiengänge.

#### e) *Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Erfolgreiche Teilnahme an der Klausur zur Vorlesung „Bioanorganische Chemie“ und am Forschungspraktikum

#### f) *Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus den Prüfungsleistungen gebildet.

g) *Häufigkeit des Angebots:* Die Vorlesung „Bioanorganische Chemie“ wird in jedem Sommersemester angeboten. Das Forschungspraktikum wird im Sommer- und Wintersemester angeboten.

h) *Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

i) *Dauer:* 1-2 Semester. Reihenfolge Vorlesung und Forschungspraktikum beliebig

### Vertiefungsfach Biochemie

#### a) *Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Im Rahmen dieses Moduls werden vertiefte Kenntnisse im Bereich der modernen Biochemie und im Speziellen der Strukturbiochemie vermittelt. Das Modul besteht aus einem Blockseminar mit Übungen zur Röntgenstrukturanalyse (2 SWS) sowie einem 6-wöchigen Forschungspraktikum und baut auf dem Wahlmodul Biochemie für Bachelorstudenten (BC WI und BC WII) auf.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des Moduls Biochemie sowohl theoretisch und experimentell mit aktuellen Methoden und Problematiken der Biochemie vertraut sein und darüber hinaus in der Lage sein, im Rahmen eines Forschungspraktikums ein Thema selbstständig zu bearbeiten, eine anspruchsvolle wissenschaftliche Thematik zu durchdringen und die Ergebnisse im Rahmen eines Vortrags darzustellen.

*b) Lehrformen:* Blockseminar mit Übungen (2 SWS, im Sommersemester) und ein 6-wöchiges Forschungspraktikum.

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* Erfolgreich absolvierte Bachelor-Module Biochemie WI und WII oder äquivalente Qualifikationen.

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

Einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter naturwissenschaftlicher Studiengänge. Erwerbung vertiefter Kenntnisse in die aktuelle Forschung der Biochemie.

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten ist die Teilnahme am Blockseminar mit Übungen und die erfolgreiche Durchführung des Praktikums mitsamt einem abschließenden Fachvortrag.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls ist die Durchschnittsnote aus dem Blockseminar, den praktischen Leistungen aus dem Praktikum und dem Fachvortrag.

*g) Häufigkeit des Angebots:*

Jährlich

*h) Arbeitsaufwand:*

Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:* 1-2 Semester

## **Vertiefungsfach Biophysikalische Chemie**

### **Variante 1**

„Zyklusvorlesung Biophysikalische Chemie, PC-Z6“ (V2, 3 LP), Sommersemester

„Bioactive Interfaces“ (V2, 3 LP), Sommersemester

Seminar „Mechanobiology“ (S2, 3 LP), Wintersemester

Seminar „GlycoSciences“ (S1, 1 LP), Wintersemester

### **Variante 2**

Eine Vorlesung V2 (s.o.) plus 4-wöchiges Forschungspraktikum (7 LP)

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Es werden grundlegende Kenntnisse der biophysikalischen Chemie vermittelt.

Das Modul vermittelt einen Einblick in das interdisziplinäre Forschungsfeld der biophysikalischen Chemie. Der Schwerpunkt dieses Moduls liegt auf den physikalischen und chemischen Grundlagen der Zellbiologie insbesondere von Säugetierzellen und –geweben sowie ihrer methodischen Analyse durch vielfältige moderne biophysikalische Techniken. Dieses Wissen wird sowohl grundlagenorientiert als auch in ihren Anwendungen vermittelt.

Das Modul besteht aus den Vorlesungen „Biophysikalische Chemie“ (V2) und „Bioactive Interfaces“ (V2, in englischer Sprache) sowie den Seminaren „Mechanobiology“ (S2, in englischer Sprache) und „GlycoScience“ (S1, in englischer Sprache).



Alternativ zu den genannten Anforderungen kann eine der beiden Vorlesungen (V2) gehört und ein 4-wöchiges Forschungspraktikum durchgeführt werden.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls VF „Biophysikalische Chemie“ sollen die Studierenden in einem interdisziplinären Umfeld chemische Fragestellungen identifizieren und Lösungsansätze formulieren können. Sie verfügen über zellbiologische Grundkenntnisse und können geeignete Experimente zur biophysikalischen Charakterisierung eines definierten Zellverhaltens planen.

*b) Lehrformen:*

Vorlesung Biophysikalische Chemie (3 LP), Vorlesung Bioactive Interfaces (3 LP), Seminar Mechanobiology (3 LP), Seminar GlycoScience (1 LP), Forschungspraktikum (7 LP, alternativ)

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Wird zu Beginn der Veranstaltung von den Dozierenden bekannt gegeben.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus den Prüfungsleistungen gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:*

Jährlich, Wintersemester/Sommersemester

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:*

Zwei Semester, die Lehrveranstaltungen können unabhängig voneinander besucht werden.

## **Vertiefungsfach Homogene Katalyse**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Grundlagen und Anwendungen der Homogenkatalyse für organisch-synthetische Transformationen werden vorgestellt. Die Reaktionsmechanismen werden aus Markierungsexperimenten, Kinetiken, beobachteten oder isolierten Intermediaten, Selektivitäten, dem Einfluss der Reaktionsbedingungen sowie aus quantenchemischen Modellrechnungen hergeleitet. Es wird ein Zusammenhang hergestellt zwischen einer stärker strukturorientierten Anorganischen Chemie, der an elektronischen Zuständen und Energien interessierten Quantenchemie, einer oft kinetisch ausgerichteten Physikalischen Chemie und einer meist produktorientierten Organischen Chemie. Intermediate werden strukturell und energetisch bewertet und eingeordnet. Das Verständnis von Reaktionsmechanismen wird an ausgewählten Beispielen mit hoher akademischer oder industrieller Wichtigkeit entwickelt (Cobalt-katalysierte Trimerisierung und Nickel-katalysierte Tetramerisierung von Alkinen, Titan- und Osmium-katalysierte Oxidation von Alkenen, Ruthenium-, Molybdän- und Wolfram-katalysierte Alkenmetathese, Palladium- und Ruthenium-katalysierte Eninmetathese, Ruthenium- und Iridium-katalysierte Hydrierung von Ketonen und von Alkenen, Rhodium- und Iridium-katalysierte Carbonylierung von Methanol zu Essigsäure, Rhodium-katalysierte Hydroformylierung von Alkenen zu Aldehyden, Hydraminierung von C-C-Mehrfachbindungen, Zirconocene in der Alkenpolymerisation, Gold-katalysierte Cyclisierung von Alkinen, Wacker-Oxidation, Kupfer- und Palladium-katalysierte Cyclopropanierung von Alkenen mit Diazoalkanen, Kupferkatalyse an terminalen Alkinen, 1,4-Additionen an Michael-Akzep-

toren durch Organocuprate). Aktuelle Entwicklungen in der Homogenkatalyse-Forschung belegen die Relevanz von z.B. der Organokatalyse, des Screenings und von Kinetiken katalytischer Reaktionen, von Allylkomplexen, Chromverbindungen und von nichtlinearen Effekten in der enantioselektiven Katalyse sowie der asymmetrischen Autokatalyse.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, ihr Verständnis bekannter Katalysen auch auf neue Reaktionen anzuwenden.

*b) Lehrformen:*

Vorlesung (2 SWS), vierwöchiges Forschungspraktikum (4 SWS)

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* Bachelor Chemie, Bachelor Biochemie oder Zwischenprüfung Lehramt Chemie

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten ist das Bestehen der Klausur zur Vorlesung „Homogene Katalyse“ und das Absolvieren des vierwöchigen Forschungspraktikums

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus den Prüfungsleistungen Klausurnote und Praktikumsnote gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* Vorlesung jedes Wintersemester, Forschungspraktikum nach Vereinbarung in den Forschungsgruppen der Dozentinnen oder Dozenten

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:* mindestens 1 Semester

Das Forschungspraktikum kann prinzipiell im selben Semester parallel zur Vorlesung absolviert werden, in der vorlesungsfreien Zeit oder auch in einem späteren Semester.

## **Vertiefungsfach Molekulares Modellieren**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Im Rahmen des Moduls Molekulares Modellieren werden fortgeschrittene Kenntnisse im Bereich der computergestützten Chemie (angewandte theoretische Chemie) vermittelt. Die Anwendungen umfassen quantenchemische Methoden (Computational Chemistry I) und Kraftfeldmethoden (molecular mechanics) in Kombination mit Liganfeldtheorie, Spektrensimulationen und experimentellen thermodynamischen Daten (Computational Chemistry II). Das Forschungspraktikum soll im Anschluss an eine (oder beide) der Einführungsveranstaltungen durchgeführt werden und ist Hauptbestandteil des Vertiefungsfachs.

Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage, die Methoden des Molekularen Modellierens für einfache Fragestellungen selbstständig einzusetzen und Forschungsergebnisse kritisch zu beurteilen.

*b) Lehrformen:*

Vorlesung mit Übung (3 SWS, 3 LP)

Wahlweise: Computational Chemistry I: 3 LP

Computational Chemistry II: 3 LP,

6-wöchiges Forschungspraktikum, 7 LP

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* keine

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Erfolgreiche Teilnahme an einer der zwei Vorlesungen mit Übungen und mündlicher oder schriftlicher Abschlussprüfung (wird am Anfang der Veranstaltung bekanntgegeben) sowie erfolgreichem Forschungspraktikum mit Praktikumsbericht und Abschlusskolloquium.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls wird aus den Prüfungsleistungen gebildet.

*g) Häufigkeit des Angebots:* Die Veranstaltung Computational Chemistry I findet jeweils im Wintersemester, die Veranstaltung Computational Chemistry II im Sommersemester statt. Das Forschungspraktikum kann nach Absprache mit den Dozenten jederzeit nach den Theorieveranstaltungen durchgeführt werden.

*h) Arbeitsaufwand:* Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:* 1-2 Semester.

## **Vertiefungsfach Radiochemie**

*a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Im Rahmen dieses Moduls werden fortgeschrittene Kenntnisse im Bereich der Radiochemie vermittelt. Dabei stellt die Chemie der f-Elemente einen wesentlichen Bestandteil dar. Im zweiten Teil dieses Wahlmoduls werden Spezialvorlesungen zum Thema „Radionuklide in der Medizin“ und „Forensik“ angeboten. Die im Rahmen der Vorlesung erhaltenen Kenntnisse zur Chemie und Anwendung von f-Elementen werden im Rahmen eines vierwöchigen Forschungspraktikums vertieft. Dieses Praktikum kann auch im Bereich der Radiopharmazie absolviert werden.

Das Modul besteht aus der Vorlesung Radiochemie III (2 SWS) und Radiochemie IV (2 SWS), sowie einem 4-wöchigen Forschungspraktikum und baut auf dem Wahlmodul Radiochemie für Bachelorstudenten (RCI und RCII) auf.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des Moduls Radiochemie-f sowohl theoretisch als auch experimentell mit der Chemie der f-Elemente bzw. medizinisch relevanter Radionuklide vertraut sein und darüber hinaus in der Lage sein, im Rahmen eines Forschungspraktikums ein Thema selbstständig zu bearbeiten, eine anspruchsvolle wissenschaftliche Thematik experimentell und theoretisch zu durchdringen und die Ergebnisse im Rahmen eines Vortrags darzustellen.

*b) Lehrformen:* Vorlesungen (2 x 2 SWS), 4-wöchiges Forschungspraktikum

Radiochemie III: 3 LP, Radiochemie IV: 3 LP, Forschungspraktikum: 4 LP

*c) Voraussetzung für Teilnahme:* Erfolgreich absolvierte Bachelor-Module Radiochemie I und II

*d) Verwendbarkeit des Moduls:* Chemie (Master).

Einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter naturwissenschaftlicher Studiengänge.

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten ist die Teilnahme an den Vorlesungen, die erfolgreiche Durchführung des Praktikums sowie das erfolgreiche Absolvieren des Abschlusskolloquiums.

*f) Leistungspunkte und Noten:*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls ist die Durchschnittsnote aus den praktischen Leistungen und dem Abschlusskolloquium.

*g) Häufigkeit des Angebots:*

Jährlich, Sommersemester/Wintersemester

*h) Arbeitsaufwand:*

Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

*i) Dauer:* 2 Semester

## **Vertiefungsfach Reaktive Strömungen (10 LP)**

### **Variante 1**

„Strömung, Partikel und chemische Reaktionen“ (V2), Wintersemester

„Thermodynamik von Fluiden und ihren Mischungen“ (V2), Sommersemester

Short Course „Reactive Flows“ (SC2), Wintersemester

Softwarepraktikum „Reaktive Strömungen“ (P2), Sommersemester

Seminar „Reaktive Strömungen in der Chemie“ (S2), Sommersemester

### **Variante 2**

V2 (s.o.) plus 4-wöchiges Forschungspraktikum

### **Verantwortliche Dozenten:**

Prof. Dr. Eva Gutheil, Email [gutheil@uni-hd.de](mailto:gutheil@uni-hd.de), Tel. 06221/54-14711

PD Dr. Nicolas Dahmen, Email [nicolaus.dahmen@kit.edu](mailto:nicolaus.dahmen@kit.edu), Tel. 0721/6082-2596

### *a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls*

Es werden grundlegende Kenntnisse reaktiver Strömungen vermittelt.

Das Modul vermittelt fundamentale Kenntnisse in der Strömungslehre und der Kopplung zu chemischen Reaktionen in der Gasphase sowie in Mehrphasenströmungen. Grundgleichungen, Turbulenz, chemische Reaktionen und eventuelle Phasenübergänge gehören zu den Inhalten des Moduls, die sowohl grundlagenorientiert als auch in ihren Anwendungen vermittelt werden.

Das Modul besteht aus den Vorlesungen „Strömung, Partikel und chemische Reaktionen“ (V2) und „Thermodynamik von Fluiden und ihren Mischungen“ (V2) sowie dem Softwarepraktikum „Reaktive Strömungen“ (P2) und dem Short Course „Reactive Flows“ (in englischer Sprache). Alternativ zu dem Softwarepraktikum wird das Seminar „Reaktive Strömungen in der Chemie“ (S2) angeboten.

Alternativ zu den genannten Anforderungen kann eine der beiden Vorlesungen (V2) gehört und ein 4-wöchiges Forschungspraktikum durchgeführt werden.

Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls VF „Reaktive Strömungen“ sollen die Studierenden die wichtigsten Phänomene reaktiver Strömungen verbal und mathematisch/physikalisch formulieren können und über Kenntnisse der Integration chemischer Reaktionen und deren Eigenschaften verfügen. Stoffeigenschaften von Mehrphasenströmungen und Anwendungen vervollständigen die Kenntnisse.

### *b) Lehrformen*

Vorlesung, Praktikum, Seminar, Short Course

### *c) Voraussetzung für die Teilnahme*

keine

### *d) Verwendbarkeit des Moduls*

Chemie (Master)

Einsetzbar in modularisierten naturwissenschaftlichen und technischen Studiengängen auf fortgeschrittenem Niveau.

*e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten*

Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten ist die aktive Teilnahme an dem Praktikum bzw. einer Präsentation im Rahmen des Seminars sowie das Bestehen der Abschlussprüfungen in den beiden Vorlesungen. Die Definition der Prüfungsleistung obliegt dem/der Veranstalter/in und wird zu Beginn der Veranstaltung bekanntgegeben.

*f) Leistungspunkte und Noten*

Es werden 10 Leistungspunkte vergeben. Die Note des Moduls ist die Durchschnittsnote der Abschlussprüfungen.

*g) Häufigkeit des Angebots*

Jährlich, Wintersemester/Sommersemester

## **Vertiefungsfach Theoretische Chemie**

**a) Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls**

Fundamentale Kenntnisse auf dem Gebiet der quantenmechanischen Beschreibung der Materie mit Schwerpunkt theoretisch-chemischer Fragestellungen werden vermittelt. Dabei stehen Operatortechniken, Born-Oppenheimer-Näherung, das Pauli-Prinzip und das Grundverständnis der Chemischen Bindung am Beispiel kleiner Moleküle im Mittelpunkt der Quantenchemie I. Die VL liefert die Voraussetzung für die Quantenchemie II, in welcher moderne und gängige Beschreibungsverfahren für Vielteilchensysteme genau dargelegt werden. Ausgehend von Symmetrieprinzipien und speziellen Formulierungen der Wellenfunktion als Slaterdeterminante führt die QC II systematisch in die Hartree-Fock-Theorie in ihren wichtigsten Ausprägungen ein. Den Abschluss bildet ein Einblick in moderne Methoden der Elektronenkorrelationsbeschreibung für hochgenaue theoretische Ergebnisse.

Das Modul besteht aus einer Vorlesung und Übungstutorien, in denen die in der Vorlesung erworbenen Kenntnisse anhand von Übungsaufgaben wiederholend diskutiert und zunehmend selbstständig angewendet werden.

Die Studierenden sollen nach erfolgreichem Abschluss des Moduls QC I und QC II einen fundierten Überblick über Prinzipien und moderne Beschreibungsverfahren der Theoretischen Chemie erworben haben, wodurch sie in die Lage versetzt werden, die heutzutage in der Praxis üblichen ergänzenden quantentheoretischen Rechnungen zu verstehen und bewerten zu können. Außerdem sollen sie dadurch die Grundlagen zur Durchführung eigener theoretisch-chemischer Rechnungen erworben haben.

**b) Lehrformen:** Vorlesung (3 SWS), Übungen (2 SWS).

**c) Voraussetzung für Teilnahme:** keine

**d) Verwendbarkeit des Moduls:** Chemie (Master). Einsetzbar in der naturwissenschaftlichen Grundausbildung modularisierter naturwissenschaftlicher Studiengänge.

**e) Voraussetzung für die Vergabe von Leistungspunkten:**

ist die erfolgreiche Teilnahme an den Übungstutorien und das Bestehen der Klausur zur Vorlesung Quantenchemie I bzw. Quantenchemie II.

**f) Leistungspunkte und Noten:**

Es werden je 5 Leistungspunkte für QC I und QC II vergeben. Die Note des Moduls wird aus der Prüfungsleistung gebildet.

**g) Häufigkeit des Angebots:** in jedem Semester. SoSe: Quantenchemie I, WS: Quantenchemie II.

**h) Arbeitsaufwand:** Der Arbeitsaufwand beträgt 300 Stunden.

i) Dauer: QC I & QC II alternierend jeweils ein Semester, Vorlesungszeit

## Anhang

### i. Hinweise zu den Prüfungsleistungen

Die **Master-Prüfung** besteht aus

1. den studienbegleitenden Prüfungsleistungen der Module
2. einer mündlichen Abschlussprüfung
3. der Masterarbeit

Sie muss in der Reihenfolge

Studienbegleitende Prüfungsleistungen - mündliche Abschlussprüfung - Masterarbeit abgelegt werden.

Die mündliche Abschlussprüfung soll spätestens sechs Wochen nach Bestehen der letzten studienbegleitenden Prüfungsleistung abgelegt sein.

Die Masterarbeit muss spätestens vier Wochen nach erfolgreichem Abschluss der mündlichen Abschlussprüfung begonnen werden.

**Modulprüfungen** können aus mehreren **Moduleilprüfungen** bestehen. Die Teilnahme an Lehrveranstaltungen kann das erfolgreiche Absolvieren anderer Lehrveranstaltungen voraussetzen.

Die studienbegleitenden Prüfungsleistungen der Module werden im Rahmen der jeweiligen Lehrveranstaltung abgelegt. **Art und Dauer der Prüfungsleistungen** wird von der Leiterin bzw. dem Leiter der Lehrveranstaltung festgelegt und spätestens zu Beginn der Lehrveranstaltung bekannt gegeben.

Prüfungsleistungen, die nicht bestanden sind, können einmal wiederholt werden. Eine zweite Wiederholung ist nur bei schwerwiegenden Gründen auf Antrag an den Prüfungsausschuss möglich. Bei den Modulen „Mündliche Abschlussprüfung“ und „Masterarbeit“ ist eine zweite Wiederholung ausgeschlossen. Nicht bestandene Prüfungsleistungen müssen zum nächsten Prüfungstermin wiederholt werden. Bei Versäumen der Frist verliert der Prüfling den Prüfungsanspruch, es sei denn, er hat die Fristüberschreitung nicht zu vertreten.

Das Masterstudium wird durch die **Prüfungs- und Studienordnung** geregelt. Diese ist online abrufbar unter:

[http://www.uni-heidelberg.de/md/chemgeo/studium/chemie\\_master/chemie\\_master\\_po.pdf](http://www.uni-heidelberg.de/md/chemgeo/studium/chemie_master/chemie_master_po.pdf)

### ii. Hinweise zum Auslandsaufenthalt

Informationen zum Auslandsaufenthalt und ERASMUS Partnern sind online abrufbar unter:

<http://www.uni-heidelberg.de/fakultaeten/chemgeo/aci/enders/erasmus/Seiten/erasmus-outgoing.html>

### iii. Kontaktdaten

Fakultät für Chemie und Geowissenschaften  
Im Neuenheimer Feld 234, 69120 Heidelberg  
Tel.: 06221-54 4844, Fax: 06221 54-4589  
E-Mail: [dcg@urz.uni-heidelberg.de](mailto:dcg@urz.uni-heidelberg.de)  
<http://www.chemgeo.uni-hd.de/>

### Studienberatung:

#### Fachstudienberatung:

Prof. (apl.) Dr. Hans-Robert Volpp  
Sprechzeiten: n.V.  
INF 229, Raum 038, Tel. 06221 54-5041  
E-Mail: [aw2@ix.urz.uni-heidelberg.de](mailto:aw2@ix.urz.uni-heidelberg.de)

#### Auslandsaufenthalte

Prof. (apl.) Dr. Markus Enders  
Sprechzeiten: Dienstag, 11:30 Uhr und n.V.  
INF 276, Raum 201, Tel. 06221 54-6247  
E-Mail: [erasmus.chemie@uni-heidelberg.de](mailto:erasmus.chemie@uni-heidelberg.de)

### Studiendekan:

Prof. Dr. Dr. Hans-Jörg Himmel  
Sprechzeiten: n.V.  
INF 275, Raum 2.01, Tel. 06221 54-8446  
E-Mail: [hans-jorg.himmel@aci.uni-heidelberg.de](mailto:hans-jorg.himmel@aci.uni-heidelberg.de)

### Prüfungsausschuss Master:

#### Vorsitzender

Prof. Dr. Günter Helmchen  
Sprechzeiten: n.V.  
INF 273, Raum 104, Tel. 06221 54-8421  
E-Mail: [G.Helmchen@oci.uni-heidelberg.de](mailto:G.Helmchen@oci.uni-heidelberg.de)

#### Sekretariat

Eveline Uckrow  
Sprechzeiten: Dienstag und Donnerstag, 9:00 – 12:00 Uhr  
INF 270, Raum 235, Tel. 06221 54-8403  
E-Mail: [e.uckrow@oci.uni-heidelberg.de](mailto:e.uckrow@oci.uni-heidelberg.de)