

Qualifizierungsmodule des B. Sc. Chemie

Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie	1
Moderne Anorganische Chemie (MAC).....	1
Kristallstrukturbestimmung (Krist).....	3
Supramolekulare Anorganische Chemie (SupAC)	5
Module des Instituts für Biochemie	6
Biochemie des Stoffwechsels (QM-BC)	6
Module des Instituts für Bioorganische Chemie	8
Qualifizierungsmodul Bioorganische Chemie (QualiBioOC).....	8
Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie	10
Festphasen-Polymersynthese (FePoS)	10
Angewandte Organische Chemie (AOC).....	12
Module des Instituts für Physikalische Chemie	14
Experimentelle Methoden in der Physikalischen Chemie (QM-PC).....	14
Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie	16
Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)	16

Module des Instituts für Anorganische Chemie und Strukturchemie

Moderne Anorganische Chemie (MAC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Qualifizierung	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Moderne Anorganische Chemie		V	2	90	30	250
Übung		Üb	1	30	15	30
Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Janiak				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. C. Janiak, Prof. Dr. C. Ganter				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> das Konzept der Nano-Chemie und poröser Materialien anhand von Beispielen erläutern und Anwendungsbereiche solcher Materialien benennen, analytische Methoden zur Charakterisierung von Nano-Materialien und porösen Materialien beschreiben und problemorientiert auswählen, Elementarreaktionen der metallorganischen Katalyse beschreiben und Katalysezyklen verschiedener Reaktionen aufstellen, Vor- und Nachteile homogener und heterogener katalytischer Verfahren diskutieren, die Bedeutung katalytischer Prozesse in der chemischen Industrie erklären. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Nanochemie: Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von Nanomaterialien. poröse Materialien: Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von porösen Materialien am Bsp. der Metall-organischen Netzwerke (MOFs). Katalyse: Grundlagen der homogenen Katalyse, Katalysezyklen und relevante metallorganische Elementarreaktionen, Steuerung von Aktivität, Produktivität und Selektivität. Ausgewählte Beispiele aus Labor und Produktion. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen ANA und EOC.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben und aller Praktikumsaufgaben. Erstellen von Protokollen.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des MAC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/180	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
C. Janiak, H.-J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, <i>Moderne Anorganische Chemie</i> , De Gruyter, 5. Auflage, Berlin/Boston, 2018 .						
C. Elschenbroich, <i>Organometallic Chemie</i> , Teubner, 6. Auflage, Wiesbaden, 2008 .						

D. Steinborn, *Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse*, Vieweg+Teubner, 2. Aufl., Wiesbaden, 2010.
VL-Präsentationen und Praktikumsskript.

Kristallstrukturbestimmung (Krist)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeits- aufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppen- größe
Theorie und Praxis der Kristallstrukturanalyse		V	2	90	30	250
Krist-Übungen		Üb	1	30	15	30
Krist-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. W. Frank					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. W. Frank, Dr. G. Reiß					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die theoretischen Grundlagen der Kristallstrukturanalyse erläutern, • einen Überblick über die experimentellen Möglichkeiten zur Charakterisierung von Einzelkristallen mittels Röntgenbeugung geben, • eine Kristallstrukturanalyse im Routinefall durchführen und dokumentieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Erzeugung von Röntgenstrahlen und Strahlenschutz. • Kristallgitter und Symmetrie. • Wellenkinematische Theorie der Röntgenbeugung, die Deutungen des Beugungsphänomens von Laue und Bragg. • das Reziproke Gitter, die Ewald-Konstruktion, Atomformfaktoren und Strukturfaktoren • Translationenbehaftete Symmetrieelemente. • Systematische Auslösungen und die Bestimmung von Raumgruppen. • Fourier-Reihen in der Kristallographie. • Optische Diffrakometrie. • Experimentelle Methoden (Kristallzucht und -auswahl, kurze Einführung in die klassischen Filmmethoden, Vierkreisdiffraktometer, Imaging Plate- und CCD-Diffraktometer, Intensitätsdatensammlung). • Datenreduktion. • Strukturlösung mit direkten Methoden bzw. Pattersonfunktion. • Strukturverfeinerung und Qualitätsindikatoren. • kritische Beurteilung der Ergebnisse von Kristallstrukturanalysen. • Kristallographische Datenbanken und Crystallographic Information Files. • Pseudosymmetriephänomene. • Aperiodische Kristallstrukturen. • Durchführung einer Kristallstrukturbestimmung und Erstellung einer CIF-Publikation. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul ANA.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übung und Praktikum, Bearbeitung von Übungsaufgaben. Erstellen von Protokollen.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Krist-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>W. Massa, <i>Kristallstrukturbestimmung</i>, Teubner, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden 2007.</p> <p>W. Borchardt-Ott, H. Sowa, <i>Kristallographie. Eine Einführung für Studierende der Naturwissenschaften</i>, Springer, 9. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2018.</p> <p>C. Giacovazzo (Hrsg.), <i>Fundamentals of Crystallography</i>, Oxford University Press, 3., rev. Ed., Oxford, 2011.</p>			

Supramolekulare Anorganische Chemie (SupAC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Supramolekulare Chemie Anorganische und Metallorganische Chemie		V	2	90	30	20
SupAC-Praktikum		PExp	6	120	90	10
Seminar für Strukturchemie		Sem	1	30	15	20
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. W. Frank					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. W. Frank					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> molekulare, supramolekulare und polymolekulare Stoffe und die grundlegenden aufbauenden Bindungsarten differenzieren, die Stärke und räumliche Organisation supramolekularer Assoziation erkennen und aktiv bei der Planung und Durchführung von Synthesen von Anorganika und Metallorganika nutzen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Strukturchemie als grundlegende Disziplin der Supramolekularen Chemie. Formen primärer und sekundärer Bindung und empirische Bindungsordnungen. Additionsverbindungen als Supramolekulare Verbindungen. die supramolekulare Aromat-Metall-Wechselwirkung. Supramolekulare Aspekte bei Seifen, Tensiden, Lipiden. Planung und Durchführung der Herstellung und der Analyse supramolekularer anorganischer und elementorganischer Verbindungen. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen C1, C2 und EOC.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SupAC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
J. W. Steed, J. L. Atwood, <i>Supramolecular Chemistry</i> , John Wiley & Sons, 3. Ed., Chichester, 2022 .						

Module des Instituts für Biochemie

Biochemie des Stoffwechsels (QM-BC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Stoffwechselbiochemie		V	4	120	60	30
Methoden der Proteincharakterisierung		PExp & Sem	7	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. L. Schmitt				
Beteiligte Dozierende		Dozierende der Biochemie				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
Lernziele und Kompetenzen		Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls				
		<ul style="list-style-type: none"> die Zusammenhänge von Stoffwechselprozessen und den resultierenden physiologischen oder pathologischen Auswirkungen erklären, wesentliche Eigenschaften von Proteinen und Membranen bestimmen, bioanalytische Daten auswerten und dokumentieren. 				
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>		<ul style="list-style-type: none"> Glycolyse Substratketten-Phosphorylierung Citronensäurezyklus Aufbau biologischer Membranen Gegenüberstellung von Oxidativer Phosphorylierung und Photophosphorylierung Abbau und Synthese von Triacylglycerol und deren hormonelle Steuerung Harnstoffzyklus Pentosephosphat-Weg in Tieren und Calvin-Zyklus in Pflanzen Oxygenasen und Desaturasen Milchsäure- und Ethanol-Gärung Pyruvatdehydrogenase Oxidative Phosphorylierung Grundlagen der Bioenergetik Gluconeogenese und Glykogenstoffwechsel und ihre hormonelle Steuerung Aminosäure-Abbau Stickstoffkreislauf Steroid- und Isoprenoidsynthese 				
<i>Praktikum:</i>		<ul style="list-style-type: none"> Enzymatische Glucosebestimmung Proteinsequenzierung durch Edman-Abbau von Insulin. Erzeugung und Quantifizierung von Membranpotentialen. Quantifizierung von IgG durch ELISA. Darstellung von Proteinstrukturen mit Hilfe von Standardprogrammen und der Brookhaven Protein Data Base. 				
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme am Modul GBC.				

Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme am Praktikum, Berichte zu den Praktikumsversuchen, Abschlusskolloquien zum Praktikum.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Methoden der Proteincharakterisierung“.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Lehrbücher der Biochemie z.B.: J. M. Berg, J. L. Tymoczko, G. J. Gatto jr., L. Stryer, <i>Biochemie</i> , Springer Spektrum, 8. Aufl., Berlin, 2018 .			

Module des Instituts für Bioorganische Chemie

Qualifizierungsmodul Bioorganische Chemie (QualiBioOC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: B. Sc. Chemie					Modus: Qualifizierung	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der bioorganischen Chemie		V	1	30	15	30
Einführung in die wissenschaftliche Arbeit		Sem/Üb	2	75	30	30
Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. J. Pietruszka				
Beteiligte Dozierende		Dr. Sonja Meyer zu Berstenhorst				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Chemie B. Sc. Biochemie B. Sc. Biologie B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul Wahlmodul Wahlmodul Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> Die Studierenden können die Grundbegriffe der bioorganischen Chemie einordnen. Die Studierenden sind in der Lage, ihre Bachelorarbeit größtenteils eigenständig durchzuführen und die Ergebnisse fachgerecht auszuwerten und zu präsentieren. Die Studierenden kennen die Grundzüge guter wissenschaftlicher Praxis und wenden diese bei der eigenen Arbeit an. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Grundlagen der Molekularbiologie (Replikation, Transkription, Translation, Proteinbiochemie, PCR, Mutagenese) und Enzymologie (Kinetik, Thermodynamik, Enzymdesign, Screening). Retrosynthese. NMR-Spektroskopie. MS-Spektrometrie. <p><i>Seminar/Übung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Gliederung einer wissenschaftlichen Arbeit. Einführung in MS Word (Formatierungen, Querverweise). Literaturrecherche, wissenschaftliches Zitieren, Einführung in das Literaturverwaltungsprogramm Endnote. Spektrenauswertung mit MestReNova. Grafikdesign (Farbraum, Auflösung, Bildformate, ChemDraw, PowerPoint). wissenschaftliches Präsentieren (Motivation, Gliederung, Foliendesign, Übungen zur Körpersprache). <p><i>Praktikum:</i> Einführung in die für die Bachelorarbeit wichtige Methodik.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen VOC und VOC-P.				

Studienleistungen	Regelmäßige, aktive Teilnahme an den Übungen im Seminar, Teilnahme am Institutsseminar mit eigener Präsentation.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QualiBioOC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie unter http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre			
Literatur			
K. Hien, S. Rümpler, <i>Grafische Gestaltung in Naturwissenschaften und Medizin</i> , Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2008 . S. Bienz, L. Bigler, T. Fox, H. Meier, <i>Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie. Hesse–Meier–Zeeh</i> , Thieme, 9. Aufl., Stuttgart/New York, 2016 .			

Module des Instituts für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie

Festphasen-Polymersynthese (FePoS)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Festphasen-Polymersynthese		V	2	60	30	30
FP-PS-Übung		Üb	1	30	15	30
FP-PS-Praktikum		PExp	6	150	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. L. Hartmann					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Hartmann, Dr. M. Tabatabai, Dozierende der Makromolekularen Chemie.					
Sprache	deutsch/ggf. Englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie (anteilig) B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflicht Qualifizierungsmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Festphasensynthese von Peptiden erklären und rekonstruieren, die Festphasensynthese von anderen Makromolekülen wie Oligonucleotiden und Oligo(amidoaminen) identifizieren und vergleichen, Festphasensynthese von Peptiden und Oligo(amidoaminen) planen und durchführen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Das Prinzip der Festphasensynthese wird am Beispiel der Merrifield Festphasenpeptidsynthese eingeführt. Die Anwendung der Festphasensynthese in Industrie und Forschung wird am Beispiel der Peptid-, Oligonucleotid-, Zucker- und Polymerfestphasensynthese weitergehend beleuchtet.						
<i>Praktikum:</i>						
Planung und Durchführung eines Forschungsprojektes unter Anleitung eines Doktoranden/ einer Doktorandin. Die Forschungsarbeit besteht aus Recherche der relevanten Literatur, Planung und Durchführung der Experimente, Charakterisierung der Produkte und Anfertigung eines Abschlussberichts.						
<i>Übung:</i> In den Übungen werden die Themen der Vorlesung und des Praktikums vertieft.						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul PMC.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Übungen und erfolgreiche Bearbeitung der Forschungsthemen im Arbeitskreis. Erstellen von Protokollen und einem Abschlussbericht.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des FePoS-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
W. C. Chan, P. D. White, <i>Fmoc Solid Phase Peptide Synthesis: A Practical Approach (The Practical Approach Series)</i> , Oxford University Press, Qxford, 1999.						

Patrick H. Toy, Yulin Lam, *Solid-Phase Organic Synthesis: Concepts, Strategies, and Applications*, John Wiley & Sons, Hoboken, **2012**.

Angewandte Organische Chemie (AOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1 Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeits- aufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppen- größe
Syntheseplanung		V	2	60	30	30
AOC-Seminar		Sem	1	45	15	30
AOC-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Czekelius, PD Dr. Klaus Schaper, Dr. S. Beutner.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie (anteilig) M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • einfache und komplexe Moleküle retrosynthetisch analysieren, • einfache und komplexe Reaktionssequenzen zur Synthese von Zielmolekülen planen, • Vor- und Nachteile unterschiedlicher Synthesewege identifizieren und differenziert erläutern, • mehrstufige Synthesen durchführen und angemessen dokumentieren, • analytische Methoden zum Strukturbeweis niedermolekularer Verbindungen auswählen und Spektreninformationen (NMR, IR und MS) interpretieren, • aktuelle Fachthemen beurteilen sowie angemessen zusammenfassen und präsentieren. <p>Durch den Erwerb der o.g. Kompetenzen werden die Studierenden zur Durchführung einer präparativ-organisch ausgerichteten Bachelorarbeit befähigt.</p>						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Synthesestrategien. • Retrosynthetische Analyse. • Syntheseplanung. • wichtige Transformationen von funktionellen Gruppen. <p><i>Praktikum:</i></p> <p>Am Beispiel ausgewählter Laborsynthesen von interessanten und relevanten Verbindungen werden Stoffklassen und Funktionalitäten mit Reaktionstypen und Mechanismen verknüpft. Hierzu werden auch mehrstufige Reaktionssequenzen und Mikrowellen-unterstützte Synthesen genutzt sowie die Möglichkeiten und Grenzen moderner analytischer Methoden bei der Identifizierung und Reinheitskontrolle der Syntheseprodukte aufgezeigt.</p> <p>Abschließend in einer Arbeitsgruppe Mitarbeit an einem aktuellen Forschungsprojekt</p> <p>Im <i>Seminar</i> werden relevante Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche diskutiert.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen VOC und VOC-P.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum. Erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsaufgaben. Erstellen von Versuchsprotokollen. Beteiligung an Sachdiskussionen.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des AOC-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			08/180
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
<p>S. Warren, <i>Organische Retrosynthese</i>, Teubner, Stuttgart, 1997.</p> <p>S. Warren, P. Wyatt, <i>Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i>, Wiley, 2. Ed., New York, 2008</p> <p>S. Warren, <i>Workbook for Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i>, John Wiley & Sons, 2. Ed., New York, 2009.</p> <p>F. A. Carey, R.J. Sundberg, <i>Organische Chemie. Ein weiterführendes Lehrbuch</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1995, (Kap. 26).</p> <p>J. Fuhrhop, G. Penzlin, <i>Organic Synthesis. Concepts and Methods</i>, Wiley-VCH, 2., rev. and enl. Ed., Weinheim, 1994.</p> <p>K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1996.</p> <p>K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 2003.</p> <p>E.J. Corey, X.-M. Cheng, <i>The Logic of Chemical Synthesis</i>, John Wiley & Sons, New York, 1989.</p> <p>C.L. Willis, M. Wills, <i>Syntheseplanung in der Organischen Chemie</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1997.</p> <p>T. Wirth, <i>Syntheseplanung – aber wie?</i>, Spektrum, Heidelberg, 1998.</p> <p>T.-L. Ho, <i>Symmetry. A Basis for Synthesis Design</i>, John Wiley & Sons, New-York, 1995.</p> <p>Praktikumsskript.</p>			

Module des Instituts für Physikalische Chemie

Experimentelle Methoden in der Physikalischen Chemie (QM-PC)				Stand: 25.02.2019		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1 Semesterhälfte	SoSe	6		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Experimentelle Methoden in der PC		V	2	45	30	30
Praktikum		PExp	6	150	90	15
Seminar		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. P. Gilch					
Beteiligte Dozierende	Alle Dozierenden der Physikalischen Chemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Biochemie M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Konzeption und Umsetzung eines Forschungsprojekts der PC. Umgang mit modernen Messmethoden der PC. Datenerfassung und -auswertung sowie Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen. Graphische und schriftliche Darlegung der Ergebnisse. Wissenschaftliches Vortragen.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> Allgemeiner Teil (alle Teilnehmer) <ul style="list-style-type: none"> • Themenfindung in der PC und Literaturarbeit • Dokumentation von Messergebnissen • Messungen und Datenerfassung (Dynamikumfang, Kalibrierungen etc.) • Statistische und systematische Fehler • Umgang mit Darstellungs- und Auswertungssoftware am Beispiel von ORIGIN. Spezieller Teil (durchgeführt vom jeweiligen Praktikumsbetreuer) Es sollen relevante Themenbereiche in Bezug zum Thema der Bachelorarbeit vertieft und instrumentelle sowie theoretische Methoden des betreuenden Arbeitskreises kennengelernt werden. Dieser Teil dient der speziellen Vorbereitung zur geplanten Bachelorarbeit. <i>Übung/Seminar:</i> Praktischer Umgang mit ORIGIN. Vortrag über das Forschungsprojekt. <i>Praktikum:</i> ein experimentelles Forschungsprojekt in der Arbeitsgruppe, in der die Bachelorarbeit angefertigt werden soll.						
Teilnahmevoraussetzungen	Kenntnisse mathematischer Methoden und Grundkenntnisse der Physikalischen Chemie aus den Modulen GPC und GPC-P.					
Studienleistungen	Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Veranstaltungen. Anfertigung eines Berichts.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QM-PC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Vortrag über das Praktikum, bewertete Ausarbeitung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		

Sonstige Informationen
http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Physikalische_Chemie
Literatur
Allgemeiner Teil: Vorlesungsskript. Spezieller Teil: Original- und Übersichtsarbeiten.

Module des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie

Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
AnQCCC-Vorlesung		V	2	60	30	250
AnQCCC-Seminar		Sem	1	45	15	30
AnQCCC-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. M. Marian					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Qualifizierungsmodul		
	B. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
M. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die wichtigsten Methoden der Computerchemie anwenden, • der Problemstellung angemessene Methoden und Basisätze auswählen, • selbständig Geometrieoptimierungen an Molekülen durchführen und beurteilen, • elektronische Anregungsspektren berechnen und interpretieren, • eine Bachelorarbeit in der Theoretischen Chemie anfertigen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Quantenchemische Methoden für Eigenschaften von Molekülen im elektronischen Grundzustand (Hartree-Fock, Dichtefunktionaltheorie, Møller-Plesset-Störungstheorie, semiempirische Verfahren). • Grundzüge der statistischen Thermodynamik, Zustandssummen für Translation, Rotation, Schwingungs- und elektronische Energien. • Einschätzen der Leistungsfähigkeit der quantenchemischen und semiempirischen Methoden. • Interpretation der Ergebnisse von MO-Rechnungen. • Suche nach Minima und Übergangszuständen, Reaktionswärmen (Wahl von Atomorbitalbasen, Bedeutung der Nullpunktschwingungsenergie, Temperaturabhängigkeit, Lösungsmittelleffekte). • Berechnung elektronischer Anregungsspektren mit DFT/MRCI. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme am Modul QCCC.					
Studienleistungen	Teilnahme an Vorlesung und Praktikum, Auswertung der Praktikumsaufgaben, Seminarvortrag.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des AnQCCC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/180		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.
Literatur
Skript zur Vorlesung. C. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry. Theories and models</i> , Wiley, 2. Ed., Chichester, 2004 .