

Spezialisierungspflichtmodule des M. Sc. Chemie

Erläuterungen zur Platzvergabe in den Spezialisierungspflichtmodulen	1
Advanced Materials	2
Advanced Materials (AdMat-V)	2
Advanced Materials (AdMat-P)	4
Molecular and Biomolecular Catalysis	5
Molecular and Biomolecular Catalysis (MoBiCa-V)	5
Molecular and Biomolecular Catalysis (MoBiCa-P)	7
Molecular Photonics and Excited-State Processes	8
Molecular Photonics and Excited-State Processes (MPESP)	8
Molecular Photonics and Excited-State Processes (MPESP-P)	10
Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules	11
Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules (SDFBio-V)	11
Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules (SDFBio-P)	13

Erläuterungen zur Platzvergabe in den Spezialisierungspflichtmodulen

Die Plätze in den Spezialisierungspflichtmodulen (Forschungsschulen) werden einmal jährlich zum Sommersemester zugewiesen.

Damit die Platzvergabe bis zum Beginn der Vorlesungszeit abgeschlossen werden kann, ist eine rechtzeitige Anmeldung erforderlich. Die Anmeldefrist wird vom Prüfungsausschuss festgesetzt und im Internet bekanntgegeben. Sie endet in der Regel eine Woche vor Vorlesungsbeginn. Bewerbungen, die nach Ablauf der Frist eingehen, werden nicht mehr berücksichtigt.

Die Zuteilung der Plätze erfolgt nach Ablauf der Bewerbungsfrist, sobald das gesamte Bewerberfeld feststeht.

Der Prüfungsausschuss stellt sicher, dass in den Forschungsschulen insgesamt genügend Plätze zur Verfügung stehen, um allen Studierenden des Bewerberfeldes einen Platz anbieten zu können. Allerdings kann das Platzangebot in einzelnen Schulen begrenzt sein, was ggf. eine Auswahl der Studierenden erfordert, die zu den jeweiligen Schulen zugelassen werden können.

Es wird angestrebt, bei der Platzzuteilung die individuellen Interessen der Studierenden soweit wie möglich zu berücksichtigen. Hierzu sollen bei der Anmeldung zu den Forschungsschulen drei Präferenzen gesetzt werden (1 = höchste Präferenz, 3 = niedrigste Präferenz). Sollte die Zahl der Anmeldungen die Zahl der zur Verfügung stehenden Plätze in einer Schule übersteigen, erfolgt die Zulassung nach der Bachelorgesamtnote.

Ist eine Zulassung zu der Forschungsschule, für die die Anmeldung mit der höchsten Präferenz versehen worden ist, nicht möglich, wird in einer der anderen Forschungsschulen ein Platz zugeteilt. Hierbei wird angestrebt, einen Platz in der Forschungsschule mit der nächst niedrigeren Präferenz zuzuweisen.

Studierende, die einem zugewiesenen Platz in einer Forschungsschule nicht annehmen, können daraus keinen Anspruch ableiten, dass sie zu einem späteren Zeitpunkt wieder einen Platz in dieser Forschungsschule erhalten.

Advanced Materials

Advanced Materials (AdMat-V)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
9	270	2. Semesterhälfte	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Anorganische neue Materialien		V	1	54	15	30
Moderne poröse Materialien: MOFs		V	1	54	15	30
Makromoleküle an Grenzflächen		V	1	54	15	30
Moderne Farbstoffchemie		V	1	54	15	30
Soft Matter System		V	1	54	15	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. L. Hartmann				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. W. Frank, Prof. Dr. C. Janiak, Prof. Dr. T. J. J. Müller, Prof. Dr. L. Hartmann, Jun. Prof. Dr. S. Schmidt.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M.Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflicht	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> erworbene Kenntnisse und Methodenkompetenz auf dem Gebiet der chemischen Materialforschung anwenden, mit Schwerpunkt bei „Hybridmaterialien“ bzw. „Hybridmaterial“-Komponenten Synthese und Charakterisierung neuer Materialien planen. 						
Inhalte						
<i>Anorganische Neue Materialien</i>						
1. Klassifizierung „Neuer Materialien“.						
2. Ausgewählte Synthesekonzepte und -verfahren: Sol-Gel-Verfahren, Precursormethoden, Solvothermal-synthesen).						
3. Struktur-Eigenschaftsbeziehungen bei Anorganischen Materialien und Anorganisch-Organischen Hybridmaterialien.						
4. 2D- und 3D-strukturierte Anorganisch-Organische Hybrid-materialien.						
<i>Moderne poröse Materialien am Beispiel der Metall-organischen Netzwerke (MOFs)</i>						
1. Definitionen und geschichtliche Entwicklung zu MOFs.						
2. Vergleich mit Zeolithen, Strukturen und Aufbau von MOF-Prototypen.						
3. Syntheserouten zu MOFs inklusive postsynthetische Modifizierungen.						
4. mögliche Anwendungsgebiete und aktuelle Anwendungen von MOFs.						
<i>Makromoleküle an Grenzflächen</i>						
1. Klassifizierung Polymergrenzflächen.						
2. Präparative Methoden und Anwendungen (Oberflächenbeschichtungen, Oberflächenpolymerisation, Polymeradsorption, kolloidale Wechselwirkungen).						
3. Analytische Methoden (XPS, Reflektometrie, AFM, Zetapotential, Wetting).						
4. Ausgewählte Anwendungen interaktiver und responsiver Polymerbeschichtungen.						
<i>Moderne Farbstoffchemie</i>						
1. Klassifizierung der Farbstoffe.						
2. Farbe von Organischen Verbindungen.						

3. Ausgewählte Farbstoffklassen (Polyene, Polymethine, Di- und Triarylmethine, Aza[18]annulene, Azofarbstoffe, etc.) –Synthese und Eigenschaften.
4. Ausgewählte Anwendungen (Organische Halbleiter und Feldeffekttransistoren, Organische Leuchtdioden, Organische Photovoltaik, Optische Schalter, Fluoreszenzfarbstoffe).
5. Ökologische und toxikologische Aspekte.

Soft Matter Systeme

1. Definition, Beispiele und Anwendungsbereiche von Soft Matter Systemen.
2. Polymerbasierte Soft Matter System (Synthese, Charakterisierung und Anwendung):
 - a) Copolymere, b) Hydrogele.
3. Moderne Polymer-Hybrid-Systeme (Synthese, Charakterisierung und Anwendung).

Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Vorlesungen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Moduls AdMat-P.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Endnote			16/135
Medienformen	Tafel, Projektor		
Sonstige Informationen			
www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Anorganische_Chemie/Vorlesungen_und_Praktika			
Literatur			
<p>U. Schubert, N. Hüsing, <i>Synthesis of Inorganic Materials</i>, Wiley VCH, 4. Ed., Weinheim, 2019. zu MOFs: VL-Präsentationen, Übersichtsartikel, Praktikumsskript.</p> <p>M. Kaneko, I. Okura, <i>Photocatalysis. Science and Technology</i> (Biological and Medical Physics Series), Springer, Berlin, 2002.</p> <p>H. Zollinger, <i>Color Chemistry. Syntheses, Properties, and Applications of Organic Dyes and Pigments</i>, Wiley-VCH, 3., rev. Ed., Weinheim, 2003.</p> <p>F. Vögtle, <i>Supramolekulare Chemie. Eine Einführung</i>, Teubner, 2., überarb. und erw. Aufl., Stuttgart, 1992.</p> <p>H.-D. Dörfler, <i>Grenzflächen und kolloid-disperse Systeme</i>, Springer, Berlin, 2002.</p> <p>M. T. Shaw, <i>Introduction to Polymer Rheology</i>, John Wiley & Sons, Hoboken, 2012.</p> <p>J. N. Israelachvili, <i>Intermolecular and Surface Forces</i>, Academic Press, 3. Ed., Burlington, 2011.</p>			

Advanced Materials (AdMat-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	2. Semesterhälfte	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
AdMat-Praktikum		P	8	150	120	15
AdMat-Seminar		Sem	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. L. Hartmann					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. W. Frank, Prof. Dr. C. Janiak, Prof. Dr. T. J. J. Müller, Prof. Dr. L. Hartmann, Jun. Prof. Dr. S. Schmidt, Dr. M. Tabatabai.					
Sprache	Deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • moderne Synthesemethoden auf dem Gebiet der neuen Materialien auswählen und anwenden, • begleitende Analyseverfahren auswählen und die Analyseergebnisse deuten und dokumentieren, • wissenschaftliche Ergebnisse kreativ präsentieren. 						
Inhalte						
<i>Praktikum:</i>						
Bevorzugt zur Thematik „Hybridmaterialien“ können wahlweise forschungsnaher Projekte mit Schwerpunkten aus einem oder mehreren der Themenfelder des Vorlesungsverbandes „Neue Materialien“ (siehe Modul AdMat) bearbeitet werden. Der Fokus liegt bei Auswahl und Einsatz materialklassenspezifischer Syntheseverfahren und/oder der fortgeschrittenen Nutzung analytischer Werkzeuge für die Eigenschafts- und Strukturcharakterisierung.						
<i>Seminar:</i>						
Zum Abschluss des Praktikums stellen die Teilnehmer eine ihrer Praktikumsaufgaben und die erzielten Ergebnisse im Kreis der Teilnehmer mit einer Kurzpräsentation vor.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Teilnahme am Praktikum; Anfertigen von Protokollen, Seminarvortrag					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]		benotet/unbenotet	
					unbenotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
Ausgewählte Versuchsvorschriften aus neueren Originalarbeiten zu den Themenkreisen „Anorganische Materialien und Anorganisch-Organische Hybridmaterialien“, „Funktionspolymere, Hybridmaterialien und Nanocomposite“.						
U. a. Präparate aus T. J. J. Müller, U. H. F. Bunz (Hrsg.), <i>Functional Organic Materials. Syntheses, strategies and applications</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2007.						

Molecular and Biomolecular Catalysis

Molecular and Biomolecular Catalysis (MoBiCa-V)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
9	270	2. Semesterhälfte	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der homogenen Katalyse		V	2	110	30	30
Grundlagen der Biokatalyse		V	4	160	60	30
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. C. Ganter, Prof. Dr. T. J. J. Müller Prof. Dr. J. Pietruszka, Prof. Dr. V. Urlacher.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erwerben Kenntnisse und Methodenkompetenz in der Katalyse. Der Fokus liegt auf der Nutzung von Enzymen und ihrer Anwendung in der organischen Synthese. Analytische Werkzeuge für das praktische Arbeiten mit selektiven Katalysatoren werden an Fall-beispielen erläutert.						
Inhalte						
<i>Grundlagen der homogenen Katalyse:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Physikalisch-chemische Grundlagen der molekularen Katalyse. • Prinzipien der metallorganischen Chemie (Formalismen, Liganden, Elementarreaktionen, Mechanismen) • Hydrierungen. • Hydroformylierung, -cyanierung, -silylierung. • Polymerisationskatalyse. • Kreuzkupplungen. • Organokatalyse (Enamin-, Iminium-Katalyse, Stetter-Reaktion). 						
<i>Grundlagen der Biokatalyse:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Suche und Identifizierung neuer enzymatischer Aktivitäten. • Rekombinante Enzyme. • Technisch relevante Prozesse mit isolierten Enzymen und Ganzzell-biokatalysatoren. • Protein-Engineering und –Immobilisierung. • Anwendungen von Enzymen in der Synthese: Racematspaltung, C-O-Bindungen (Carbonsäure-derivate, Epoxide, Glycoside), C-N-Bindungen (Nitrile, Amide, Transaminierung), C-C-Bindungen (Aldolreaktion, Acyloinkondensation, Cyanhydrine), Reduktionen (Ketone, Imine) und Oxidationen (C-H- und C=C-Bindungen, Alkohole, Amine, Carbonyle). 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Vorlesungen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Moduls MoBiCa-P.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		120	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				16/135		

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse:
<http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre>

Literatur

- K. Faber, *Biotransformations in Organic Chemistry. A textbook*, Springer, 6., rev. and corr. Ed., Berlin, **2011**.
- J. McMurry, T. P. Begley, *Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, **2006**.
- D. Steinborn, *Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse*, Springer, 3., überarb. und erw. Aufl., Berlin, **2019**.
- A. Berkessel, H. Gröger, *Asymmetric Organocatalysis. From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2005**.

Molecular and Biomolecular Catalysis (MoBiCa-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	2. Semesterhälfte	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
MoBiCa-Praktikum		PExp	8	170	120	15
MoBiCa-Seminar		Sem	2	40	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozierende	Prof. Dr. Ganter, Prof. Dr. T. J. J. Müller Prof. Dr. J. Pietruszka, Prof. Dr. V. Urlacher.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erwerben praktische Kenntnisse und Methodenkompetenz in der Katalyse. Der Fokus liegt auf der Nutzung von Enzymen und ihrer Anwendung in der organischen Synthese. Analytische Werkzeuge für das praktische Arbeiten mit selektiven Katalysatoren werden an Fallbeispielen erläutert.						
Inhalte						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Synthese ausgewählter Katalysatoren (Pd-Katalysatoren, Thiazoli-umsalze). • Ausgewählte metall- und organokatalysierte Reaktionen (z. B. Sonogashira-, Suzuki-Kupplung, Stetter-Reaktion). • Durchführung einer Hydrierungskinetik. • Synthesen von nichtnatürlichen Substraten für die Enzymkatalyse. • Produktcharakterisierung mit Hilfe von Vergleichssubstanzen. • Enantiomerenanalytik. • Herstellung von rekombinanten Proteinen. • Enzymatische Umsetzung im einphasigen und zweiphasigen System. • Vergleich von Reaktionen mit Ganzzellbiokatalysatoren und isolierten Enzymen. 						
Im <i>Seminar</i> halten die Studierenden Vorträge über aktuelle Themen der molekularen und biomolekularen Forschung.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Durchführung aller Praktikumsversuche, Anfertigung von Protokollen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]		benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
K. Faber, <i>Biotransformations in Organic Chemistry. A textbook</i> , Springer, 6., rev. and corr. Ed., Berlin, 2011 .						
J. McMurry, T. P. Begley, <i>Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege</i> , Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2006 .						
D. Steinborn, <i>Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse</i> , Springer, 3., überarb. und erw. Aufl., Berlin, 2019 .						
A. Berkessel, H. Gröger, <i>Asymmetric Organocatalysis. From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2005 .						

Molecular Photonics and Excited-State Processes

Molecular Photonics and Excited-State Processes (MPESP)					Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer		Turnus	Studiensemester		
9	270	1 Semester		SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen			Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände			V	2	90	30	30
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie			V	1	45	15	30
Präparative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie			V	2	90	30	30
Moderne Farbstoffchemie			V	1	45	15	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. M. Marian					
Beteiligte Dozierende		Die Dozierenden des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie, Prof. Dr. P. Gilch, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.					
Sprache		deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen		<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie wiedergeben, • die Gruppentheorie auf Kernbewegungen, Molekülorbitale und Elektronenspins anwenden, • entscheiden, welche Übergänge zwischen Zuständen erlaubt sind, • Grundzüge der variations- und störungstheoretischen Näherungsverfahren herleiten, • Methoden zur Berechnung angeregter Zustände korrekt beurteilen und auswählen, • Umgebungseffekte in Berechnungen berücksichtigen, • Wahrscheinlichkeiten für elektronische Übergänge berechnen, • angeregte Zustände als elektronische Isomere erkennen, • Bedeutung der Photochemie in Technologie und Industrie beschreiben, • Photochemische Arbeitsweisen und Messtechniken erlernen, • Chromophorklassen strukturell zuordnen und deren Absorptions- und Emissionseffizienz beurteilen, • Synthesen von Chromophoren konzipieren, auswählen und diskutieren, • die physikalischen zugrundeliegenden Phänomene ausgewählter Chromophoranwendungen korrekt beschreiben, diskutieren und in ihrer Effizienz evaluieren, • Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von Chromophoren erkennen, auswerten und diskutieren. 					
Inhalte		<p><i>Vorlesung Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Optimierung von Molekülorbitalen (HF, CASSCF, DFT). • Variationsverfahren (CI, CIS, DFT/MRCI). • Response-Methoden (TDHF, TDDFT, RIC2). • Dipolübergänge und Oszillatorstärken. • Elektronenstrukturmethoden für angeregte Zustände. • Störungstheoretische Verfahren (CASPT2). • Umgebungseffekte auf elektronische Spektren. • Spin-Bahn-Kopplung, Phosphoreszenz, Intersystem Crossing. 					

Vorlesung Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie

- Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik.
- Reduzible und irreduzible Darstellungen, Charaktere, Orthogonalitätstheorem, Projektionsoperatoren.
- Auswahlregeln für Übergänge zwischen molekularen Zuständen.
- Molekülpunktgruppen.
- Symmetrie von Wellenfunktionen und Operatoren.
- Drehimpulse, Kommutatoren, Schiebeoperatoren.

Präparative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie

- Absorption und Emission.
- Ratenkonstanten und Quantenausbeuten.
- Methodische Aspekte der präparativen Photochemie.
- Woodward-Hoffmann-Regeln in der Photochemie.
- Industrielle Anwendungen.
- Photolabile Schutzgruppen.
- Nicht-strahlende Prozesse.
- Magnetfeldeffekte.
- Transferprozesse.
- Photoreaktionen von Carbonylverbindungen.
- Photolithographie.

Moderne Farbstoffchemie

- Klassifizierung der Farbstoffe.
- Ausgewählte Farbstoffklassen (Polyene, Polymethine, Di- und Triarylmethine, Aza[18]annulene, Azofarbstoffe, etc.) – Synthese und Eigenschaften.
- Ökologische und toxikologische Aspekte.
- Farbe von Organischen Verbindungen.
- Ausgewählte Anwendungen (Organische Halbleiter und Feldeffekttransistoren, Organische Leuchtdioden, Organische Photovoltaik, Optische Schalter, Fluoreszfarbstoffe).

Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, werden vorausgesetzt. Gleichzeitige Teilnahme am Modul MPESP-P.		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Vorlesungen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Moduls MPESP-P.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			16/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts für Theoretische Chemie			
Literatur			
A. Szabo, N. Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory</i> , Dover Publications, Inc., Mineola, 2000 .			
B. O. Roos, P. O. Widmark, <i>European Summerschool in Quantum Chemistry</i> , Lund, 2007 .			
D. M. Bishop, <i>Group Theory and Chemistry</i> , Dover Publications, Inc., New York, 1993 .			
P. Klán, J. Wirz, <i>Photochemistry of Organic Compounds. From Concepts to Practice</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009 .			
H. Zollinger, <i>Color Chemistry. Syntheses, Properties, and Applications of Organic Dyes and Pigments</i> , Wiley-VCH, 3., rev. Ed., Weinheim, 2003 .			

Molecular Photonics and Excited-State Processes (MPESP-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
MPESP-Praktikum		PExp	6	90	75	15
MPESP-Seminar		Sem	1	30	15	30
MPESP-Übungen		Üb	2	90	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. M. Marian					
Beteiligte Dozierende	Die Dozierende des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie, Prof. Dr. P. Gilch, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Inhalte des MPESP-Moduls in der Praxis sicher anwenden, • eine Programmiersprache auf einfache praktisch mathematische Fragestellungen anwenden, • mit aktueller wissenschaftlicher Literatur sicher umgehen, • einen Vortrag über ein wissenschaftliches Thema halten. 						
Inhalte						
<i>Praktikum:</i>						
Im Rahmen des Moduls wird ein Programmierpraktikum angeboten, in dem Studierende die Grundzüge einer höheren Programmiersprache erlernen und sie praktisch auf einfache mathematische Fragestellungen aus dem Bereich der theoretischen Chemie anwenden.						
Alternativ können in Absprache mit den Dozierende forschungsnahe Projekte aus den Bereichen Präparative Photochemie, Spektroskopie oder Chromophorsynthese mit spektroskopischer Charakterisierung bearbeitet werden.						
<i>Seminar:</i> In Zusammenarbeit mit den Dozierende werden aktuelle Originalarbeiten aus dem Themenbereich der Vorlesungen ausgewählt und von den Studierenden vorgestellt.						
<i>Übungen:</i> Übungsaufgaben mit Hausaufgaben aus den Themen der Vorlesungen des Moduls MPESP.						
Teilnahmevoraussetzungen	Gleichzeitige Teilnahme am zugehörigen Vorlesungsmodul MPESP.					
Studienleistungen	Aktive Teilnahme am Praktikum, Auswertung der Versuche, Protokolle, Seminarvortrag, Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts für Theoretische Chemie						
Literatur						
U. a. Präparate aus T. J. J. Müller, U. H. F. Bunz (Hrsg.), <i>Functional Organic Materials. Syntheses, strategies and applications</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2007 .						
Aktuelle wissenschaftliche Aufsätze aus Fachzeitschriften.						

Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules

Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules (SDFBio-V)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer		Turnus	Studiensemester	
9	270	2. Semesterhälfte		SoSe	2.	
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Biokatalyse		V	4	160	60	30
Struktur-Funktionsanalyse von Proteinen		V	3	110	45	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. V. Urlacher				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. J. Pietruszka, Prof. Dr. C. Seidel, Prof. Dr. L. Schmitt, Prof. Dr. V. Urlacher.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Struktur-Funktions-Analyse von Proteinen verstehen und den Einfluss der Dynamik erklären, • die Grundlagen der Biokatalyse verstehen und erklären, • Methoden zu Struktur-Funktions-Analyse von Proteinen wiedergeben, • Methoden der Biokatalyse wiedergeben, • Messdaten der Struktur-analytischen Methoden selbständig interpretieren. 						
Inhalte						
<p><i>Grundlagen der Biokatalyse:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Suche und Identifizierung neuer enzymatischer Aktivitäten. • Rekombinante Enzyme. • Technisch relevante Prozesse mit isolierten Enzymen und Ganzzell-biokatalysatoren. • Protein-Engineering und –Immobilisierung. • Anwendungen von Enzymen in der Synthese: Racematspaltung, C-O-Bindungen (Carbonsäure-derivate, Epoxide, Glycoside), C-N-Bindungen (Nitrile, Amide, Transaminierung), C-C-Bindungen (Aldolreaktion, Acyloinkondensation, Cyanhydrine), Reduktionen (Ketone, Imine) und Oxidationen (C-H- und C=C-Bindungen, Alkohole, Amine, Carbonyle). <p><i>Struktur-Funktionsanalyse von Proteinen:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen von Proteinstrukturen. • Strukturbildende Elemente (Primär-, Sekundär-, Tertiär-, Quartärstruktur), Konformationelle Dynamik. • Anhand ausgewählter Proteinfamilien (Proteasen, Nukleotid-bindende Proteine, Immunglobuline) soll durch die dreidimensionale Struktur die Funktion und auch die Bedeutung von Mutationen auf die Aktivität analysiert werden. Anhand dieser Strukturen sollen auch die unterschiedlichen Liganden-Erkennungsmechanismen erläutert werden. • Biophysikalische Grundlagen der Strukturbildung, Dynamik, und Stabilität von Proteinen und Nukleinsäuren. • Überblick über die spektroskopischen Methoden zur Strukturanalyse und Kinetik. • Arten der intramolekularen Wechselwirkungen und Einfluss äußerer Faktoren. 						

<ul style="list-style-type: none"> • Modelle. • Vorhersagen. 			
Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Vorlesungen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Moduls SDFBio-P.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			16/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre			
Literatur			
K. Faber, <i>Biotransformations in Organic Chemistry. A textbook</i> , Springer, 6., rev. and corr. Ed., Berlin, 2011 .			
R. D. Schmid, <i>Taschenatlas der Biotechnologie und Gentechnik</i> , Wiley-VCH, 3. Aufl., Weinheim, 2016 .			

Structure, Dynamics and Functions of Biomolecules (SDFBio-P)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	2. Semesterhälfte	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
SDFBio-Praktikum		PExp	7	150	105	15
SDFBio-Seminar		Sem	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. V. Urlacher				
Beteiligte Dozierende		Prof. Dr. J. Pietruszka, Prof. Dr. C. Seidel, Prof. Dr. L. Schmitt, Prof. Dr. V. Urlacher.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)		Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Methoden zur Struktur-Funktions-Analyse von Proteinen selbständig anwenden, • Grundlegende Methoden zu der Biokatalyse anwenden, • Analytische Werkzeuge für das praktische Arbeiten mit Biokatalysatoren anwenden. 						
Inhalte						
<i>Praktikum einschließlich Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Herstellung von rekombinanten Proteinen. • Durchführung enzymatischer Reaktionen in ein- und zweiphasigen Reaktionssystemen. • Vergleich von Reaktionen mit Ganzzellbiokatalysatoren und isolierten Enzymen. • Synthesen von nicht-natürlichen Substraten für die Enzymkatalyse. • Produktcharakterisierung mit Hilfe von Vergleichssubstanzen. • Enantiomerenanalytik. • Enzymatische Umsetzung. 						
An einem ausgewählten Beispiel soll der Einfluss einer Mutation auf die katalytische Aktivität eines Enzyms bestimmt werden. Hierzu sind die Anzucht von Bakterien, die Aufreinigung des Proteins und die Bestimmung seiner enzymatischen Aktivität nötig.						
Messung, Bearbeitung und Darstellung von biomolekularen Strukturen; Beschreibung und Messung von Bindungsisothermen.						
Teilnahmevoraussetzungen		keine				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme am Praktikum und Seminar. Erstellen von Versuchsprotokollen. Vortrag der Teilnehmer zum Stoff der Vorlesung unter Nutzung von Büchern und Fachpublikationen (Vortragssprache Deutsch oder Englisch nach Wahl).				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		entfällt				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				unbenotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote						
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre .						
Literatur						
Semesteraktuelle Skripte zum Praktikum.						

Aktuelle Reviews und Originalpublikationen nach Mitteilung.

J. McMurry, T. P. Begley, *Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, **2006**.

K. E. van Hold, C. Johnson, P. S. Ho, *Principles of Physical Biochemistry*, Prentice Hall, 2. Ed., Upper Saddle River, **2006**.