

Modulhandbuch

für den

Masterstudiengang Wirtschaftschemie (M. Sc.) nach PO 2019

(Stand: 03.04.2024)

Inhaltsverzeichnis

Qualifikationsziele	1
Studienverlaufsplan	2
Mobilitätsfenster.....	3
Wahlpflichtmodul extern (MW-EXT).....	3
Module mit Zuordnung zum 1. Fachsemester	4
Pflichtmodule	4
OC-M	4
Wahlpflichtmodule Wirtschaftswissenschaften	6
Angebote im Sommersemester	6
Marketing (MW05).....	6
Personalmanagement (MW16).....	8
Advanced Theories in Accounting and Control (MW41).....	10
Advanced Entrepreneurial Finance (MW42).....	12
Praxisseminar Unternehmensgründung (MW51).....	14
Forschen lernen (MW54)	15
Sustainability Management Research (MW57)	17
Angebote im Wintersemester	18
Organizational Behavior (MW18).....	18
Advanced Theories in Accounting and Control (MW40).....	20
Time Series Analysis (MW82).....	22
Purchasing and Supply management (MW123).....	24
Weitere Angebote zum Wahlpflichtmodul-BWL (MW-WiWi)	27
Wahlpflichtmodule Chemie	28
Angebote im Sommersemester	28
Crystallographic software for chemists (CrystSoft).....	28
Nanochemie (NanoChem).....	30
Chemische Kristallographie (ChemKrist).....	31
Anorganische Photoaktive Materialien II - Anwendungen (PhotMat II).....	33
Forschungsmodul in Anorganischer Chemie (FAC)	35
Biochemie der Naturstoffe (NatStoff-BC)	36
Naturstoffsynthese I (NATSY 1).....	38
Naturstoffsynthese II (NATSY 2).....	39
Angewandte Makromolekulare Chemie: a) großtechnische Prozesse b) Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe	40
Angewandte Organische Chemie (AOC).....	42
Wahlpflichtmodul in Organischer Chemie (WOC)	44
Laserspektroskopische Techniken (LST).....	45
Grundlagen der Nanooptik (GNO)	47
Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)	49
Theorie und Simulation chemischer Reaktionen (TSCR).....	51
Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie (FMPC).....	53
Forschungsmodul Physikalische Chemie (FoPC)	55
Angewandte Quanten- und Computerchemie (AnQCCC).....	56
Fortgeschrittene Quantenchemie (FQC).....	58
Angebote im Wintersemester	60

Supramolekulare Chemie (SupChem)	60
Vertiefte Aspekte aus Carben-Chemie und NMR-Spektroskopie (NHC-NMR).....	62
Anorganische Photoaktive Materialien I - Grundlagen (PhotMat I)	64
Vom Gen zum biotechnologischen Produkt (GenProd)	66
Optimierungsverfahren in der Proteinherstellung (OptiProt)	68
Sequenzkontrollierte Polymere (SeqPol)	69
Multikomponenten- und Dominoreaktionen (MCR)	71
Synthese und Katalyse (SynKat)	73
Elektrosynthese (ElSyn)	75
Enantioselektive Katalyse (EnKat)	77
Stereoselektive Synthese (SSSyn)	79
Grundlagen der Umweltchemie (GUC)	81
Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden (SSPK).....	83
Präparative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)	85
Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela)	87
Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn).....	89
Simulation von Biomolekülen (BioSim).....	91
Module mit Zuordnung zum 2. Fachsemester	93
Pflichtmodule.....	93
AC-M.....	93
PC-M.....	95
Module mit Zuordnung zum 3. Fachsemester	97
Wahlpflichtmodule.....	97
Projektarbeit (MQ-WiC)	97
Abschlussmodul	99
Masterarbeit	99

Qualifikationsziele

(1) Die Einschreibung in den Masterstudiengang erfordert einen ersten berufsqualifizierenden Studienabschluss im Fach Wirtschaftschemie sowie die besondere Befähigung zum wissenschaftlichen Arbeiten. Die Einzelheiten und die genaue Vorgehensweise sind in der „Ordnung für die Feststellung der besonderen Eignung für den Studiengang Wirtschaftschemie mit dem Abschluss Master of Science“ geregelt.

(2) Der Masterstudiengang soll den Studierenden die Möglichkeit zur fachlichen Vertiefung und Spezialisierung in der Chemie und in den Wirtschaftswissenschaften bieten. Die generelle Zielsetzung ist die Vorbereitung auf eine berufliche Tätigkeit im Bereich der Chemischen Industrie, der betriebswirtschaftlichen Praxis und den Schnittstellen beider Bereiche. Dabei sollen die Studierenden die fortgeschrittenen fachlichen Kenntnisse, Fähigkeiten und Methoden erlernen, die zu wissenschaftlicher Arbeit und zu wissenschaftlich orientierter beruflicher Tätigkeit erforderlich sind und die dazu befähigen, neue wissenschaftliche Erkenntnisse kritisch einzuordnen und in der beruflichen Praxis zu nutzen. Der Studiengang soll die Studierenden an den Stand der aktuellen Forschung heranführen und dient der Vorbereitung selbstständigen wissenschaftlichen Arbeitens.

(3) Der Masterstudiengang soll den Studierenden die Grundsätze der „Guten Wissenschaftlichen Praxis“ gemäß den Richtlinien der Deutschen Forschungsgemeinschaft in geeigneter Form vermitteln.

(4) Über die Vermittlung fachlicher Kenntnisse hinaus soll der Bachelorstudiengang die Studierenden zum gesellschaftlichen Engagement ermutigen und die Entwicklung individueller Persönlichkeiten fördern. So sollen die Studierenden zu verantwortungsvollem Handeln in einem freiheitlichen, demokratischen und sozialen Rechtsstaat befähigt werden. Die hierzu notwendigen Sozial- und Selbstkompetenzen werden durch Form und Inhalt der Lehrveranstaltungen (Seminare, Übungen, Laborpraktika, Fallstudien, Projektarbeiten, Gruppenarbeiten) vermittelt und durch die Betreuung im Rahmen der Veranstaltungen unterstützt und gestärkt.

Studienverlaufsplan

Insgesamt müssen 90 Leistungspunkte (LP) erworben werden.

Vorlesungen, Übungen, Seminare Naturwissenschaften (Che)	Laborpraktika	Wahlpflicht- veranstaltungen	Masterarbeit
ca. 12 LP	ca. 10 LP	48 LP	20 LP
10 SWS	15 SWS	Che: 8 LP/WiWi: 40 LP	

Damit ergeben sich folgende Musterstudienpläne. Die Größe der Zellen ist dabei nicht proportional zur Zahl der Leistungspunkte des jeweiligen Moduls.

Studienbeginn in einem Sommersemester

1. Semester	2. Semester	3. Semester
OC-M (Organische Chemie) (8 LP)	AC-M (Anorganische Chemie) (7 LP)	MQ-WiC (Projektarbeit) (8 LP)
MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi I) (8 LP)	PC-M (Physikalische Chemie) (7 LP)	Masterarbeit (20 LP)
MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi II) (8 LP)	MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi III) (8 LP)	
MW-Che (Wahlpflichtmodul Chemie) (8 LP)	MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi IV) (8 LP)	

Studienbeginn in einem Wintersemester

1. Semester	2. Semester	3. Semester
AC-M (Anorganische Chemie) (7 LP)	OC-M (Organische Chemie) (8 LP)	MQ-WiC (Projektarbeit) (8 LP)
PC-M (Physikalische Chemie) (7 LP)	MW-Che (Wahlpflichtmodul Chemie) (8 LP)	Masterarbeit (20 LP)
MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi I) (8 LP)	MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi III) (8 LP)	
MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi II) (8 LP)	MW-WiC (Wahlpflichtmodul WiWi IV) (8 LP)	

Die bei den einzelnen Modulbeschreibungen angegebenen Studiensemester beziehen sich auf einen Studienbeginn in einem Sommersemester!

Mobilitätsfenster

Gem. §8 der Prüfungsordnung werden selbstverständlich auch Studien- und Prüfungsleistungen berücksichtigt, die nicht an der HHU erbracht worden sind, sofern eine Gleichwertigkeit festgestellt worden ist.

Für die **rechtzeitige Beantragung** der Gleichwertigkeitsprüfung und die Vorlage von entsprechenden Ausbildungsbelegen sind die Studierenden verantwortlich.

Studierende, die für ein Semester einen Aufenthalt an einer anderen Hochschule planen, können dazu bis zu drei Wahlpflichtmodule des Typs MW-WiWi durch Module des Typs MW-EXT ersetzen. Die Möglichkeiten, durch extern erbrachte Studienleistungen auch andere Module gleichwertig zu ersetzen, werden hierdurch in keiner Weise eingeschränkt.

Wahlpflichtmodul extern (MW-EXT)				Stand: 04.03.2020		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie oder Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester		1.-3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
		V/Ü		240		
Individuell wählbare Kurse der Gasthochschule mit Inhalten auf Masterniveau im Umfang von mindestens 8 ECTS-Punkten. Zur Anrechnung ist ein Antrag an den Prüfungsausschuss Wirtschaftschemie zu stellen.						
Modulverantwortliche:r	Die/der Vorsitzende des Prüfungsausschusses Wirtschaftschemie.					
Beteiligte Dozenten						
Sprache	Unterrichtssprache der Gasthochschule.					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die an der Gasthochschule erworbenen Kenntnisse anwenden, • die erfolgreiche Bewährung in der akademischen Kultur der Gasthochschule dokumentieren, • interkulturelle Kommunikations-, Kooperations- und Reflexionsfähigkeiten anwenden. 						
Inhalte						
Die Studieninhalte ergeben sich aus dem gewählten Lehrangebot der Gasthochschule. Umfang und Anforderungen der gewählten Module sollen dabei denjenigen der wirtschaftswissenschaftlichen Wahlpflichtmodule an der HHU im Wesentlichen entsprechen oder sie übertreffen. Lehrveranstaltungen, deren Inhalte mit denen eines an der HHU bereits erfolgreich belegten Moduls übereinstimmen, können nicht angerechnet werden.						
Teilnahmevoraussetzungen	Entsprechend den Bedingungen der Gasthochschule.					
Studienleistungen	Entsprechend den Regelungen der Gasthochschule. Eine Anerkennung des Moduls gem. § 8 der Prüfungsordnung ist nur möglich, wenn eine Prüfungsleistung erbracht wird, die mit 4,0 (ausreichend) oder besser bewertet werden kann.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entsprechend den Bedingungen der Gasthochschule					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
				benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Entsprechend den Angaben der Gasthochschule.						
Literatur						
Entsprechend den Angaben der Gasthochschule.						

Module mit Zuordnung zum 1. Fachsemester

Pflichtmodule

OC-M (Pflichtmodul Organische Chemie)				Stand: 04.06.2019		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Pflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vertiefte Makromolekulare Chemie		V	2	60	30	100
Heterocyclenchemie		V	2	60	30	100
OC-M-Praktikum mit Seminar		PExp & Sem	6	120	90	15 & 30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. L. Hartmann, Prof. Dr. T. J. J. Müller, Dr. M. Tabatabai, PD Dr. Klaus Schaper.					
Sprache	deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Chemie (anteilig)			Pflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls:						
<ul style="list-style-type: none"> • synthetische und mechanistische Aspekte der modernen Polymerchemie analysieren und beurteilen, • Synthesewege und Analytik moderner Polymere vorhersagen und interpretieren, • Bedeutung und Relevanz von modernen Polymermaterialien und -synthesemethoden in der aktuellen Anwendung und Forschung erkennen und bewerten, • synthetische und mechanistische Aspekte der modernen Heterocyclenchemie analysieren und beurteilen, • Reaktivitäten von ausgewählten Heterocyclenklassen vorhersagen und interpretieren, • Bedeutung und Relevanz von Heterocyclen in der aktuellen Anwendung und Forschung erkennen und bewerten, • sicher mit komplexen Reaktionsapparaturen und Gefahrstoffen umgehen, • Möglichkeiten und Grenzen moderner Analyseverfahren benennen und gezielt geeignete Methoden zur Beantwortung von analytischen Fragestellungen auswählen, • Sachdiskussionen auch in größeren Gruppen folgen und diese durch angemessene mündliche Beiträge bereichern. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung Vertiefte Makromolekulare Chemie:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Kontrollierte radikalische Polymerisation: ATRP, NMP und RAFT Polymerisationen. • Cyclopolymerisation und acyclische Dien Metathese (ADMET) Polymerisation. • Ringöffnende Polymerisationen und ROMP. • Polyinsertion, Herstellung von HDPE, LDPE, PP. • Synthese von Kamm- und Stern Polymeren. • Leiter- und leitende Polymere. • Polymeranaloge Reaktionen. 						

Vorlesung Heterocyclenchemie:

- Systematische Nomenklatur (Hantzsch-Widman-Patterson-System, Austauschnomenklatur ("a"-System)).
- Fünfringheterocyclen (Synthesen, Vorkommen, Reaktionen).
- Ausgewählte Siebenringheterocyclen.
- Kleine Ringe (Drei- und viergliedrige Heterocyclen).
- Sechsringheterocyclen (Synthesen, Vorkommen, Reaktionen).
- Porphyrin.

OC-M-Praktikum:

- Fortgeschrittene Synthesemethoden.
- Reaktions- und Produktkontrolle mit kombinierten analytischen Methoden.
- Mehrstufensynthesen.

Im *Seminar* wird die Auswertung spektroskopischer Daten präsentiert und es werden relevante Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche diskutiert.

Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesungen, Praktikum und Seminar, erfolgreiche Bearbeitung aller Praktikumsaufgaben, Erstellen von Versuchsprotokollen, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des OC-M-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen werden auf ILIAS und im HIS-LSF veröffentlicht.			
Literatur			
S. Koltzenburg, M. Maskos, O. Nuyken, <i>Polymere. Synthese, Eigenschaften und Anwendungen</i> , Springer Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2014 .			
D. Braun, H. Cherdrón, M. Rehahn, H. Ritter, B. Voit, <i>Polymer Synthesis. Theory and Practice</i> , Springer, 5. Ed., Berlin/Heidelberg, 2013 .			
H.-G. Elias, <i>Makromoleküle</i> , Band 1-4, Wiley-VCH, 6., vollständig übera. Aufl., Weinheim, 1999 .			
T. Eicher, S. Hauptmann, A. Speicher, <i>The Chemistry of Heterocycles. Structures, Reactions, Synthesis, and Applications</i> , Wiley-VCH, 3., completely rev. and enl. Ed., Weinheim, 2012 .			
T. L. Gilchrist/H. Neunhoeffer (Hrsg.), <i>Heterocyclenchemie</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 .			
D. T. Davies, <i>Aromatische Heterocyclen</i> (Basistext Chemie 1), Wiley-VCH, Weinheim, 1995 .			
R. Brückner, S. Braukmüller, H.-D. Beckhaus, J. Dirksen, D. Goepfel, M. Oestreich, <i>Praktikum Präparative Organische Chemie. Organisch-Chemisches Fortgeschrittenenpraktikum</i> , Spektrum Akademischer Verlag, 2009 .			
Ausgewählte Synthesevorschriften und Artikel aus aktuellen Veröffentlichungen. Skriptum zum Praktikum.			

Wahlpflichtmodule Wirtschaftswissenschaften

Angebote im Sommersemester

Marketing (MW05)				Stand: 31.08.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
16	480	2 Semester	SoSe bis WiSe	1.-2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Customer Relationship Management		V	2	120	30	100
Kurs 2: Technologie- und Investitionsgütermarketing		V	2	120	30	100
Kurs 3: Marketingforschung und Consumer Neuroscience		V	2	120	30	100
Kurs 4: Marketing und Consumer Policy		V	2	120	30	100
Kurs 5: Innovationsmarketing		V	2	120	30	100
Kurs 6: Digitale Transformation und deren kundenorientierte Gestaltung		V	2	120	30	100
Erläuterung: Studierende wählen aus dem o.g. Kursangebot individuell vier Kurse aus. Die Kurse können in beliebiger Reihenfolge belegt werden. Kurs 1, Kurs 5 und Kurs 6 finden i.d.R. im Wintersemester statt, die Kurse 2 bis 4 finden i.d.R. im Sommersemester statt.						
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. Peter Kenning				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. Peter Kenning und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen und Lehrbeauftragte seines Lehrstuhls				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul	
		M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende sind nach erfolgreichem Abschluss des Moduls in der Lage						
<ul style="list-style-type: none"> • die mit den jeweiligen Kursen verbundenen Begriffe, Theorien, Systematiken, Phänomene und Methoden zu kennen, diskutieren und insbesondere anwenden zu können, • gemäß des Leitbildes des „generalistischen Marketingmanagers“ auf breites methodisches Wissen zurückzugreifen, um dieses nicht nur in betrieblichen Kontexten anzuwenden sondern auch um wissenschaftlich anschlussfähig zu sein. 						
Inhalte						
<i>Kurs 1: Customer Relationship Management</i>						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Grundlagen des Relationship Marketing. 2. Theoretische Fundierung des Relationship Marketing. 3. Konzeptionierung des Relationship Marketing. 4. Relationship Marketing im digitalen Kontext. 5. Aktuelle Ergebnisse und Methoden der CRM –Forschung. 6. Erste Ergebnisse der Consumer Neuroscience im CRM-Kontext. 						
<i>Kurs 2: Technologie - und Investitionsgütermarketing</i>						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Grundlagen und Besonderheiten des Technologie- und Industriegütermarketing. 2. Grundelemente der Marketingkonzeption. 3. Situationsanalyse auf Industriegütermärkten. 						

4. Industriegütermarketingstrategien.
5. Geschäftstypenspezifisches Marketing.

Kurs 3: Marketingforschung und Consumer Neuroscience

1. Einführung in die Marketingforschung.
2. Theorien der Marketingforschung.
3. Methoden der Marketingforschung.
4. Neuere Ansätze der Marketingforschung.
5. Methoden und Ergebnisse der Consumer Neuroscience im Kontext der Marketingforschung.

Kurs 4: Marketing und Consumer Policy

1. Einführung und begriffliche Grundlagen Marketing und Consumer Policy.
2. Grundlagen einer evidenzbasierten Verbraucherpolitik: Rahmenbedingungen der Verbraucherkwissenschaften.
3. Institutionen der Verbraucherpolitik.
4. Corporate Political Marketing, Instrumente der Verbraucherpolitik und innovative Ansätze der Verbraucherkwissenschaften.
5. Einblicke in relevante Bedarfsfelder im Rahmen von Marketing und Consumer Policy.

Kurs 5: Innovationsmarketing

1. Grundlagen und Besonderheiten des Innovationsmanagementprozesses.
2. Unterscheidung und Bewertung von Innovationsarten.
3. Ableitung von Innovationsstrategien auf Produkt- und Unternehmensebene.
4. Charakterisierung und Optimierung von Innovationsportfolios von Unternehmen.
5. Entwicklung und Markteinführung differenzierter Produkte.
6. Analyse der Innovationsfähigkeit und -leistung von Unternehmen.

Kurs 6: Digitale Transformation und deren kundenorientierte Gestaltung

1. Bedeutung und strategische Herausforderungen der digitalen Transformation.
2. Grundlagen einer kundenorientierten digitalen Transformation.
3. Erfolgsfaktoren der Implementierung.
4. Digitale Konzepte der Produkt- und Preispolitik.
5. Digitale Konzepte der Distributionspolitik.
6. 6. Digitale Konzepte der Kommunikationspolitik.

Teilnahmevoraussetzungen	Für alle Kurse sollten die Teilnehmer vertiefte Kenntnisse des Marketing-Verständnisses und Handelns besitzen. Für den Kurs 3 sollten die Teilnehmer darüber hinaus über Kenntnisse in der deskriptiven Statistik und ggfs. auch der explikativen Analyse verfügen. Diese können z.B. im Rahmen einer lehrstuhleigenen Projektarbeit (MQ-WiC) erworben werden.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur, in der Klausur werden Aufgaben zu allen Kursen gestellt, die Prüflinge wählen daraus die Aufgaben zu den vier gewählten Kursen.	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			16/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.			

Personalmanagement (MW16)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
16	480	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Strategische Funktionen des Personalmanagements		V	2	120	30	50
Kurs 2: Personalführung: Theorie und Gestaltung		V	2	120	30	50
Kurs 3: Grundlagen des Arbeitsrechtes		V	2	120	30	50
Kurs 4: Personalforschung und empirisches Studienobjekt		V	2	120	30	50
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Stefan Süß					
Beteiligte Dozenten	Kurs 1, 2, 4: Prof. Dr. Stefan Süß und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen und Lehrbeauftragte seines Lehrstuhls. Kurs 3: Prof. Dr. Andreas Feuerborn und Mitarbeiter/innen der Juristische Fakultät der HHU.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende sind nach Abschluss des Moduls in der Lage</p> <ul style="list-style-type: none"> • strategische Aspekte des Personalmanagements zu erläutern, • den Zusammenhang zwischen strategischen Funktionen des Personalmanagements und anderen Funktionen des Managements zu erläutern, • die Aussagen der wesentlichen Theorien der Personalführung wiederzugeben und kritisch zu würdigen, • zentrale Gestaltungsaspekte der Personalführung zu erläutern und anzuwenden, • Grundlagen des Arbeitsrechts zu beschreiben und auf ausgewählte Aufgabenfelder des Personalmanagements zu übertragen, • grundlegende Methoden der empirischen Personalforschung zu beschreiben sowie diese Methoden im Rahmen eigener empirischer Projekte anzuwenden. <p>Darüber hinaus eignet sich die Konzeption einzelner Kurse für die Integration von Fallstudien, die soziale Kompetenzen (z. B. Konfliktlösungsfähigkeit, Übernahme von Verantwortung, Durchsetzungsfähigkeit) sowie Methodenkompetenz fördern und zum Erwerb bzw. Ausbau von Präsentationstechniken beitragen.</p>						
Inhalte						
<p>Die Teilnehmer/innen setzen sich in diesem Modul vertiefend mit Personalmanagement auseinander, wobei sie dessen strategische Aufgaben studieren. Zudem sollen sie theoretische Erkenntnisse zur Personalführung sowie führungsbezogene Gestaltungsalternativen kennenlernen. Daneben werden ihnen die Grundlagen des Arbeitsrechts vermittelt und sie untersuchen im forschungsorientierten Studienprojekt selbstständig empirisch aktuelle Fragestellungen des Personalmanagements.</p> <p><i>Kurs 1: Strategische Funktionen des Personalmanagements</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Strategisches Personalmanagement. 2. Beschäftigungsverhältnisse und Arbeitszeitmanagement. 						

3. Personalcontrolling und Personalrisikomanagement.
4. Internationaler Personaleinsatz.
5. Talentmanagement.
6. Mitbestimmungsmanagement.
7. Personalmanagement und Ethik.

Kurs 2: Personalführung: Theorie und Gestaltung

1. Grundlagen der Personalführung.
2. Theorien der Führung.
3. Besondere Problem- und Gestaltungsbereiche der Führung.
4. Gestaltung der Führung.

Kurs 3: Grundlagen des Arbeitsrechts

1. Individualarbeitsrecht.
2. Kollektivarbeitsrecht.

Kurs 4: Personalforschung und empirisches Studienprojekt

In Kurs 4 erhalten die Teilnehmer/innen zunächst eine Einführung in die empirische Personalforschung, wobei alternativ qualitative oder quantitative Methoden im Vordergrund stehen. Im Anschluss führen sie in Gruppen kleinere empirische Projekte mit Bezug zur Personalforschung durch. Die Themen, zu denen das Studienprojekt angeboten wird, wechseln und greifen jeweils aktuelle praxisbezogene Entwicklungen im Personalmanagement auf.

Teilnahmevoraussetzungen	Es werden wirtschaftswissenschaftliche Fachkenntnisse vorausgesetzt. Für den Kurs 4 wird den Teilnehmer/innen darüber hinaus empfohlen, über grundlegende Kenntnisse in der deskriptiven Statistik zu verfügen.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			16/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.			

Advanced Theories in Accounting and Control (MW41)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Seminar 1: Rechnungslegung und Wirtschaftsprüfung		Sem	2	120	30	25
Seminar 2: Management Control Systems		Sem	2	120	30	25
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger, Jun.-Prof. Dr. Daniel Reimsbach und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen des Lehrstuhls.					
Sprache	deutsch, teilweise englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Die Studierenden vertiefen in diesem Modul mit Hilfe forschenden Lernens</p> <ul style="list-style-type: none"> ihre Kompetenzen im Umgang mit der betriebswirtschaftlichen Forschungsliteratur im Fach Accounting insbesondere in den Teilgebieten Internationale Rechnungslegung, Wirtschaftsprüfung und Controlling sowie den gestaltungsorientierten Transfer bzw. die eigenständige Entwicklung betriebswirtschaftlicher Problemlösungen auf umfassende Fragestellungen und Praxis-Cases aus den genannten Fächern. <p>Dabei wird ein besonderer Fokus auf die Einbettung der behandelten Inhalte und Fallstudien in eine ganzheitliche Betrachtung der betriebswirtschaftlichen Prozesse innerhalb der Unternehmenssteuerung, -prüfung und -überwachung gelegt.</p> <p>Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage</p> <ul style="list-style-type: none"> praktische Problemstellungen im Accounting zu identifizieren und zu bewerten, die betriebswirtschaftliche Forschungsliteratur gestaltungsorientiert auf die Lösung dieser Probleme zu übertragen, die entwickelten bzw. alternativen Lösungsvorschläge kritisch zu diskutieren, Schnittstellen der Accountingfunktionen zu anderen betriebswirtschaftlichen Funktionen, z.B. Finance, Organisation/HR, Management/Strategie, F&E, Marketing oder Operations, zu erkennen und zu gestalten. <p>Insbesondere über schriftliche Arbeiten, Präsentationen und Diskussionen werden Lernziel und Kompetenzen im Rahmen einer interaktiven, auf den Diskurs und konstruktives Feedback zwischen Studierenden und Lehrenden, aber gerade auch der Studierenden untereinander, ausgelegten Lehre vermittelt.</p>						
Inhalte						
<i>Seminar 1: Rechnungslegung und Wirtschaftsprüfung</i>						
<ol style="list-style-type: none"> Bilanzierung, Bewertung und Prüfung wichtiger Elemente der Finanzberichterstattung Prüfungsplanung und Prüfungshandlungen. Urteilsbildung und -mitteilung in der Wirtschaftsprüfung. Haftung und Unabhängigkeit des Wirtschaftsprüfers. 						
<i>Seminar 2: Management Control Systems</i>						

<ol style="list-style-type: none"> 1. Object-of-Control-Framework. 2. Management Controls and their functional and dysfunctional effects. 3. Implementing financial results controls. 4. Implementing action and people controls. 5. Ethical issues in management control. 			
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreicher Abschluss des Moduls MW40. Ein Teil der Kursliteratur bzw. Kursinhalte wird in englischer Sprache vermittelt, gute bis sehr gute Englischkenntnisse sind deshalb Voraussetzung.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen. Anfertigung einer schriftlichen Ausarbeitung.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Aktive Teilnahme an jeweils 80% der Seminartermine.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Prüfung gem. §9 der PO		benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen unter http://www.accounting.hhu.de und http://www.rechnungslegung.hhu.de , sowie auf ILIAS (siehe hier auch den eCampus Accounting) und im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch die Lehrenden gegeben.			

Advanced Entrepreneurial Finance (MW42)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Course 1: Financial Management in Entrepreneurial Firms		V	2	120	30	30
Course 2: Venture Capital & Private Equity		V	2	120	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Eva Lutz					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Eva Lutz und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen ihres Lehrstuhls.					
Sprache	englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende sind nach Abschluss des Moduls in der Lage <ul style="list-style-type: none"> • verschiedene Finanzierungsinstrumente (Eigenkapital und Fremdkapital) für eigentümergeleitete Unternehmen zu beschreiben und die Kapitalstrukturentscheidung zu analysieren, • die Hebel des Working Capital Managements zu erklären, • zwischen verschiedenen Formen des Financial Forecast (Cash Budgets, real vs. nominales Financial Forecasting, Umsatzprognose, Kostenprognose) zu unterscheiden, • ein integriertes Finanzmodell zu erstellen, • die Fondsstrukturen von Venture-Capital und Private-Equity-Gesellschaften zu erläutern und die sich daraus ergebenden Dynamiken aus der Perspektive der Fondsinvestoren (Limited Partners) und der Fondsmanager (General Partner) zu erklären, • zwischen verschiedenen Performance-Maßen für Venture Capital und Private Equity zu unterscheiden und deren Vor- sowie Nachteile herauszuarbeiten, • Venture-Capital und Private-Equity-Transaktionen hinsichtlich der Due Diligence, der Investitionsstrukturierung, der Betreuungsphase und den Ausstiegsoptionen zu analysieren. Durch die Bearbeitung von Fallstudien erlangen die Studierenden die Fähigkeit, die theoretischen Erkenntnisse aus den Lehrvorträgen direkt in einem realistischen Kontext anzuwenden. Praxisvorträge helfen den Studierenden, das erlernte Wissen zu vertiefen.						
Inhalte						
<i>Course 1: Financial Management in Entrepreneurial Firms</i>						
1. Introduction to Financial Management in Entrepreneurial Firms. <ol style="list-style-type: none"> 1.1. Equity and debt instruments. 1.2. Risk and leverage. 2. Working capital management. 3. Financial forecasting. <ol style="list-style-type: none"> 3.1. Cash budgets. 3.2. Real vs. nominal forecasting. 3.3. Approaches to sales forecasting. 3.4. Cost forecasting. 4. Financial modeling.						
<i>Course 2: Venture Capital & Private Equity</i>						

<ol style="list-style-type: none"> 1. Deal-level analysis. <ol style="list-style-type: none"> 1.1. Deal origination. 1.2. Due diligence. 1.3. Investment structuring. 1.4. Post-deal development. 1.5. Harvesting. 2. Fund-level analysis. <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Venture capital and private equity as asset class. 2.2. Fund economics. 2.3. Fund due diligence. 2.4. Performance measurement. 			
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, gute bis sehr gute Englischkenntnisse sind empfehlenswert.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	60	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.			

Praxisseminar Unternehmensgründung (MW51)				Stand: 08.03.2019		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Start-up Werkstatt		Sem	4	240	60	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Eva Lutz					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Eva Lutz und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen und Lehrbeauftragte ihres Lehrstuhls.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Nach erfolgreichem Abschluss dieses Moduls verfügen Studierende über theoretische und praktische Kenntnisse einer Unternehmensgründung. Das Seminar vermittelt praktisches Wissen zum Thema Unternehmensgründung durch die Umsetzung einer Geschäftsidee.</p> <p>Nach Abschluss des Moduls sind Studierende in der Lage:</p> <ul style="list-style-type: none"> • real existierende Problemfelder während einer Unternehmensgründung zu erkennen, zu bewerten und eigene Lösungsansätze zu entwickeln und zu testen, • unternehmerische Gelegenheiten wahrzunehmen und umzusetzen, • eine Marktanalyse und Marktpositionierung vorzunehmen, • Geschäftsmodelle zu erstellen, zu analysieren und strukturiert ein Unternehmen zu gründen. 						
Inhalte						
<p>In diesem Seminar werden Studierende zu Gründer/innen. Basierend auf eigenen Ideen lernen Studierendenteams in praktischen Schritten ein neues Unternehmen zu gründen. Anhand von Markt-, Kundenbedarfs- und Wettbewerbsanalysen entwickeln Studierende über das Semester hinweg ein eigenes Produkt, das sie durch die Konzeption einer geeigneten Marketingstrategie an Kunden testen.</p> <p>Am Ende des Seminars versuchen Studierende durch einen Investoren-Pitch relevante Interessengruppen von ihrem Unternehmen zu überzeugen.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Für die Zulassung zum Modul ist ein Bewerbungsverfahren erfolgreich zu absolvieren. Nähere Informationen hierzu können der Homepage der Lehrstuhlseite (ef.hhu.de) entnommen werden.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Seminaren und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Präsentation			benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten der Modulverantwortlichen und auf der Internetseiten des CEDUS.						
Literatur						
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.						

Forschen lernen (MW54)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschen lernen: Forschungsorientiertes empirisches wissenschaftliches Arbeiten in den Wirtschaftswissenschaften		V	4	240	60	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen ihres Lehrstuhls					
Sprache	deutsch und englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> wissenschaftstheoretische Grundlagen erläutern, eigenständig Hypothesen entwickeln, Konzepte durch Operationalisierung einer empirischen Erfassung zugänglich machen, Forschungsdesigns für den Test von Hypothesen entwerfen und beurteilen, Daten hinsichtlich ihrer Verwendbarkeit für den Test empirischer Hypothesen beurteilen, das Zutreffen einer Hypothese durch die Analyse von Daten beurteilen und zu Schlussfolgerungen kommen. 						
Inhalte						
<i>Forschen lernen: Forschungsorientiertes empirisches wissenschaftliches Arbeiten in der BWL</i> <ol style="list-style-type: none"> Notwendigkeit und Bedeutung von Forschung in den Wirtschaftswissenschaften. Wissenschaftstheorie. Erklärungen. Konzeptualisierung und Operationalisierung. Experimentelle und nicht-experimentelle Forschungsdesigns. Auswertung von experimentell und nicht-experimentellen Daten. Zum Kurs gehören ein ganztägiger SPSS Kurs und eine Bibliotheksschulung.						
Teilnahmevoraussetzungen	Ein Teil der Kursliteratur bzw. Kursinhalte wird in englischer Sprache vermittelt, gute bis sehr gute Englischkenntnisse sind deshalb Voraussetzung. Kenntnisse der empirischen Wirtschaftsforschung werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Lehrveranstaltungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen, Anfertigen von Referaten und schriftlichen Ausarbeitungen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Referate, Präsentationen, schriftliche Ausarbeitung			benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten der Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.
Literatur
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch die Lehrende gegeben.

Substainability Management Research (MW57)				Stand: 10.09.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Substainability Management Research		V	4	240	60	20
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Rüdiger Hahn					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Rüdiger Hahn und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen seines Lehrstuhls.					
Sprache	englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende sind nach erfolgreichem Abschluss des Moduls in der Lage <ul style="list-style-type: none"> • Kriterien guten wissenschaftlichen Arbeitens zu benennen, • Kriterien wissenschaftlichen Schreibens und den Prozess wissenschaftlicher Veröffentlichungen zu erklären, • den Stand der Forschung ausgewählten Themen im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements zu überblicken; • den theoretischen Beitrag neuer Forschungserkenntnisse im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements kritisch zu würdigen, • den praktischen Beitrag neuer Forschungserkenntnisse im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements kritisch zu würdigen, • aktuelle Studien im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements kritisch zu diskutieren. 						
Inhalte						
In diesem Modul werden Studierende zu Gutachtern wissenschaftlicher Arbeiten im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements. Aufbauend auf einleitenden Präsentationen und eigenständigem Literaturstudium zu wissenschaftlichen Qualitätskriterien und Veröffentlichungsprozessen werden Studierendenteams sich mit aktuellen empirischen Studien zum Nachhaltigkeitsmanagement auseinandersetzen. In verschiedenen Schritten wird die Qualität von Forschungsarbeiten in Gruppenarbeiten, Präsentationen und Plenardiskussionen erörtert und die Studierenden beurteilen eigenständig den jeweiligen Forschungsbeitrag der Studien und machen Verbesserungsvorschläge.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, gute bis sehr gute Englischkenntnisse sind empfehlenswert.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen. Anfertigung einer schriftlichen Ausarbeitung und Präsentation.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Prüfung gem. §9 der PO			benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.						
Literatur						
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.						

Angebote im Wintersemester

Organizational Behavior (MW18)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Grundlagen des Organizational Behavior		V	2	120	30	50
Kurs 2: Forschung zu Organizational Behavior		V	2	120	30	50
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Stefan Süß					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Stefan Süß und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen und Lehrbeauftragte seines Lehrstuhls.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. BWL				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. VWL				Wahlpflichtmodul	
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende können nach Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> wesentliche Aspekte des Verhaltens von Individuen in Organisationen darstellen, erklären, wie die Motivation von Individuen entsteht und wie sie gefördert werden kann, Prozesse in Gruppen erklären, den Stand der Forschung zu Organizational Behavior überblicken, grundlegende Methoden der empirischen Organizational-Behavior-Forschung beschreiben sowie diese Methoden anwenden. <p>Darüber hinaus eignet sich die Konzeption einzelner Kurse für die Integration von Fallstudien, die soziale Kompetenzen (Konfliktlösungsfähigkeit, Übernahme von Verantwortung, Durchsetzungsfähigkeit) fördern und zum Erwerb bzw. Ausbau von Präsentationstechniken beitragen. Durch die detaillierte Analyse von aktuellen Forschungsarbeiten oder eigene empirische Forschung in Kurs 2 erhalten die Studierenden einen Einblick in die besonderen Herausforderungen und Lösungsansätze der Organizational-Behavior-Forschung.</p>						
Inhalte						
<p>Die Teilnehmer/innen sollen in die Lage versetzt werden, das Verhalten von Individuen in Organisationen besser verstehen und erklären zu können. Zudem kennen sie den Stand der Forschung zu Organizational Behavior sowie die wichtigsten Methoden der Organizational-Behavior-Forschung.</p> <p><i>Kurs 1: Grundlagen des Organizational Behavior</i></p> <ol style="list-style-type: none"> Einleitung. Individuelle Ebene. Gruppenbezogene Ebene. Organisationsbezogene Ebene. <p><i>Kurs 2: Forschung zu Organizational Behavior</i></p> <ol style="list-style-type: none"> Empirische Organizational-Behavior-Forschung. Analyse aktueller empirischer Forschungsarbeiten des Organizational Behavior. oder Anwendung der Methoden und Erkenntnisse der Forschung zu Organizational Behavior. 						

Teilnahmevoraussetzungen	Für alle Kurse sollten die Teilnehmer wirtschaftswissenschaftliche Fachkenntnisse vorausgesetzt. Für den Kurs 2 sollten die Teilnehmer darüber hinaus über Kenntnisse in der deskriptiven Statistik verfügen.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur oder Seminararbeit und Vortrag (Die Prüfungsform wird zu Beginn des Moduls bekanntgegeben.)	60	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			16/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.			

Advanced Theories in Accounting and Control (MW40)				Stand: 12.01.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Advanced Controlling		V	2	120	30	40
Kurs 2: Kapitalmarktorientierte Rechnungslegung		V	2	120	30	40
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Barbara E. Weißenberger sowie Honorarprofessoren, Lehrbeauftragte und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen ihres Lehrstuhls.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende sind nach erfolgreichem Abschluss des Moduls in der Lage <ul style="list-style-type: none"> • Theorien der externen und internen Rechnungslegung und des Controllings für die eigenständige Analyse und Lösung betriebswirtschaftliche Fragestellungen anzuwenden, • Regelungen, Konzepte und Instrumente in der externen Rechnungslegung und dem Controlling theoriegeleitet kritisch zu würdigen und weiterzuentwickeln, • Schnittstellen zwischen externer und interner Rechnungslegung bzw. Controlling zu identifizieren, • die vielfältigen Wechselbeziehungen zwischen den beiden Teilgebieten der Rechnungslegung in der betriebswirtschaftlichen Analyse sachgerecht zu berücksichtigen, • die aktuelle Forschung im Fach Accounting inhaltlich und methodisch zu systematisieren, zu erläutern und kritisch zu diskutieren. 						
Inhalte						
<i>Kurs 1: Advanced Controlling</i>						
1. Theorien der Anreizgestaltung und der Performance-Messung. 2. Verrechnungspreise und Kostenallokationen. 3. Budgetierung und Anreizgestaltung. 4. Investitions-/Beteiligungscontrolling und wertorientierte Steuerung. 5. Nachhaltigkeitscontrolling.						
<i>Kurs 2: Kapitalmarktorientierte Rechnungslegung</i>						
1. Informationsfunktion der kapitalmarktorientierten Rechnungslegung. 2. Publizitätspflichten, Anreize zur freiwilligen Publizität und Integrated Reporting. 3. Wertrelevanz von Finanzberichten. 4. Bilanzpolitik und Bilanzanalyse. 5. Corporate Governance. 6. Spezialfragen innerhalb der IFRS (z.B. Segmentberichterstattung, Lagebericht, Immaterielle Vermögenswerte, Pensionsrückstellungen, Finanzinstrumente, Gesamtergebnisrechnung).						
Teilnahmevoraussetzungen	Als Vorbereitung wird das Absolvieren der WBT-Serien zu den Veranstaltungen des Moduls BW05, die über den eCampus Accounting auf ILIAS zur Verfügung gestellt werden, empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen. Online-basierte Tests zur laufenden Lernkontrolle (WBT).					
Zulassungsvoraussetzung	keine					

zur Modulprüfung			
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	90	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen unter http://www.accounting.hhu.de und http://www.rechnungswesen.hhu.de , sowie auf ILIAS (siehe hier auch den eCampus Accounting) und im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch die Lehrenden gegeben.			

Time Series Analysis (MW82)				Stand: 01.10.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Time Series Analysis		V	2	120	30	30
Kurs 2: Time Series Analysis – Übung		Üb	2	120	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Heimeshoff					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Heimeshoff, Dr. Lidan Großmaß und wissenschaftliche Mitarbeiter/innen des DICE.					
Sprache	deutsch oder englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Studierende erhalten durch diesen Kurs Fähigkeiten und Techniken um Zeitreihendaten zu analysieren, zunächst auf dem univariaten und später auf dem multivariaten Level. Weiterhin wird eine Einführung in Konzepte und Modelle für maschinelles Lernen im Kontext großer Datensätze gegeben.</p> <p><i>Kurs 1</i> behandelt Techniken zur Analyse von Zeitreihendaten auf der univariaten und multivariaten Ebene. Der Fokus wird auf die Anwendung dieser Techniken liegen um ökonomische Daten zu analysieren. Weiterhin wird eine erste Einführung in Konzepte und Modelle von maschinelles Lernen für große Datensätze gegeben.</p> <p>In <i>Kurs 2</i> wird es sowohl Übungen am Computer als auch Übungen geben. Studierende werden lernen wie mit Hilfe von dem Statistikprogramm R die wichtigsten Modelle geschätzt werden können und Probleme, die in Kurs 1 thematisiert wurden, gelöst werden können.</p>						
Inhalte						
<i>Kurs 1 und 2:</i>						
<ol style="list-style-type: none"> 1. ARMA models. 2. Nonlinear Models. 3. Volatility Modelling. 4. Vector Autogressive Models. 5. Cointegration. 6. Forecasting. 7. Regression/Classification Trees. 8. Shrinkage Estimation. 9. Cluster Analysis. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Es wird erwartet, dass Studierende Basiskenntnisse in dem Statistikprogramm R besitzen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Vorlesungen und der Gruppenarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		90	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des DICE, auf ILIAS oder im HIS-LSF.						
Literatur						
Lutkepohl, New Introduction to Multiple Time Series (2006)						

Hamilton, Time Series Analysis (1994)

Brockwell and Davis, Introduction to Time Series and Forecasting (2002)

Hastie, Tibshirani, Friedman, The Elements of Statistical Learning, 2nd Ed.

Purchasing and Supply management (MW123)				Stand: 16.01.2024		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Kurs 1: Purchasing and Supply Management Theory		V	2	120	30	20
Kurs 2: Purchasing and Supply Management in Practice		V	2	120	30	20
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Kirstin Scholten					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Kirstin Scholten					
Sprache	englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. BWL			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. VWL			Wahlpflichtmodul		
	M. A. Kunstvermittlung und Kulturmanagement			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>After completing the module, students will be able to</p> <ul style="list-style-type: none"> • Discuss the fundamentals of contemporary procurement and supply management at an advanced level, • Identify, explain and scrutinize prevailing purchasing concepts and theoretical Frameworks, • Assess and contrast relevant scientific papers, • Synthesize theory and practice, • Apply subject knowledge and general management skills in a project. 						
Inhalte						
<p>Purchasing is a significant contemporary business function. It oversees acquisitions in an organization spanning from technical equipment to production inputs, marketing materials, or personnel. Despite being frequently perceived as a support function, purchasing holds the potential to contribute beyond mere cost savings, actively participating in the value creation of a company. This involvement includes managing both internal and external relationships, ensuring quality, and safeguarding the feasibility of new product development in terms of availability of material or bought in knowledge from supply chain partners.</p> <p>Course 1:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Internal Positioning of Purchasing, Purchasing Skills • Purchasing Strategies and Tactics • Buyer-Supplier Relationship (Management) • Contracting and Contract Management • Risk Management • Technology in Purchasing <p>Course 2:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Project Management: Defining, discussing and working on a joint project leading to a gradable outcome of the course (TBD by the students e.g., a series of podcasts, a brochure, etc.) • Case Studies • Skill Workshops (Project Management, Negotiation, Structuring the Supply Base) 						

Teilnahmevoraussetzungen	Management and business administration knowledge required, evident in at least two successfully completed bachelor courses in the area of management and business administration.		
Studienleistungen			
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Sonstige Prüfungsleistung		benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten des Lehrenden, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn des Moduls durch den Lehrenden gegeben.			

Weitere Angebote zum Wahlpflichtmodul-BWL (MW-WiWi)

Gemäß § 2 Abs. 3 der Prüfungsordnung können spezielle Module aus dem Lehrangebot der Wirtschaftswissenschaften als Wahlpflichtmodule gewählt werden.

Die Liste der angebotenen Wahlpflichtmodule wird im Modulhandbuch bekanntgegeben. Wahlpflichtmodule, die dort nicht explizit genannt werden, dürfen nur nach **vorheriger Zustimmung** der jeweils Lehrenden belegt werden. Für die Zulassung gelten die Regelungen gem. § 9 Abs. 3 der Prüfungsordnung. Eine Anrechnung von Wahlpflichtmodulen, die nicht explizit für Studierende der Wirtschaftschemie ausgewiesen sind, ist nur nach einer Genehmigung durch den Prüfungsausschuss möglich.

Mit der Wahl eines Moduls gelten die in der jeweiligen Modulbeschreibung für das Modul festgelegten Regeln zur Vergabe der Leistungspunkte und zur Modulprüfung. Insgesamt müssen Studierende für Wahlpflichtmodul Wirtschaftswissenschaften-BWL (MW-WiWi) mindestens 16 ECTS-Leistungspunkte erwerben. Wird diese Leistung in mehr als einem Wahlpflichtmodul erbracht, errechnet sich die zugeordnete Modulnote als gewichtetes Mittel der gewählten Module. Bei der Gesamtnote des Bachelorstudienengangs geht diese Modulnote unabhängig von der Zahl der erworbenen ECTS-Leistungspunkte mit einem Stellenwert von 16/110 ein.

Außerdem ist zu beachten, dass eine Terminüberschneidung von Wahlpflichtveranstaltungen auch mit Pflichtveranstaltungen grundsätzlich nicht für alle Wahlmöglichkeiten ausgeschlossen werden kann und ggf. von Studierenden, die solche Wahlpflichtveranstaltungen wählen, gebilligt werden muss.

Wahlpflichtmodule Chemie**Angebote im Sommersemester**

Crystallographic software for chemists (CrystSoft)				Stand: 06.03.2024		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Molecular graphics, SCXRD and PXRD software, lectures		V	2	70	30	15
CrystSoft, exercise		Ü	2	80	30	15
Crystsoft, practicum		PExp	4	90	60	15
Modulverantwortliche:r	Dr. István Boldog					
Beteiligte Dozierende	Dr. István Boldog					
Sprache	English (Unterricht) & Deutsch (Diskussion, wenn nötig)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls:						
<ul style="list-style-type: none"> • kompetente molekulare Zeichnungen erstellen, • Einkristalldaten lösen, verfeinern und veröffentlichen, • Kenntnisse über die Verarbeitung von Pulverbeugungsdaten haben, • spezieller Software für die Suche und topologische Analyse verwenden. 						
Inhalte						
<i>I. Molecular graphics (Mercury and Diamond; optionally CrystalMaker and Olex as a drawing tool).</i>						
1. Structural aspects: generation of a structure (range vs coordination spheres), filtering/connectivity/atom&bond list techniques for productivity.						
2. Style aspects: 2D and 3D graphics, what is 3D rendering (the use of POV-Ray and, optionally, Blender), lighting and fog, central and parallel projections, common and special styles (wireframe/polyhedra as well as broken bonds), using a grid.						
3. "How-to-practicum": to make graphics for a simple molecular structure (ORTEP-style, simple packing, etc.), to present a complex 3D structure, to make a video/motion picture, to create a visual-abstract/frontpage prototypes.						
4. Basic understanding of topological analysis. Manual simplification of a complex structure for topological analysis using Diamond software.						
<i>II. Single crystal X-ray data-based structure solution and refinement.</i>						
1. Data preparation and space group determination (XPREP), structure solution (direct methods as implemented in SHELXS, Superflip algorithm, notion about the Patterson method) and refinement (primarily with Olex, acquaintance with SHELXLe as a GUI).						
2. Typical problems: using restraints and constraints, treatment of hydrogen atoms, disorder, acquaintance with practical cases of twinning.						
3. "How-to-practicum": standard solution and refinement, verification and preparation for publication (cif-tools: EnCIFer, PubCIF, CheckCIF/Platon).						
<i>III. Powder X-ray data processing (Jana, optionally FullProof and Topas; Mercury and Diamond for simulation of PXRD patterns).</i>						

1. Data preparation and straightforward phase analysis (visual 'finger-print' comparison on stacked graphs).
2. Indexing (ITO, DICVOL, TREOR).
3. Le-Bail and Powley fitting (establishing the correctness of the cell assignment).
4. Notion about structure solution (using Superflip algorithm) and Rietveld refinement (also by using a plausible starting model).

IV. Specialized software, incl. databanks:

1. Crystallographic databases: CSD and notion about alternatives.

Topological software (short introduction to Topos/ToposPro-online), surface area and void volume for porous structures (CrystalExplorer, Platon).

Teilnahmevoraussetzungen	Vorherige Teilnahme an ChemKrist wird empfohlen.		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme am Praktikum, Anfertigung eines Berichts, Absolvierung eines unbenoteten Tests.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Aktive Teilnahme am Praktikum, Anfertigung eines Berichts, Absolvierung eines unbenoteten Tests.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	45-60	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
Documentation for the respective software. Primary software list (in order of decreasing importance): OLEX, SHELX package (additionally to documentation it is recommended the book of P. Müller, Crystal structure refinement, "A crystallographer's guide to SHELXL"), Diamond, Jana, Mercury (CCDC), Platon, SHELXL, EnCIFer, PubCIF, TOPOS.			

Nanochemie (NanoChem)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Nanochemie		V	1	40	15	20
NanoChem-Seminar		Sem	1	35	15	20
NanoChem-Praktikum		PExp	8	165	120	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Janiak					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. C. Janiak					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> erworbene Kenntnisse und Methodenkompetenz auf dem Gebiet der nanoporösen und nanopartikulären Materialforschung anwenden, Synthese und Charakterisierung neuer nanoporöser und nanopartikulärer Materialien planen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Nanoporöse Materialien am Beispiel der Metall-organischen Netzwerke (MOFs): <ul style="list-style-type: none"> Einführung zu MOFs im Vergleich mit anderen porösen Materialien. Grundlegende MOF-Strukturen und deren Aufbau. Syntheserouten zu MOFs Materialien mögliche Anwendungen von MOFs. Nanopartikuläre Materialien: <ul style="list-style-type: none"> Synthesen, Charakterisierungen und Anwendungen von Nanomaterialien. Methoden zur Visualisierung von Nanoteilchen. Metall-Nanopartikel in der Katalyse. 						
<i>Praktikum:</i> jeweils ausgewählte Reaktionen bzw. Versuche, die die Prinzipien der Vorlesungsinhalte verdeutlichen.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des NanoChem-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
VL-Präsentationen. Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten.						

Chemische Kristallographie (ChemKrist)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Chemische Kristallographie		V	3	105	45	30
ChemKrist-Übung		Ü	1	45	15	30
ChemKrist-Praktikum		PExp	4	90	60	15
Modulverantwortliche:r		Dr. Guido J. Reiß.				
Beteiligte Dozenten		Dr. Guido J. Reiß.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> vertiefende theoretischen Grundlagen der Kristallstrukturanalyse beschreiben. einen umfassenden Überblick über die experimentellen Möglichkeiten zur Charakterisierung von Einzelkristallen und Kristallpulvern mittels Röntgenbeugung geben. eine Kristallstrukturanalyse durchführen und dokumentieren. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Erzeugung von Röntgenstrahlen und Strahlenschutz. Wellenkinematische Theorie der Röntgenbeugung, die Deutungen des Beugungsphänomens von Laue und Bragg. Translationenbehaftete Symmetrieelemente. Fourier-Reihen in der Kristallographie. Experimentelle Methoden (Kristallzucht und -auswahl, kurze Einführung in die klassischen Filmmethoden, Vierkreisdiffraktometer, Imaging Plate- und CCD-Diffraktometer, Intensitätsdatensammlung). Strukturlösung mit direkten Methoden bzw. Pattersonfunktion. kritische Beurteilung der Ergebnisse von Kristallstrukturanalysen. Pseudosymmetriephänomene. Durchführung einer Kristallstrukturbestimmung und Erstellung einer CIF-Publikation. Grundlgen der Rietveld-Methode zur Kristallstrukturverfeinerung. Kristallgitter und Symmetrie. Das Reziproke Gitter, die Ewald-Konstruktion, Atomformfaktoren und Strukturformfaktoren Systematische Auslösungen und die Bestimmung von Raumgruppen. Optische Diffraktometrie. Datenreduktion. Strukturverfeinerung und Qualitätsindikatoren. Kristallographische Datenbanken und Crystallographic Information Files. Aperiodische Kristallstrukturen. Grundlagen der Pulverdiffraktometrie und ihrer Meßmethoden, allgemeiner Informationsgehalt eines Röntgen-Pulverdiagramms. Methoden der Datenreduktion eines Röntgen-Pulverdiagramms. 						

<ul style="list-style-type: none"> • Peakprofilfunktionen, Korrekturfaktoren. • Fortschritt einer Rietveld-Verfeinerung (R-Faktoren). • Modellierung eines Pulverdiagramms ohne Strukturmodell („LeBail Fit“). • Quantitative Phasenanalyse mit der Rietveld-Methode. 			
Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive Teilnahme mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des ChemKrist-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
W. Massa, <i>Kristallstrukturbestimmung</i> , Teubner, 5., überarb. Aufl., Wiesbaden 2007 . W. Borchardt-Ott, H. Sowa, <i>Kristallographie. Eine Einführung für Studierende der Naturwissenschaften</i> , Springer, 9. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2018 . C. Giacovazzo (Hrsg.), <i>Fundamentals of Crystallography</i> , Oxford University Press, 3., rev. Ed., Oxford, 2011 . H. Krischner, B. Koppelhuber-Bitschnau, <i>Röntgenstrukturanalyse und Rietveld-Methode</i> , Vieweg, 5., neubearb. Aufl., Braunschweig, 1994 .			

Anorganische Photoaktive Materialien II - Anwendungen (PhotMat II)				Stand: 19.03.2024		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung Anorgan. Photoaktive Mat.		V	2	90	30	30
Phot-Seminar		Sem	1	30	15	30
Phot-Praktikum*		PExp	6	120	90	15
*Anmerkung: Das Praktikum wird vsl. In der vorlesungsfreien Zeit als Blockpraktikum stattfinden.						
Modulverantwortliche:r		Jun. Prof. Dr. Markus Suta				
Beteiligte Dozierende		Jun. Prof. Dr. Markus Suta				
Sprache		Deutsch, auf Wunsch englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Absorption und Lumineszenz typischer anorganischer Emittierender sowie Einflussmöglichkeiten darauf erkennen, differenzieren, und bewerten, die verschiedenen emittierenden Zentren in anorganischen Verbindungen differenzieren und beurteilen (Übergangsmetall-Ionen, s²-Ionen, Lanthanoide und Actinoide, Exzitonen), die Funktion optischer Bauelemente und Voraussetzungen anorganischer photoaktiver Materialien für die Anwendung in diesen Elementen bewerten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Lumineszenz gängiger Übergangsmetalle (V³⁺, Cr³⁺, Mn^{2+/4+}, Fe^{2+/3+}, Co²⁺, Ni²⁺) Lumineszenz der dreiwertigen Lanthanoide und Actinoide – Judd-Ofelt-Mechanismus und Abweichungen Lumineszenz der zweiwertigen und vierwertigen Lanthanoide und Actinoide – Bedeutung der 5d- bzw. 6d-Orbitale Lumineszenz der s²-Ionen (In⁺, Ga⁺, Sn²⁺, Pb²⁺, Sb³⁺, Bi³⁺) exzitronische Lumineszenz in halbleitenden Nanokristallen und 2D-Schichtmaterialien (Binäre und ternäre Chalkogenide und Pnictide; Halogenidoperowskite und – elpasolite) Lumineszenz von Farbzentren und Defekten (z.B. F-Zentren in Alkalihalogeniden, NV-Zentren in Diamanten) Multiphotonenkonversion (Aufkonversion, Quanten-Cutting) Nichtlineare optische Effekte (Frequenzvervielfachung und -mischung) und Voraussetzungen kristalliner Verbindungen dafür Modellierung und theoretisches Verständnis optischer Übergänge Moderne Anwendungen optischer Materialien mit Fokus auf Anforderungen: Phosphor-konvertierte LEDs & Farbdisplays, medizinische Bildgebung, optische Manometrie & Thermometrie, optische Informationsspeicher & Logikgatter, Festkörper-Laser und Laserkühlung, Photovoltaik, Photonik und Einzelphotonenquellen, zirkular polarisierte Lumineszenz (CPL) zur Charakterisierung chiraler Koordinationsverbindungen. 						
<i>Praktikum:</i>						

- Analyse und Vergleich der spektroskopischen Daten (steady-state, zeitaufgelöst) ausgewählter Leuchtstoffe.
- Leistungsabhängige Intensitätsbetrachtung eines Multiphotonenkonversions-Materials.
- Untersuchung und Modellierung eines einfachen Energietransfer-Prozesses.
- Evaluierung eines optischen Thermometers.

Seminar: Präsentation aktueller Fachpublikationen durch die Studierenden im Rahmen des Mitarbeitenseminars

Teilnahmevoraussetzungen	Grundkenntnisse der PhotMat I sind sehr zu empfehlen.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag, Anfertigen von Protokollen.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Prüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
B. Henderson, G. Imbusch, <i>Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i> , Oxford University Press, Oxford/New York, 1989 . G. Blasse, B. C. Grabmaier, <i>Luminescent Materials</i> , Springer, Berlin/Heidelberg/New York, 1994 . J. García Solé, L. E. Bausá, D. Jaque, <i>An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i> , John Wiley & Sons, Chichester, 2005 . J. Lakowicz, <i>Principles of Fluorescence Spectroscopy</i> , Springer, 3. Ed., New York, 2006 . C. Ronda, <i>Luminescence – From Theory to Applications</i> , Wiley, 2. Ed., Oxford/New York, 2010 . M. Fox, <i>Optical Properties of Solids</i> , Oxford University Press, 2. Ed., Oxford/New York, 2010 . R.-S. Liu, X.-J. Wang, <i>Phosphor Handbook – Fundamentals of Luminescence</i> , 3. Ed., CRC Press, Boca Raton, 2022 . Ausgewählte (Review-)Artikel aus der Fachliteratur.			

Forschungsmodul in Anorganischer Chemie (FAC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3,5 Wochen	SoSe/ WiSe	1. oder 2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul in Anorganischer Chemie		Sem	2	60	30	20
FAC-Praktikum		PExp	7	180	105	10
Modulverantwortliche:r		Dozenten der Anorganischen Chemie.				
Beteiligte Dozenten		Dozenten der Anorganischen Chemie.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen Anorganischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten. • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren. • für das Projekt relevante Fragestellungen formulieren. • geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten. • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters. Mögliche Themenbereiche sind:						
<ul style="list-style-type: none"> • MOFs und andere poröse Materialien. • Nanopartikel. • Carbenchemie. • Lumineszente Metallkomplexe. • Strukturchemie amphiphiler Verbindungen. • Aromat-Metall-Komplexe. • Crystal Engineering. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC-M.				
Studienleistungen		Teilnahme am Seminar, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten Ausbildungsprogramm angepasst und werden zu Beginn des Moduls mit den Teilnehmenden erörtert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FAC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.						

Biochemie der Naturstoffe (NatStoff-BC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die Naturstoffbiosynthese		V	1	25	15	30
Naturstoffisolation-Seminar		Sem	2	45	30	30
Naturstoffe-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozenten	Dr. Thomas Classen					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B.Sc./M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	B.Sc./M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Die Studierenden können die wichtigsten Naturstoffklassen der Sekundärmetabolite benennen und Schlüsselschritte der Biosynthese wiedergeben. Exemplarisch behandelte Naturstoffe können bezüglich ihrer biologischen sowie deren pharmakologische Funktionen eingeordnet werden. Die Studierenden können diverse Laborreinigungsoptionen technisch durchführen. Durch Abwägen der Vor- und Nachteile einer Reinigungsoperation für ein komplexes Stoffgemisch können die Studierende eine Isolationsstrategie konzipieren. Die Studierenden können die Identität der Isolate mithilfe physikalisch/chemischer Analyseverfahren nachweisen und den Reinheitsgehalt quantifizieren</p>						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Biosynthese wichtiger Naturstoffklassen. • Prinzipien der Biosynthese. • Vergleich zwischen Primär- und Sekundärmetabolismus. <p><i>Praktikum:</i> Isolation verschiedener Naturstoffe aus diversen Frisch- und Trockenpräparate mithilfe diverser Isolationstechniken. Die Identität der Isolate soll analysiert werden, sowie deren Gehalt quantifiziert werden.</p> <p><i>Seminar:</i> In Form von Praktikum begleitenden Kolloquien sollen die Studierenden sowohl die verwendeten Isolationstechniken als auch die Eigenschaften der behandelten Präparate den Kommilitonen vorstellen.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Grundkenntnisse der Biochemie sowie der organischen Chemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Vorbereitung eines Kolloquiums. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums „Naturstoffisolation“					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						

Literatur

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

Naturstoffsynthese I (NATSY 1)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe und WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die Naturstoffsynthese		V	1	25	15	30
Naturstoffsynthese 1-Seminar		Sem	2	45	30	30
Naturstoffe-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozenten	Dr. S. Meyer zu Berstenhorst					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erkennen Schlüsselschritte für die Syntheseplanung von (einfachen) Naturstoffen. Die Schlüsselreaktionen werden von ihnen theoretisch verstanden und in der Laborpraxis umgesetzt.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Konzepte zur Retrosynthese. • Entwicklung von Synthesestrategien für einfache Naturstoffe (z. B. β-Lactam-Antibiotika). • Totalsynthese. • Physiologische Eigenschaften. • Schutzgruppenstrategien. • Schlüsselreaktionen. • Biosynthese. 						
<i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Synthese von Schlüsselbausteinen der organischen Synthese.						
<i>Seminar:</i> Vorträge zu den Projekten.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber praktische Fähigkeiten und Kenntnisse in der Synthesechemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1996 .						
K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2003 .						
J. McMurry, T. P. Begley, <i>Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege</i> , Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2006 .						

Naturstoffsynthese II (NATSY 2)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe und WiSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Naturstoffsynthese 2		V	1	25	15	30
Naturstoffsynthese 2 - Praktikum		PExp	6	170	90	12
Naturstoffe - Seminar		Sem	2	45	30	30
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozenten	Dr. S. Meyer zu Berstenhorst					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden erwerben Kenntnisse und experimentelle Fähigkeiten zur (Bio)synthese und Retrosynthese von komplexen Naturstoffen. Die Studierenden wenden analytische Methoden (NMR, IR, MS, Enantiomerenanalytik) in der Praxisphase an Fallbeispielen an, werten die Spektren selbstständig aus und können eine Strukturzuordnung anhand der experimentellen Daten durchführen. Sie schätzen die analytischen Limitierungen kritisch ein.						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i> Besprechung ausgewählter komplexer Zielverbindungen (z.B. Polyketide):</p> <ul style="list-style-type: none"> • Physiologisches Target • Biosynthese • Synthesestrategien • Erörterung mechanistischer und methodischer Details zu anspruchsvollen Syntheseschritten • Totalsynthese <p><i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Synthese von Schlüsselbausteinen für die Naturstoffsynthese, Durchführung längerer Reaktionssequenzen.</p> <p><i>Seminar:</i> Besprechung von aktuellen Originalarbeiten.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an NATSY 1					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]		benotet/unbenotet	
	Mündliche Einzelprüfung		30-45		benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1996 . K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2003 . J. McMurry, T. P. Begley, <i>Organische Chemie der biologischen Stoffwechselwege</i> , Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2006 .						

Angewandte Makromolekulare Chemie: a) großtechnische Prozesse b) Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie					Modus: Wahlpflicht	
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Großtechnische Prozesse in der Organischen und Polymer-Chemie (GTS)		V	2	60	30	30
Polymere als Werkstoffe und Wirkstoffe (PoWW)		V	2	60	30	30
GTS-PoM-Übung		Üb	2	120	15	30
Modulverantwortliche:r	Dr. M. Tabatabai, Prof. Dr. S. Schmidt.					
Beteiligte Dozenten	Dr. M. Tabatabai, Prof. Dr. S. Schmidt.					
Sprache	Deutsch /ggf. englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> aktuelle Aufgaben der industriellen Synthese angeben, Prozesswege von niedermolekularem Ausgangsstoffe zur makromolekularen Produkt benennen, Materialeigenschaften von Commodity Polymeren und Blends und die Erzeugung gewünschter Eigenschaftsprofile benennen, molekulare Mechanismen der Interaktion von Makromolekülen mit biologischen Systemen identifizieren und wiedergeben, Synthesen und Anwendungen von Funktionspolymeren in der Biomedizin entwickeln. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung (GTS):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Stammbaum der chemischen Prozesse, von der Kohle bis zum Polymer, C1 bis C8 Chemie und Folgeprodukte. Herstellung von Arzneimitteln, Vitaminen und industrieller Polymere. 						
<i>Vorlesung (PoM):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Wirtschaftliche Bedeutung, physikalische Zustände und chemische Eigenschaften von Polymeren. Erzeugung spezifischer Eigenschaftsprofile für die Medizin (Mechanik, Responsivität und Interaktivität mit biologischer Materie). Polymere in der Medizin als Werkstoff (Medizintechnik, Implantat) und Wirkstoff (Wirkstoffvermittler, -transporter, Sequestrant, Inhibitor). 						
<i>Übung:</i> In den Übungen werden die Inhalte der Vorlesungen durch Präsentationen der Teilnehmer über aktuelle Forschungsthemen vertieft.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber solide Kenntnisse (Theorie und Praxis) in organischer Chemie und Makromolekulare Chemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übung.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	keine					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		

Stellenwert der Note für die Gesamtnote	8/110
Sonstige Informationen	
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.	
Literatur	
K. Weissermel, H.-J. Arpe, <i>Industrial Organic Chemistry</i> , Wiley-VCH, 4., completely rev. Ed., Weinheim, 2003 .	
H. Domininghaus, <i>Kunststoffe. Eigenschaften und Anwendungen</i> , Springer, 8., neu bearb. und erw. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2012.	
R. Satchi-Fainaro, R. Duncan (Eds.), <i>Polymer Therapeutics I and II. Polymers as Drugs, Conjugates and Gene Delivery Systems</i> (Advances in Polymer Science Vol. 192 and 193), Springer, Berlin/Heidelberg, 2006 .	
F. Puoci, <i>Advanced Polymers in Medicine</i> , Springer, Cham, 2015 .	

Angewandte Organische Chemie (AOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe	1.		
Anmerkung: Das Modul kann nur gewählt werden, wenn es noch nicht im Bachelorstudium als Qualifizierungsmodul belegt worden war. Zudem ist die Zahl der verfügbaren Plätze auf Grund der Qualifizierungsmodulteilnehmer begrenzt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
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 Dozenten		Prof. Dr. C. Czekelius, PD Dr. Klaus Schaper, Dr. S. Beutner.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		B. Sc. Biochemie (anteilig) B. Sc. Chemie		Wahlpflichtmodul Qualifizierungsmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <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. 						
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		Keine, aber solide Kenntnisse in der Organischen Chemie werden empfohlen.				
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
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
S. Warren, <i>Organische Retrosynthese</i> , Teubner, Stuttgart, 1997 . S. Warren, P. Wyatt, <i>Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i> , Wiley, 2. Ed., New York, 2008 S. Warren, <i>Workbook for Organic Synthesis. The Disconnection Approach</i> , John Wiley & Sons, 2. Ed., New York, 2009 . F. A. Carey, R.J. Sundberg, <i>Organische Chemie. Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 , (Kap. 26). J. Fuhrhop, G. Penzlin, <i>Organic Synthesis. Concepts and Methods</i> , Wiley-VCH, 2., rev. and enl. Ed., Weinheim, 1994 . K.C. Nicolaou, E.J. Sorensen, <i>Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1996 . K.C. Nicolaou, S. A. Snyder, <i>Classics in Total Synthesis II. More targets, strategies, methods</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2003 . E.J. Corey, X.-M. Cheng, <i>The Logic of Chemical Synthesis</i> , John Wiley & Sons, New York, 1989 . C.L. Willis, M. Wills, <i>Syntheseplanung in der Organischen Chemie</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1997 . T. Wirth, <i>Syntheseplanung – aber wie?</i> , Spektrum, Heidelberg, 1998 . T.-L. Ho, <i>Symmetry. A Basis for Synthesis Design</i> , John Wiley & Sons, New-York, 1995 . Praktikumsskript.			

Wahlpflichtmodul in Organischer Chemie (WOC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	SoSe/ WiSe	1. oder 2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
WOC-Seminar		Sem	2	90	30	20
WOC-Praktikum		PExp	6	150	90	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. C. Czekelius, Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.				
Sprache		deutsch/ggf. englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • ein kleineres Forschungsprojekt konzipieren und Projektziele definieren, • eine zielgerichtete Literaturrecherche unter Nutzung moderner Hilfsmittel durchführen, • notwendige Experimente durchführen und auswerten, • Projektergebnisse in angemessener Form verschriftlichen, • Projektergebnisse in einem öffentlichen Vortrag zusammenfassen und in einer Sachdiskussion erläutern. 						
Inhalte						
Planung und Durchführung eines Forschungsprojektes unter Anleitung eines/einer Doktoranden/Doktorandin: <ul style="list-style-type: none"> • Definition des Projektes. • Recherche der relevanten Literatur. • Planung und Durchführung der Experimente. • Spektroskopische Analyse der Produkte und Bewertung der Ergebnisse. • Planung des weiteren Projektverlaufs. • Anfertigung eines Abschlussberichts und Präsentation der Ergebnisse im Mitarbeiterseminar. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber solide Kenntnisse in organischer Synthesechemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme am AK-Seminar, sachgerechte Laborarbeit, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und werden zu Modulbeginn mit den Teilnehmenden erörtert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des WOC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung beim jeweiligen AK-Leiter		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen.						
Literatur						
Übersichtsartikel und aktuelle Originalpublikationen zum Projektthema.						

Laserspektroskopische Techniken (LST)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Umweltchemie		V	2	60	30	50
LST Seminar		Sem	1	90	30	30
LST Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. M. Schmitt					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. M. Schmitt					
Sprache	Deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
<ul style="list-style-type: none"> • Kritisches Verständnis und Bewertung spektroskopischer Methoden • Theoretisches Design und Konzipieren von spektroskopischen Experimenten. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Laser. • Polarisation. • Spektrometer und Interferometer Frequenzstabilisierung. • Absorptionsspektroskopie. • Optogalvanische Spektroskopie. • Raman-Spektroskopie. • Ionisationsspektroskopie Fluoreszenzspektroskopie. • Detektoren. • Interferenz. • Dopplerbegrenzte Spektroskopie mit Lasern Linienprofile. • Photoakustische Spektroskopie. • Cavity Ring Down Spectroskopie. • Nichtlineare Ramanspektroskopie. • Dopplerfreie Techniken. <p><i>Seminar:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Spektroskopie. • Mathcad-Übungen. <p><i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Laserspektroskopie an düsenstrahlgekühlten Molekülen. • Ausgewählte Versuche zur Fluoreszenzspektroskopie (statisch, zeitaufgelöst). • Ausgewählte Versuche zur Ionisationsspektroskopie. 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen. Anfertigung von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des LSC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						
Literatur						
W. Demtröder, <i>Laserspektroskopie</i> , Springer, 6., aktualisierte Aufl., Berlin, 2011.						

G. Herzberg, *Einführung in die Molekülspektroskopie. Die Spektren und Strukturen von einfachen freien Radikalen*, Steinkopf Verlag, Darmstadt, 1971.

G. Herzberg, K.-P. Huber, *Molecular spectra and molecular structure 3. Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules*, D. van Nostrand Co. Inc., 2 Ed., New York, **1991**.

Grundlagen der Nanooptik (GNO)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie					Modus: Wahlpflicht	
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Nanooptik		V	2	60	30	30
GNO-Seminar		Sem	1	45	15	30
GNO-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. Matthias Karg				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. Matthias Karg				
Sprache		Deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen lokalisierter sowie koppelnder plasmonischer Resonanzen wiedergeben, • die Grundlagen excitonischer Zustände in Halbleiternanopartikeln wiedergeben, • Unterschiedliche Nah- und Fernfeldkopplungsereignisse nachvollziehen, • Experimentelle Spektren auswerten und interpretieren, • Struktur-/Eigenschaftsbeziehungen in plasmonischen Superstrukturen ableiten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Edelmetallnanopartikel. • Oberflächenpolaritonen. • Exctionische Zustände. • Drude-Modell. • Einführung in die optischen Eigenschaften von Edelmetallnanostrukturen. • Interferenzen. • Extinktionsspektroskopie. • Halbleiternanopartikel (Quantum dots). • Oberflächenplasmonen • Absorption und Streuung. • Resonanzkopplung. • Erzeugung von geordneten Nanostrukturen. • Gitterkopplung 						
<i>Seminar:</i> Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Nanooptik.						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
Es werden verschiedene Aspekte der Nanooptik an teilweise selbst-synthetisierten sowie, in Superstrukturen assemblierten, plasmonischen Nanopartikeln durch beispielhafte experimentelle und theoretische Versuche veranschaulicht. Einfache spektroskopische Verfahren werden zur Untersuchung angewandt und die Ergebnisse durch einfache theoretische Simulationen unterstützt.						
Teilnahmevoraussetzungen		keine				
Studienleistungen		Aktive Teilnahme an den Lehrveranstaltungen, Protokolle zum Praktikum, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des GNO-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse:
<http://www.karg.hhu.de/unsere-lehre.html>

Literatur

- D. Vollath, *Nanomaterials. An introduction to synthesis, properties and applications*, Wiley-VCH, 2. Aufl., Weinheim, **2013**.
G. Schmid, *Nanoparticles. From theory to application*, Wiley-VCH, 2., completely rev. and updated Ed., Weinheim, **2010**.
S. V. Gaponenko, *Introduction to Nanophotonics*. Cambridge University Press, Cambridge, **2010**.
S. A. Maier, *Plasmonics – Fundamentals and Applications*, Springer, New York, **2007**.
D. Sarid, W. Challener, *Modern Introduction to Surface Plasmons. Theory, Mathematica Modeling, and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, **2010**.

Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Femtosekunden-Spektroskopie chemischer und biologischer Prozesse (FSCB)		V	2	60	30	30
FSCB-Seminar		Sem	1	45	15	30
FSCB-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. Peter Gilch				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. Peter Gilch				
Sprache		Deutsch oder englisch nach Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biologie			Wahlpflichtmodul	
M. Sc. Med. Physik			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Bedeutung zeitaufgelöster Verfahren in der modernen physikalisch-chemisch und bio-physikalischen Forschung; Laserbasierte Messtechnik insbesondere Femtosekunden-Techniken; Chemische und biologische Prozesse auf kurzen Zeitskalen; Einarbeitung in aktuelle wissenschaftliche Literatur; Konzeption, Durchführung und Dokumentation eines Forschungsprojekts.						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Zeitskalen physikalisch-chemischer Prozesse. 2. Methoden der zeitaufgelösten Spektroskopie im Überblick. 3. Messverfahren der Femtosekunden-Spektroskopie. <ul style="list-style-type: none"> • Funktionsprinzip des Lasers. • Titan-Saphir-Laser und Verstärker. • Frequenz-Konversion / Nicht-lineare Optik. • Modenkopplung. • Charakterisierung von Femtosekunden-Impulsen. • Verfahren der Detektion: Absorption, Fluoreszenz, IR, Raman, etc. 4. Physikalische Prozesse im Femtosekunden-Bereich. <ul style="list-style-type: none"> • Dynamik versus Kinetik. • Nicht-strahlende Prozesse. • Wellenpaketsbewegungen. • Dynamische Solvatation. 5. Chemische Prozesse im Femtosekunden-Bereich. <ul style="list-style-type: none"> • Elektrontransfer und Marcus-Theorie. • Isomerisierungen. • Proton- und Wasserstofftransfer. 6. Biologische Prozesse im Femtosekunden-Bereich. <ul style="list-style-type: none"> • Photosynthese. • DNA-Photoschäden. • Sehprozess. 						
<i>Seminar</i>						
In Zusammenarbeit mit dem Dozenten werden aktuelle Originalarbeiten aus dem Themenbereich der Vorlesung ausgewählt und von den Studierenden vorgestellt.						

Praktikum			
Im Praktikum (Block) wird ein ausgewähltes photo-reaktives Molekül zunächst von den Studierenden mit Verfahren der stationären Spektroskopie charakterisiert. Anschließend wird es unter enger Betreuung durch die Mitarbeiter des Arbeitskreises mit Femtosekunden-Methoden vermessen.			
Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen, Anfertigung von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des FSCB-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
C. Rullière (Hrsg.), <i>Femtosecond Laser Pulses. Principles and experiments</i> , Springer, 2. Aufl., New York, 2005 .			
J.-C. Diels, W. Rudolph, <i>Ultrashort Laser Pulse Phenomena. Techniques, and applications on a femtosecond time scale</i> , Academic Press, 2. Ed., Amsterdam, 2006 .			
D. Meschede, <i>Optik, Licht und Laser</i> , Vieweg+Teubner, 3. Aufl., Wiesbaden, 2008 .			
R. W. Boyd, <i>Nonlinear Optics</i> , Academic Press, 3. Ed., Amsterdam, 2008 .			
A. Nitzan, <i>Chemical Dynamics in Condensed Phases. Relaxation, Transfer, and Reactions in Condensed Molecular Systems</i> (Oxford Graduate Texts), Oxford University Press, Oxford, 2006 .			
P. Klán, J. Wirz, <i>Photochemistry of Organic Compounds. From Concepts to Practice</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009 .			
L. O. Björn (Hrsg.), <i>Photobiology: The Science of Life and Light</i> , Springer, 3. Ed., New York, 2009 .			
Ausgewählte Original- und Übersichtsarbeiten.			

Theorie und Simulation chemischer Reaktionen (TSCR)				Stand: 03.04.2024		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Wahlpflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
TSCR-Vorlesung		V	2	60	30	250
TSCR-Praktikum		PExp	6	135	90	15
TSCR-Seminar		Sem	1	45	15	15
Modulverantwortliche:r		Jun.-Prof. Dr. Jan Meisner				
Beteiligte Dozierende		Jun.-Prof. Dr. Jan Meisner				
Sprache		Deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie B. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul Qualifizierungsmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden						
<ul style="list-style-type: none"> verstehen die physikalischen Grundlagen zur theoretischen Beschreibung von molekularen Systemen sowie die Grenzen der erlernten Methoden, verstehen quantitative Zusammenhänge zwischen Moleküleigenschaften und makroskopischen Eigenschaften, können computerchemische Methoden selbständig durchführen und evaluieren sowie die in der modernen Literatur präsentierten Ergebnisse einschätzen., können die hier erlernten Methoden verwenden, um eine Bachelorarbeit anzufertigen. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Hartree-Fock, LCAO-Näherung, Semiempirische Verfahren, Korrelationsmethoden, Dichtefunktionaltheorie Grundlagen der statistischen Theorie der Materie, Mikro- und Makrozustände, Verbindung von einfachen quantenmechanischen Modellen mit thermodynamischen Eigenschaften, Grundlagen der Übergangszustandtheorie Thermodynamische und kinetische Untersuchung von Reaktionsmechanismen im elektronischen Grundzustand und unter Einwirkung externer Stimuli Automatisierte Erkundung des chemischen Raums, Reaktionsnetzwerke und kinetische Modelle Grundlagen und Anwendungen von maschinellem Lernen in der theoretischen Chemie: Einsatz von künstlichen neuronalen Netzwerken zur Modellierung von Potentialenergiehyperflächen und deren Dynamik. Einsatz von neuronalen Netzwerken zum Lernen von Energien und Gradienten. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Um das Modul belegen zu können, wird das Modul QCCC oder äquivalent aus dem Bachelor vorausgesetzt. Das Modul kann nur gewählt werden, wenn es noch nicht im Bachelorstudium als Qualifizierungsmodul belegt wurde.				
Studienleistungen		Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Praktikums und des Seminars.				
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

F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley-VCH, 3. Aufl., Weinheim, **2017**.

C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and models*, Wiley, 2. Ed., Chichester, **2004**.

Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie (FMPC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe/WiSe	1. oder 2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul in molekularer physikalischer Chemie		Sem	2	80	30	20
FMPC-Praktikum		PExp	8	160	120	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. Claus Seidel				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. Claus Seidel				
Sprache		Deutsch/ Englisch (nach Absprache)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen molekularen physikalischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten, • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren, • für das Projekt relevante Fragestellungen formulieren, • durch Kenntnisse in den theoretischen Grundlagen geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten, • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt in einem der verschiedenen Schwerpunktbereiche je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters.						
Mögliche Schwerpunktbereiche sind:						
1. Entwicklung und Charakterisierung von Fluoreszenzsonden.						
2. Fluoreszenzspektroskopie zur Charakterisierung von Nanomaterialien und biologischen Systemen.						
3. Höchst-aufgelöste Fluoreszenzmikroskopie zur Charakterisierung von Nanomaterialien und biologischen Systemen.						
1. 4. Biophysikalische Charakterisierung der Strukturbildung, Dynamik, und Stabilität von Biomolekülen (insbesondere Proteine und Nukleinsäuren).						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber die Kenntnis von Themen, wie sie z. B. in den Modulen GPC und GPC-P vermittelt werden, wird vorausgesetzt.				
Studienleistungen		Teilnahme am Seminar, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und werden zu Modulbeginn mit den Studierenden erörtert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FMPC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
Grundlagenwissen aus von dem Dozenten benannten Lehrbüchern (Fluoreszenzspektroskopie, Mikroskopie und biophysikalischen Chemie / Biophysik), Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.

Forschungsmodul Physikalische Chemie (FoPC)				Stand: 08.01.2019		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe/WiSe	1. oder 2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Forschungsmodul Physikalische Chemie		Sem	2	60	30	20
FoPC-Praktikum		PExp	7	180	105	10
Modulverantwortliche:r		Dozenten der Physikalischen Chemie				
Beteiligte Dozenten		Dozenten der Physikalischen Chemie				
Sprache		deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • in einem Forschungsprojekt der aktuellen Physikalischen Chemie unter Anleitung mitarbeiten, • den Stand der Forschung zu einem Projekt recherchieren, • geeignete Experimente planen, durchführen und auswerten, • die Ergebnisse des Projektes in einem Bericht niederlegen und vor einem Fachpublikum präsentieren. 						
Inhalte						
Mitarbeit an einem Forschungsprojekt je nach Arbeitsgebiet des betreuenden Mitarbeiters.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber die Kenntnis von Themen, wie sie z.B. in den Modulen GPC und GPC-P vermittelt werden, wird vorausgesetzt.				
Studienleistungen		Teilnahme am Seminar und an Vorträgen aus dem Pool „Physikalisch-Chemisches Kolloquium“ sowie „GdCh Vorträge“, regelmäßige Laborarbeit unter Anleitung, Anfertigung eines Berichts und Präsentation der Ergebnisse. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und werden zu Modulbeginn mit den Teilnehmenden erörtert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des FoPC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	
Sonstige Informationen						
http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html						
Literatur						
Grundlagenwissen aus von dem Dozenten benannten Lehrbüchern, Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten zum Projektthema.						

Angewandte Quanten- und Computerchemie (AnQCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	1.		
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 Dozenten		Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.				
Sprache		deutsch/englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig) B. Sc. Chemie B. Sc. Informatik M. Sc. Chemie			Qualifizierungsmodul Qualifizierungsmodul Wahlpflichtmodul 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. 						
Inhalte						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Quantenchemische Methoden für Eigenschaften von Molekülen im elektronischen Grundzustand (Hartree-Fock, Dichtefunktionaltheorie, Møller-Plesset-Störungstheorie, semiempirische Verfahren). 2. Grundzüge der statistischen Thermodynamik, Zustandssummen für Translation, Rotation, Schwingungs- und elektronische Energien. 3. Einschätzen der Leistungsfähigkeit der quantenchemischen und semiempirischen Methoden. 4. Interpretation der Ergebnisse von MO-Rechnungen. 5. Suche nach Minima und Übergangszuständen, Reaktionswärmen (Wahl von Atomorbitalbasen, Bedeutung der Nullpunktsschwingungsenergie, Temperaturabhängigkeit, Lösungsmittelleffekte). 6. Berechnung elektronischer Anregungsspektren mit DFT/MRCI. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber die Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, wird vorausgesetzt. Das Modul kann nicht belegt werden, wenn es bereits im Bachelorstudien-gang als Qualifizierungsmodul absolviert worden ist.				
Studienleistungen		Teilnahme an Vorlesung und Praktikum, Auswertung der Praktikumsaufgaben, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
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				8/110		

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.
Wenn das Modul bereits als Qualifikationsmodul im Bachelorstudiengang gewählt wurde, ist eine Belegung als Wahlpflichtmodul im Masterstudiengang ausgeschlossen.

Literatur

Skript zur Vorlesung.

C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, Wiley, 2. Ed., Chichester, **2004**.

Fortgeschrittene Quantenchemie (FQC)					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie					Modus: Wahlflicht	
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe	1.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände		V	2	90	30	250
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie		V	1	45	15	250
Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände		Üb	1	45	15	30
Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie		Üb	1	45	15	30
Ausgewählte Kapitel der Theoretischen Chemie		Sem	1	15	15	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. M. Marian				
Beteiligte Dozenten		Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.				
Sprache		deutsch/englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul	
M. Sc. Mathe			Wahlpflichtmodul			
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<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 Verfahren herleiten, • Methoden zur Berechnung angeregter Zustände korrekt beurteilen und auswählen, • Umgebungseffekte in Berechnungen berücksichtigen, • Wahrscheinlichkeiten für elektronische Übergänge berechnen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung Quantenchemische Methoden für elektronisch angeregte Zustände</i>						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Optimierung von Molekülorbitalen (HF, CASSCF, DFT). 2. Elektronenstrukturmethoden für angeregte Zustände. <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Variationsverfahren (CI, CIS, DFT/MRCI). 2.2. Störungstheoretische Verfahren (CASPT2). 2.3. Response-Methoden (TDHF, TDDFT, RICC2). 3. Umgebungseffekte auf elektronische Spektren. 4. Dipolübergänge und Oszillatorstärken. 5. Spin-Bahn-Kopplung, Phosphoreszenz, Intersystem crossing. 						
<i>Vorlesung Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie</i>						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik. 2. Molekülpunktgruppen. 3. Reduzible und irreduzible Darstellungen, Charaktere, Orthogonalitätstheorem, Projektionsoperatoren. 						

<p>4. Symmetrie von Wellenfunktionen und Operatoren. 5. Auswahlregeln für Übergänge zwischen molekularen Zuständen. 6. Drehimpulse, Kommutatoren.</p>			
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber die Kenntnis von Lehrinhalten, wie sie z.B. im Bachelor-modul QCCC vermittelt werden, wird vorausgesetzt. Das Modul kann nicht belegt werden, wenn bereits das Modul MPESP belegt wurde.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Seminar und an den Übungen, erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten Ausbildungsprogramm angepasst und werden zu Modulbeginn mit den Teilnehmenden erörtert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.			
Literatur			
A. Szabo, N. Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory</i> , Dover Publications, Inc., Mineola, 2000 .			
D. M. Bishop, <i>Group Theory and Chemistry</i> , Dover Publications, Inc., New York, 1993 .			

Angebote im Wintersemester

Supramolekulare Chemie (SupChem)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Supramolekulare Chemie und Nicht-kovalente Bindung		V	2	90	30	20
SupChem-Seminar		Sem	1	30	15	20
SupChem-Praktikum		PExp	6	120	90	10
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. W. Frank				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. W. Frank				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die unterschiedlichen Formen Nichtkovalenter Bindung erkennen und an Hand ihrer charakteristischen Geometrien und der Hierarchie ihrer Gitterenthalpiebeiträge in Feststoffen differenzieren und bewerten, die Bedeutung supramolekularer Assoziation für die Strukturen, Eigenschaften und Reaktivitäten ausgewählter Verbindungsklassen aus allen Bereichen der Chemie erkennen und erläutern. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> Varianten der Nichtkovalenten Bindung (Bindungsgeometrien, Bindungsenthalpien, Bindungsordnungen von Wasserstoffbrückenbindungen, Sekundäre Element-Element-Bindungen; Metallion-Aromat-Wechselwirkungen, δ-δ-Stapelwechselwirkungen; Hydrophobe Wechselwirkungen). Molekulare Selbstorganisation. Crystal Engineering, Wirt-Gast-Systeme. Kationen- und Anionenselektive Rezeptoren. Chlathrate. Spezies-Engineering. Supramolekulare Assoziation als Hilfsmittel der Reaktionssteuerung. Einsatz des Crystal Engineering bei der Herstellung Anorganisch-Organischer Hybridmaterialien. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC-M.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des SubChem-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
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.						

G. R. Desiraju, *The Crystal as a Supramolecular Entity*, Wiley, Chichester/ New York, 1996.

Vertiefte Aspekte aus Carben-Chemie und NMR-Spektroskopie (NHC-NMR)				Stand: 13.01.2022		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
NHC-NMR		V	3	90	45	20
NHC-NMR-Seminar		Sem	2	60	30	20
NHC-NMR-Übung		Ü	4	90	60	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Ganter, PD Dr. K. Schaper					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. C. Ganter, PD Dr. K. Schaper					
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"> • die Bedeutung und historische Entwicklung von Carbenen in der organischen und metallorganischen Chemie erläutern, • die unterschiedliche Stabilität und Reaktivität von Carbenen anhand ihrer chemischen Strukturen ableiten, • Beispiele für die Nutzung von Carbenen in organischen und metallorganischen Reaktionen geben, • die theoretischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie erläutern, • die Prozessierung von Messdaten beschreiben und anwenden, • NMR-Spektren, inkl. komplexer Spinsysteme, auswerten, • Komplexe NMR-Experimente beschreiben. 						
Inhalte						
<ul style="list-style-type: none"> • Singulett- und Triplett-Carbene. • Historische Entwicklung der Carbenchemie. • Frühe Versuche zur Isolierung von stabilen N-heterocyclischen Carbenen (NHCs), Wanzlick und Arduengo. • Stabilisierung, Charakterisierung und Bindungsverhältnisse von NHCs. • Mit NHCs verwandte Systeme (CAACs, PHCs). • Reaktivität von NHCs. • Anwendungen von NHCs in der Organo- sowie der metallorganischen Katalyse. • Theoretische Grundlagen der NMR-Spektroskopie. • Wichtige Messparameter in der NMR-Spektroskopie. • Prozessierung von Messdaten. • Auswertung von NMR-Spektren und komplexen Spinsystemen. • Theorie von komplexen NMR-Experimenten. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen AC und AC-P.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Praktikum. Erstellen von Protokollen. Seminarvortrag					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Seminarvortrags.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/135		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
S. P. Nolan, <i>N-Heterocyclic Carbenes. Effective tools for organometallic synthesis</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2014 . Div. Übersichtsartikel sowie aktuelle Originalarbeiten.

Anorganische Photoaktive Materialien I - Grundlagen (PhotMat I)				Stand: 20.03.2024		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vorlesung Anorgan. Photoaktive Mat.		V	2	90	30	30
PhotMat-Übung		Ü	4	90	60	30
PhotMat-Seminar		Sem	2	60	30	30
Modulverantwortliche:r	Jun. Prof. Dr. Markus Suta					
Beteiligte Dozierende	Jun. Prof. Dr. Markus Suta					
Sprache	deutsch, auf Wunsch englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	B.Sc. Chemie			Qualifizierungsmodul-		
	B.Sc. Wirtschaftschemie			Qualifizierungsmodul-		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Absorption und Lumineszenz typischer anorganischer photoaktiver Verbindungen sowie Einflussmöglichkeiten darauf erkennen, differenzieren, und bewerten, die Eignung experimenteller Untersuchungstechniken der Lumineszenzspektroskopie auf eine Problemstellung hin beurteilen und anwenden, und die Daten auswerten die verschiedenen Hierarchien der atomaren Zustände benennen, differenzieren und beurteilen, den Einfluss externer Stimuli auf die optischen Eigenschaften photoaktiver Materialien erläutern, und ihre Bedeutung für strahlende und strahlungslose Übergänge bewerten 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Grundbegriffe optischer Übergänge (Absorption, Emission, Stokes-Verschiebung) Experimentelle Techniken der Absorptions- und Lumineszenzspektroskopie an Lösungen und Festkörpern (steady-state und zeitaufgelöst) Hierarchie atomarer Zustände (Elektronenrepulsion, Spin-Bahn-Kopplung, Ligandenfeld) Anwendungen der Gruppentheorie für Ligandenfeldzustände, Kramersches Theorem Auswahlregeln und Einfluss auf Abklingzeiten Einstein-Koeffizienten, spontane & stimulierte Emission Photonische Effekte (lokale Feldverstärkung, Purcell-Effekt) Unterschiede zwischen nanokristallinen und mikrokristallinen Leuchtstoffen Einfluss äußerer Stimuli wie Druck und Temperatur auf die Lumineszenz Vibronische Kopplung Energietransfer und Energiemigration Strahlungslose Übergänge 						
<i>Übung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Vertiefung der Vorlesungsinhalte 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Präsentation aktueller Fachpublikationen durch die Studierenden im Rahmen des Mitarbeiterdenseminars 						

Teilnahmevoraussetzungen	Grundkenntnisse der Koordinationschemie und Quantenmechanik sind hilfreich. Das Modul kann nur gewählt werden, wenn es noch nicht im Bachelorstudium als Qualifizierungsmodul belegt wurde.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übung.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Seminar mit Seminarbeitrag		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Prüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/135
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
B. Henderson, G. Imbusch, <i>Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i> , Oxford University Press, Oxford/New York, 1989 . G. Blasse, B. C. Grabmaier, <i>Luminescent Materials</i> , Springer, Berlin/Heidelberg/New York, 1994 . J. García Solé, L. E. Bausá, D. Jaque, <i>An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids</i> , John Wiley & Sons, Chichester, 2005 . J. Lakowicz, <i>Principles of Fluorescence Spectroscopy</i> , Springer, 3. Ed., New York, 2006 . C. Ronda, <i>Luminescence – From Theory to Applications</i> , Wiley, 2. Ed., Oxford/New York, 2010 . M. Fox, <i>Optical Properties of Solids</i> , Oxford University Press, 2. Ed., Oxford/New York, 2010 . R.-S. Liu, X.-J. Wang, <i>Phosphor Handbook – Fundamentals of Luminescence</i> , 3. Ed., CRC Press, Boca Raton, 2022 . Ausgewählte (Review-)Artikel aus der Fachliteratur.			

Vom Gen zum biotechnologischen Produkt (GenProd)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Vom Gen zum biotechnologischen Produkt		V	2	75	30	30
GenProd-Seminar		Sem	1	45	15	30
GenProd-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. V. Urlacher					
Beteiligte Dozenten	Dr. K. Koschorreck, Dr. M. Girhard.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • den Einsatz von Enzymen in der Biotechnologie beschreiben, • Methoden zur Expression rekombinanter Proteine beschreiben und anwenden, • Methoden zur chromatographischen Aufarbeitung von Enzymen wiedergeben und anwenden, • Grundlegende Methoden zur Bestimmung enzymatischer Aktivität durchführen. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Vergleich von verschiedenen prokaryotischen und eukaryotischen Expressionssystemen (<i>Escherichia coli</i>, <i>Bacillus</i>, <i>Pseudomonas</i>, <i>Streptomyces</i>, <i>Pichia</i>, <i>Saccharomyces</i>, Baculoviren, tierische und pflanzliche Zellen, zellfreie Expression). • Aufarbeitung von Proteinlösungen (Filtrations- und Fällungsmethoden). • Aufreinigung von Proteinen über chromatographische Methoden (Ionenaustausch, hydrophobe Interaktion, Affinität, Gelfiltration). • Methoden der Produktaufarbeitung. <p><i>Praktikum:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundlegende Techniken und Methoden zur Herstellung rekombinanter Proteine. • Vergleich der Expression in pro- und eukaryotischen Mikroorganismen am Beispiel von Oxidoreduktasen. • Kultivierung von rekombinanten Mikroorganismen in Schüttelkolben und im 5 L-Fermenter. • Aufreinigung und Charakterisierung der Enzyme bezüglich Aktivität und Produktspektrum. • Enzymkatalysierte Oxidation von hydrophoben Substraten und phenolische C-C-Kopplung. • Produktaufarbeitung. <p><i>Seminar:</i> Präsentation aktueller Publikationen zum Thema „Rekombinante Expression und Aufreinigung von Enzymen“ durch die Studierenden.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, Grundkenntnisse in Molekularbiologie, Mikrobiologie und Biochemie werden empfohlen.					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag im Seminar. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des GenProd-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Literatur			
Semesteraktuelle Skripte zur Vorlesung und zum Praktikum. Aktuelle Reviews und Originalpublikationen nach Mitteilung. G. Walsh, <i>Proteins: Biochemistry and Biotechnology</i> , Wiley-Blackwell, 2. Ed, Chichester, 2014 . R. D. Schmid, V. B. Urlacher, <i>Modern Biooxidation: Enzymes, Reactions and Applications</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 2007 .			

Optimierungsverfahren in der Proteinherstellung (OptiProt)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Einführung in die biotechnologische Proteinproduktion		V	1	25	15	30
OptiProt-Seminar		Sem	2	45	30	30
OptiProt-Praktikum		PExp	6	170	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. J. Pietruszka					
Beteiligte Dozenten	Dr. S. Meyer zu Berstenhorst					
Sprache	deutsch, englisch (Seminarvortrag)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Biologie			Wahlmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Die Studierenden können Faktoren zur effizienten Erzeugung von Produktionsstämmen für Proteine benennen, kritisch evaluieren und eigenständig Strategien zur zielgerichteten Entwicklung von Produktionsstämmen anwenden. Die Studierenden wählen geeignete Analysemethoden, um die Qualität der einzelnen Proteinvarianten zu beurteilen. Diese Analysen werden eigenständig ausgewertet und kritisch reflektiert.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i> <ul style="list-style-type: none"> • Erzeugung und Optimierung von prokaryotischen und eukaryotischen Produktionsstämmen. • Vergleich verschiedener Fermentationstechniken und Anwendung in der Biotechnologie. <i>Praktikum:</i> Projektarbeit zur Erzeugung von Produktionsstämmen, vergleichender Fermentation und Funktionsanalyse der produzierten Proteine.						
<i>Seminar:</i> Besprechung von relevanten Originalpublikationen durch die Studierenden.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber praktische Fähigkeiten und Kenntnisse in Biochemie und Molekularbiologie werden empfohlen					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Protokoll zum Praktikum, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.iboc.uni-duesseldorf.de/lehre						
Literatur						
H. Rehm, T. Letzel, <i>Der Experimentator - Proteinbiochemie/Proteomics</i> , Springer Spektrum Verlag, 7. Aufl., Berlin/Heidelberg, 2016.						
H. Sahn, G. Antranikian, K-P. Stahmann, R. Takors, <i>Industrielle Mikrobiologie</i> , Springer Spektrum, Berlin/Heidelberg, 2013.						

Sequenzkontrollierte Polymere (SeqPol)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 7 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Sequenzkontrollierte Polymere - Synthese (A)		V	2	60	30	30
Sequenzkontrollierte Polymere - Anwendung (B)		V	2	60	30	30
SeqPol-Übung		Üb	2	120	30	30
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. L. Hartmann				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. Hartmann, Dr. M. Tabatabai, Dozenten der Makromolekularen Chemie.				
Sprache		deutsch/ggf. Englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • Herausforderungen bei der Synthese und potenzielle Anwendungen von sequenzkontrollierten Polymeren benennen, • Methoden zur Synthese von sequenzkontrollierten Polymeren wiederholen und bewerten, • Synthesen und Anwendungen von sequenzkontrollierten Polymeren entwickeln. 						
Inhalte						
Vorlesung: Teil A: Einführung in das Thema <ul style="list-style-type: none"> • Definitionen. • Kurzer Rückblick auf die Entwicklung. • Synthetische Methoden zur Erzeugung sequenzkontrollierter Polymere, u.a. Insertionsreaktionen, <i>Templating Polymerizations</i>, Festphasensynthesen. Teil B: <ul style="list-style-type: none"> • Anwendungsbereiche sequenzkontrollierter Polymere u.a. in Biomedizin, Datenspeicherung und Katalyse. • Methoden der Charakterisierung der Sequenz von Polymeren wie z.B. MS/MS und Chromatographie. Übung: In den Übungen werden die Inhalte der Vorlesungen durch Präsentationen der Teilnehmer über aktuelle Forschungsthemen vertieft.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber solide Kenntnisse (Theorie und Praxis) in Organischer Chemie und Makromolekulare Chemie werden empfohlen.				
Studienleistungen		Aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Anfertigung von Versuchsprotokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		keine				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Klausur		120	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
J.-F. Lutz, T.Y. Meyer, M. Ouchi, M. Sawamoto (Eds.), <i>Sequence-controlled polymers: Synthesis, self-assembly, and properties</i> (ACS Symposium Series 1170), American Chemical Society, New York, 2014 .

Multikomponenten- und Dominoreaktionen (MCR)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Multikomponenten- und Dominoreaktionen		V	2	75	30	30
MCR-Seminar		Sem	1	45	15	30
MCR-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. T. J. J. Müller				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> komplexe Synthesen unter Berücksichtigung diversitätsorientierter Aspekte planen und experimentell durchführen, Synthesestrategien und Synthesen komplexer Moleküle kompetent beurteilen und evaluieren, mechanistischen Diskussionen komplexer Synthesen folgen und sich daran mit angemessenen Beiträgen beteiligen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Begrifflichkeiten. Reaktive Funktionalitäten. Michael-Additionen. Cycloadditionen. Metallvermittelten und metallkatalysierten Reaktionen. Reaktivitätsbasierte Konzepte. Multikomponentenreaktionen auf Basis von Carbonylverbindungen, Iminen, Iminiumionen. Isonitrilen. Radikalreaktionen. Homo- und Hetero-Domino-Reaktionen. 						
<i>Praktikum:</i> Ausgewählte Literaturpräparate zu Multikomponenten- und Dominoreaktionen.						
<i>Seminar:</i> Diskussion relevanter Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche.						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen OC-M.				
Studienleistungen		Regelmäßige aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag über ein bearbeitetes Projekt und dessen theoretischen Hintergrund. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des MCR-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/110	
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen.						

Literatur**Übersichtsartikel MCR:**

- L. Levi, T. J. J. Müller, *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 2825.
S. Hassan, T. J. J. Müller, *Adv. Synth. Catal.* **2015**, *357*, 617.
T. J. J. Müller, *Top. Heterocycl. Chem.* **2010**, *25*, 25.
B. Willy, T. J. J. Müller, *Curr. Org. Chem.* **2009**, *13*, 1777.
J. D. Sunderhaus, S. F. Martin, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 1300.
B. B. Touré, D. G. Hall, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 4439.
N. Isambert, R. Lavilla, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 8444.
D. M. D'Souza, T. J. J. Müller, *Chem. Soc. Rev.* **2007**, *36*, 1095.
G. Guillena, D. J. Ramón, M. Yus, *Tetrahedron: Asymmetry* **2007**, *18*, 693.

Übersichtsartikel Dominoreaktionen:

- J. Muzart, *Tetrahedron* **2013**, *69*, 6735.
T. J. J. Müller, *Synthesis* **2012**, 159.
T. Vlaar, E. Ruijter, R.V. A. Orru, *Adv. Synth. Catal.* **2011**, *353*, 809.
A. de Meijere, P. von Zezschwitz, S. Bräse, *Acc. Chem. Res.* **2005**, *38*, 413.
G. Battistuzzi, S. Cacchi, G. Fabrizi, *Eur. J. Org. Chem.* **2002**, 2671.
L. F. Tietze, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 115.
L. F. Tietze, U. Beifuss, *Angew. Chem.* **1993**, *105*, 137.

Monographien

- J. Zhu, H. Bienaymé, (Hrsg.), *Multicomponent Reactions*, Wiley-VCH, Weinheim, **2005**.
J. Zhu, Q. Wang, M.-X. Wang (Hrsg.), *Multicomponent Reactions in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2015**.
L. F. Tietze, G. Brasche, K. M. Gericke, *Domino Reactions in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.
T. J. J. Müller (Hrsg.), *Multicomponent Reactions Vol. 1 und Vol. 2* (Science of Synthesis Series), Thieme Verlag, Stuttgart, **2014**.

Synthese und Katalyse (SynKat)				Stand: 15.05.2017		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Synthese und Katalyse		V	2	75	30	30
SynKat-Seminar		Sem	1	45	15	30
SynKat-Praktikum		PExp	6	120	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. T. J. J. Müller					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. T. J. J. Müller, PD Dr. K. Schaper.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • katalytische Methoden bei der Syntheseplanung berücksichtigen und zielführend anwenden, • Reaktionssequenzen unter Beteiligung katalytischer Syntheseschritte durchführen, • katalytische Synthesestrategien und Synthesen komplexer Moleküle kompetent beurteilen und evaluieren, • mechanistischen Diskussionen komplexer Synthesesequenzen folgen und sich daran mit angemessenen Beiträgen beteiligen. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung:</i></p> <p>Metallorganische Katalyse (keine Lewis-Säure-Katalyse, keine Hydrierungen):</p> <ul style="list-style-type: none"> • Kupplungsreaktionen jenseits des Palladiums (Fe, Cu, Rh, Ir). • Metathese (Ru, Mo, W). • Cyclooligomerisierung (Co, Rh, Pd, Au). • Cyclopropanierung (Rh, Cu). • CH-Aktivierung (Ru, Cu-Click). • Additionen (Pd, Ru, Au). <p>Organokatalyse</p> <ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der metallfreien Katalyse. • Aldol-Reaktion, Mannich-Reaktion, Diels-Alder-Reaktion, Michael-Addition. • Stetter-Reaktion, Baylis-Hilman-Morita-Reaktion. <p><i>Praktikum:</i> Ausgewählte Literaturpräparate zur Metall- und Organokatalyse.</p> <p><i>Seminar:</i> Diskussion relevanter Aspekte der im Praktikum durchgeführten Versuche.</p>						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen OC-M.					
Studienleistungen	Regelmäßige aktive Teilnahme an allen Lehrveranstaltungen, Anfertigung von Versuchsprotokollen, Vortrag über ein bearbeitetes Projekt und dessen theoretischen Hintergrund. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SynKat-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		

Sonstige Informationen

Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.

Datenbanken (Reaxys, SciFinder) für Literaturrecherchen

Literatur

L. S. Hegedus, *Organische Synthese mit Übergangsmetallen*, Wiley-VCH, Weinheim, **1995**.

A. Berkessel, H. Gröger, *Asymmetric Organocatalysis. From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2005**.

A. de Meijere, F. Diederich (Hrsg.), *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions*, Wiley-VCH, 2., completely rev. and enl. Ed., Weinheim, **2004**.

D. Steinborn, *Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse*, Springer, 3., überarb. und erw. Aufl., Berlin, **2019**.

O. M. Kuzmina, A. K. Steib, A. Moyeux, G. Cahiez, P. Knochel, *Synthesis* **2015**, 47, 1696.

F. Monnier, M. Taillefer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 6954.

J. F. Hartwig, L. M. Stanley, *Acc. Chem. Res.* **2010**, 43, 1461.

S. Hassan, T. J. J. Müller, *Adv. Synth. Catal.* **2015**, 357, 617.

D. L. J. Broere, E. Ruijter, *Synthesis* **2012**, 44, 2639.

E. Jiménez-Núñez, A. M. Echavarren, *Chem. Rev.* **2008**, 108, 3326.

Praktikumsskript.

Elektrosynthese (EISyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit Enantioselektiver Katalyse (EnKat) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeit-auf-wand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppen-größe
Elektrosynthese		V	2	60	30	12
EISyn-Seminar		Üb	1	30	15	12
EISyn-Praktikum		PExp	6	150	90	12
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Czekelius					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. C. Czekelius					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> den Aufbau verschiedener Elektrosynthesezellen sowie den Einfluss von Elektrodenmaterialien, Leitsalz und Lösungsmitteln erklären, die mechanistischen Grundlagen der Elektrodenoberflächenprozesse erläutern, Cyclovoltammetrie-Messungen durchführen sowie die Ergebnisse mechanistisch interpretieren, Elektrosynthesen im präparativen Maßstab durchführen, Vorteile und Nachteile von Elektrosynthesen im industriellen Maßstab benennen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Redoxverhalten organischer Verbindungen, Redoxpotential, physikalische Grundlagen, Cyclovoltammetrie, reversible und irreversible Prozesse, Oberflächen- und Doppelschichtprozesse. Oxidationen und Reduktionen mit elektrischem Strom, Decarboxylierungen und Cyclisierungen. Zellaufbau, Elektrodenmaterial und -orientierung, Bedeutung von Lösungsmittel und Leitsalz. Verwendung von Modifiern, gekoppelte Katalysatorsysteme, Opferelektroden. Elektrosynthese in ungewöhnlichen Medien. Elektrosynthese im industriellen Maßstab. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von elektrochemischen Problemen und mechanistische Betrachtungen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> Durchführung verschiedener oxidativer und reduktiver Elektrosyntheseverfahren. Evaluierung unterschiedlicher Elektrodenmaterialien. Verwendung wässriger und nichtwässriger Lösungsmittel. Cyclovoltammetriemessungen. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikums-synthesen. Erstellen von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des EISyn-Praktikums.					

Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
		Mündliche Einzelprüfung	30-45
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
C.H. Hamann, W. Vielstich, <i>Elektrochemie</i> , Wiley-VCH, 4. Aufl., Weinheim, 2005 .			
W. Schmickler, <i>Grundlagen der Elektrochemie</i> , Vieweg, Berlin, 2000 .			
R. Holze, <i>Elektrochemisches Praktikum</i> , Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2001 .			

Enantioselektive Katalyse (EnKat)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Semester	WiSe	2.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit Elektrosynthese (EISyn) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Enantioselektive Katalyse		V	2	60	30	10
EnKat-Seminar		Sem	1	30	15	10
EnKat-Praktikum		PExp	6	150	90	10
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. C. Czekelius					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. C. Czekelius					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die grundsätzlichen Probleme bei der mechanistischen Beschreibung enantioselektiver katalytischer Transformationen wiedergeben, • die Möglichkeiten der Elektrophilaktivierung über chirale Lewissäuren beschreiben und auf verschiedene Substrate anwenden, • mögliche Katalysatoren für eine Nucleophilaktivierung benennen, • doppelte Nucleophil- und Elektrophilaktivierung mechanistisch erläutern, • mehrere Methoden zur enantioselektiven Olefinoxidation benennen und erläutern. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Mechanistische Grundlagen der enantioselektiven Katalyse: Die Halpern-Studie. • Aktivierung von Carbonylverbindungen durch chirale Lewissäuren. • Aktivierungsmodi (Einpunkt- bzw. Zweipunktbindung), anwendbare Substrate, Einschränkungen. • Nucleophilaktivierung durch chirale Übergangsmetallkomplexe. • Doppelte Aktivierung von Nucleophil und Elektrophil, enthalpische und entropische Kontrolle, nichtlinearer Selektivitätsverlauf. • Organokatalyse. • Ausgewählte enantioselektive Oxidationsreaktionen von ungesättigten Kohlenwasserstoffen. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von stereochemischen Problemen anhand aktueller Naturstoffsynthesen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Darstellung und Anwendung chiraler Katalysatoren für enantioselektive Epoxidierungsreaktionen von Allylkohlen und nichtaktivierten Olefinen. • Enantioselektive Dihydroxylierungsreaktionen. • Moderne Analysemethoden zur Bestimmung der Enantioselektivität. 						
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen OC-M.					
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					

Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des EnKat-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
F. A. Carey, R. J. Sundberg, <i>Organische Chemie – Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 . M. B. Smith, <i>March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure</i> , J. Wiley & Sons, 7. Ed., New York, 2013 . I. Ojima (Hrsg.), <i>Catalytic Asymmetric Synthesis</i> , J. Wiley & Sons, 3. Ed., Hoboken, 2010 . E. J. Corey, L. Kürty, <i>Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic, and Practice</i> , Elsevier Science, 2013 . H. Yamamoto (Hrsg.), <i>Lewis Acids in Organic Synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2000 .			

Stereoselektive Synthese (SSSyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Stereoselektive Synthese		V	2	60	30	15
SSSyn-Seminar		Sem	1	30	15	15
SSSyn-Praktikum		PExp	6	150	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. Czekelius				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. C. Czekelius				
Sprache		Deutsch oder englisch nach Wahl der Studierenden.				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • diastereoselektive Reaktionen erkennen und mechanistisch erläutern, • den Einfluss von Stereozentren auf den stereochemischen Verlauf einer nucleophilen Carbonyladdition erkennen und anhand des Felkin-Anh-Modells erläutern, • den stereochemischen Verlauf der Enolatbildung und ihre Alkylierung erklären, • die Grundprobleme stereoselektiver Aldol-Reaktionen erläutern und beobachtete Produktselektivitäten nachvollziehen, • den Typus von Allylierungs- und Crotylierungsreagenzien erkennen und daraus die Produktselektivität ableiten, • den Einfluss dirigierender Gruppen auf den stereoselektiven Verlauf von Oxidationsreaktionen darstellen, • die Einflüsse mehrerer Stereozentren auf die Diastereoselektivität einer Reaktion abschätzen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Addition von Nucleophilen an Carbonylverbindungen mit α-Stereozentrum: Das Felkin-Anh-Modell. • Stereoselektivität der Enolatbildung und Selektivität der Enolat-Alkylierung. • Die Aldolreaktion: Probleme, Übergangszustände, chirale Auxiliare, syn- und anti-selektive Aldolreaktionen. • Stereoselektivität von Allylierungen und Crotylierungen, Typ I-III-Reagenzien. • Dirigierende Effekte und Diastereoselektivität in Epoxidierungen und Dihydroxylierungen sowie verwandten Oxidationsreaktionen. 						
<i>Seminar:</i> Bearbeitung von stereochemischen Problemen anhand aktueller Naturstoffsynthesen.						
<i>Praktikum:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Anwendung chiraler Auxiliare bei der stereoselektiven Allylierung von Propionsäure. • Stereoselektive Reduktionsverfahren von Ketonen. • Moderne Analysemethoden zur Verfolgung des stereochemischen Verlaufs von Reaktionen. 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme an den Pflichtmodulen OC-M.				
Studienleistungen		Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung, Seminar und Praktikum. Erfolgreiche Durchführung aller Praktikumssynthesen. Erstellen				

	von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SSSyn-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
Literatur			
F. . A. Carey, R. J. Sundberg, <i>Organische Chemie – Ein weiterführendes Lehrbuch</i> , Wiley-VCH, Weinheim, 1995 . M. B. Smith, <i>March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure</i> , J. Wiley & Sons, 7. Ed., New York, 2013 . E. M. Carreira, L. Kvaerno, <i>Classics in Stereoselective Synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2009 . M. Braun, <i>Modern Enolate Chemistry. From Preparation to applications in asymmetric synthesis</i> , Wiley VCH, Weinheim, 2016 . T.-L. Ho, <i>Stereoselectivity in Synthesis</i> , John Wiley & Son Inc., New York, 1999 .			

Grundlagen der Umweltchemie (GUC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Grundlagen der Umweltchemie		V	2	60	30	50
GUC Seminar		Sem	1	45	30	30
GUC Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. M. Schmitt					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. M. Schmitt					
Sprache	Deutsch, englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Eigenständige Anwendung von in den Grundvorlesungen der Physikalischen Chemie erworbenen Fähigkeiten in der Thermodynamik, Kinetik und Spektroskopie auf Fragestellungen in der Umweltchemie. Befähigung zur vernünftigen Abschätzung von Größenordnungen physikochemischer Prozesse in der Umwelt. Befähigung zur Beurteilung von Modellvorstellungen.						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Aufbau der Atmosphäre. • Physik der Atmosphäre (Temperatur- und Druckverlauf, Chemie der Atmosphäre, Kinetische Modellierungen, der natürliche Treibhauseffekt, der anthropogene Treibhauseffekt, das stratosphärische Ozonloch, Emission und Verhinderung von Schadgasen durch Industrie, Emission und Verhinderung von Schadgasen durch Verkehr, Luftanalytik, Abfallbehandlung, Anreicherung von Schadstoffen). • Energieverbrauch/Energieerzeugung Prinzipien regenerativer Energiequellen. 						
<i>Seminar:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Umweltchemie. • Mathcad-Übungen zu ausgewählten Problemen der Umweltchemie. 						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
<ul style="list-style-type: none"> • Anwendung spektroskopischer Techniken zur Messung und Quantifizierung von Spurengasen. • Versuche zur Energieeffizienz. • Versuche zum Abbau von Schadstoffen. • Versuche zum Strahlungshaushalt der Erde 						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen. Anfertigung von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des GUC-Praktikums.					
Prüfungen	Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet		
	Klausur		45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.						

Literatur

A. Heinz, G. A. Reinhard, Chemie und Umwelt. Ein Studienbuch für Chemiker, Physiker, Biologen und Geologen, Vieweg, 4., aktual. und erw. Aufl., Braunschweig, **1996**.

K. Voß, *Umweltchemie. Eine Einführung für Studium und Praxis*, Springer, Berlin, **1997**.

Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden (SSPK)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Streumethoden zur Strukturaufklärung von Polymeren und Kolloiden		V	2	60	30	30
SSPK-Seminar		Sem	1	45	15	30
SSPK-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Matthias Karg					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Matthias Karg					
Sprache	Deutsch, englisch auf Wunsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Chemie				Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die Grundlagen der Polymer- und Kolloidchemie wiedergeben, • die Grundlagen der Wechselwirkung verschiedener Strahlungsformen mit Materie nachvollziehen, • die Grundlagen verschiedener Streumethoden wiedergeben, • Experimentelle Streukurven auswerten und interpretieren, • Strukturinformationen aus Streudaten ableiten. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
Einführung zu Polymeren und Kolloiden:						
<ul style="list-style-type: none"> • Definition, Herstellung, Stabilität, Anwendung. • Charakterisierungsmethoden. • Aufbau und Eigenschaften. 						
Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie:						
<ul style="list-style-type: none"> • Absorption, Streuung, Reflektion, Beugung. • Dynamische Lichtstreuung. • Kleinwinkellichtstreuung. • Statische Lichtstreuung. • Depolarisierte dynamische Lichtstreuung. 						
Neutronen- und Röntgen-Kleinwinkelstreuung:						
<ul style="list-style-type: none"> • Strahlungserzeugung. • Formfaktor. • Kontrastvariation. • Streuquerschnitt. • Strukturfaktor. • Zeitaufgelöste Experimente. 						
<i>Seminar:</i> Eigenständige Bearbeitung und Vorstellung ausgewählter Themen aus der Strukturaufklärung.						
<i>Praktikum (als Blockpraktikum):</i>						
Es werden verschiedene Aspekte der Kolloid- oder Polymersynthese, der Lichtstreuung, der Mikroskopie und Bildauswertung sowie der Handhabung von Streudaten bzw. Realraumdaten durch beispielhafte experimentelle und theoretische Versuche veranschaulicht.						
Teilnahmevoraussetzungen	keine					

Studienleistungen	Aktive Teilnahme an den Lehrveranstaltungen, Protokolle zum Praktikum, Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SSPK-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF sowie unter folgender Webadresse: http://www.karg.hhu.de/unsere-lehre.html			
Literatur			
H.-D. Dörfler, <i>Grenzflächen und kolloid-disperse Systeme</i> , Springer, Berlin, 2002 . H.-J. Butt, K. Graf, M. Kappl, <i>Physics and Chemistry of Interfaces</i> , Wiley-VCH, 3., rev. and enl. Ed., Weinheim, 2006 W. Brown, <i>Dynamic Light Scattering. The Method and Some Applications</i> , Clarendon Press, Oxford, 1993 . M. Hendrix, A. Leipertz, <i>Photonenkorrelationsspektroskopie, Physik in unserer Zeit</i> , 1984 , 3, 68. J. S. Higgins, H. Benoit, <i>Polymers and Neutron Scattering</i> , Clarendon Press, Oxford, 1994 . D. S. Sivia, <i>Elementary Scattering Theory. For X-ray and neutron users</i> , Oxford University Press, Oxford, 2011 .			

Präperative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Präperative und spektroskopische Aspekte der organischen Photochemie (PSP)		V	2	60	30	30
PSP-Praktikum		PExp	6	135	90	15
PSP-Seminar		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortliche:r	Prof. Dr. Peter Gilch, Priv.-Doz. Dr. Klaus Schaper					
Beteiligte Dozenten	Prof. Dr. Peter Gilch, Priv.-Doz. Dr. Klaus Schaper					
Sprache	Deutsch oder englisch nach Wunsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Chemie M. Sc. Biochemie				Wahlpflichtmodul Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Angeregte Zustände als elektronische Isomere erkennen; Bedeutung der Photochemie in Technologie und Industrie beschreiben; Photochemische Arbeitsweisen und Messtechniken erlernen; Sicherer Umgang mit aktueller wissenschaftlicher Literatur; Forschungsprojekt konzipieren, durchführen und dokumentieren.						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Absorption und Emission. 2. Nicht-strahlende Prozesse. 3. Ratenkonstanten und Quantenausbeuten. 4. Magnetfeldeffekte. 5. Methodische Aspekte der präparativen Photochemie. 6. Transferprozesse. 7. Woodward-Hoffmann-Regeln in der Photochemie. 8. Photoreaktionen von Carbonylverbindungen. 9. Industrielle Anwendungen. 10. Photolithographie. 11. Photolabile Schutzgruppen.						
<i>Seminar</i>						
In Zusammenarbeit mit dem Dozenten werden aktuelle Originalarbeiten aus dem Themenbereich der Vorlesung ausgewählt und von den Studierenden vorgestellt.						
<i>Praktikum</i>						
Das Blockpraktikum wird entweder mit präparativem Schwerpunkt in der AG Schaper oder mit spektroskopischem in der AG Gilch abgeleistet. Im präparativen Praktikum werden photochemische Synthesetechniken erlernt und angewandt. Im spektroskopischen Praktikum werden Moleküle hinsichtlich Quantenausbeuten und anderer photochemischen Parameter charakterisiert.						
Teilnahmevoraussetzungen	Studierende, die das Spezialisierungspflichtmodul MPESP besucht haben, können das Modul PSP nicht belegen.					
Studienleistungen	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Modulveranstaltungen, Anfertigung von Protokollen, Vortrag im Seminar. Art und Umfang der zu					

	erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des PSP-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Das Modul ist Teil der Forschungsschule MPESP, kann aber auch als eigenständiges Modul belegt werden.			
Literatur			
P. Klán, J. Wirz, <i>Photochemistry of Organic Compounds. From Concepts to Practice</i> , John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2009 . N.J. Turro, V. Ramanurthy, J.C. Scaino, <i>Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules</i> , University Science Books, Sausalito, 2010 .			

Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe, jedes 2. Jahr	2.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit dem Wahlpflichtmodul Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Relativistische Quantenchemie		V	2	90	30	30
Relativistische Quantenchemie		Üb	1	45	15	30
Relativistische Quantenchemie		PExp	6	105	75	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. C. M. Marian				
Beteiligte Dozenten		Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.				
Sprache		deutsch, englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Chemie		Wahlpflichtmodul		
		M. Sc. Informatik		Wahlpflichtmodul		
		M. Sc. Physik		Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • die grundlegenden Konzepte Relativitätstheorie wiedergeben, • den Weg zur Dirac-Gleichung skizzieren und die Bedeutung ihrer Lösungen analysieren, • den Weg zu ein- und zweikomponentigen Näherungen beschreiben, • beurteilen, wann die Anwendung relativistischer Methoden notwendig ist, • Ein- und Zweielektronen-Spin-Bahn-Operatoren gegenüberstellen, • Übergangswahrscheinlichkeiten für spinverbotene Übergänge berechnen, • Rechnungen mit den in der Arbeitsgruppe gängigen Programmen durchführen und interpretieren. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung</i>						
1. Relativistische Effekte, Dirac-Coulomb-Gleichung, No-Pair-Näherung, Skalarrelativistische Effekte, Effektive Rumpfpotentiale.						
2. Elektronische Spin-Bahn-Kopplung: Operatoren, Auswahlregeln, Spinabhängige Effekte.						
3. Fluoreszenz- und Phosphoreszenzraten.						
<i>Praktikum</i>						
Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung.						
Teilnahmevoraussetzungen		Keine, aber Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden, werden vorausgesetzt.				
Studienleistungen		Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des Rela-Praktikums und erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.				
Prüfungen		Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet		
		Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		
Sonstige Informationen						
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.						

Literatur

M. Reiher, A. Wolf, *Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science*, Wiley-VCH, 2Ed., Weinheim, **2009**.

K. G. Dyall, K. Faegri, *Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*, Oxford Univ Press, New York, **2007**.

C. M. Marian, "Spin-Orbit Coupling and Intersystem Crossing in Molecules", *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, [2\(2012\)](#), 187–203.

C. M. Marian, „Spin-orbit coupling in molecules“ in: *Reviews in Computational Chemistry* (Hrsg. K. Lipkowitz, D. Boyd), Wiley-VCH, Weinheim, 17 (**2001**), 99-204.

Dynamik mit QM/MM-Verfahren (Dyn)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe, jedes 2. Jahr	2.		
Anmerkung: Findet im jährlichen Wechsel mit dem Wahlpflichtmodul relativistische Quantenchemie (Rela) statt.						
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		V	2	90	30	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		Üb	1	45	15	30
Photodyn. mit QM/MM Verfahren		PExp	6	105	75	15
Modulverantwortliche:r	PD Dr. Oliver Weingart					
Beteiligte Dozenten	Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie.					
Sprache	deutsch/englisch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
	M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Informatik			Wahlpflichtmodul		
	M. Sc. Physik			Wahlpflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> die Grundlagen molekülmechanischer und quantenmechanischer Verfahren sowie deren Kombination in QM/MM Verfahren wiedergeben, erweitertes Wissen über quantenmechanische Verfahren zur Beschreibung angeregter Zustände vorweisen, die Bewegung von Molekülen auf Singulett-Potenzialflächen nachvollziehen, kombinierte quantenmechanische/molekülmechanische Berechnungen zur Photodynamik einfacher Modellsysteme durchführen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> subtraktive und additive QM/MM-Verfahren. Molekülmechanische Methoden. Ensembles. Surface-Hopping-Dynamik auf Born-Oppenheimer-Flächen. QM-Methoden für angeregte Zustände. Nichtadiabatische Kopplung. Solvatation. Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten. 						
<i>Übungen:</i> Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Themen der Vorlesung.						
<i>Praktikum:</i> Forschungspraktikum zu Themen der Vorlesung nach individueller Vereinbarung.						
Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnisse, wie sie z.B. in den Vorlesungen „Quantenchemische Methoden für angeregte Zustände“ und „Mathematische Methoden der Theoretischen Chemie“ vermittelt werden, werden vorausgesetzt.					
Studienleistungen	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungs- und Praktikumsaufgaben, Praktikumsprotokoll. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Dyn-Praktikums und erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben.					
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet			
	Mündliche Einzelprüfung	30-45	benotet			
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				8/110		

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.
Literatur
F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , Wiley-VCH, 3. Ed., Chichester, 2017 . H. M. Senn, W. Thiel, QM/MM Methods for Biological Systems, <i>Top. Curr. Chem.</i> (2007) 268: 173–290. O. Weingart, Combined Quantum and Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Simulate Ultrafast Photodynamics in Biological Systems, <i>Curr. Org. Chem.</i> (2017) 21: 586-601.

Simulation von Biomolekülen (BioSim)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Block, 3 Wochen	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Simulation von Biomolekülen		V	2	60	30	250
Bio-Sim-Seminar		Sem	1	45	15	30
Bio-Sim-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortliche:r		Prof. Dr. B. Strodel				
Beteiligte Dozenten		Prof. Dr. B. Strodel				
Sprache		deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Qualifizierungsmodul	
		B. Sc. Chemie			Qualifizierungsmodul	
		B. Sc. Biochemie			Qualifizierungsmodul	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflichtmodul	
		M. Sc. Biochemie			Wahlpflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls <ul style="list-style-type: none"> • Proteine und andere Biomoleküle mit der Software VMD visualisieren, • die Theorie hinter Molekulardynamik(MD)-Simulationen nachvollziehen, • MD-Simulationen von Proteinen mit der Software GROMACS durchführen und diese auswerten, • englischsprachige Publikationen über biomolekulare Simulationen verstehen und diese in einem Vortrag vorstellen. 						
Inhalte						
<i>Vorlesung:</i>						
1. Biomolekulare Kraftfelder. 2. Berechnung nichtkovalenter Wechselwirkungen. 3. Geometrieoptimierung. 4. Molekulardynamik (MD)-Simulationen: Theorie, MD mit dem Programm GROMACS, Auswertung von MD-Simulationen, Methoden zur Berechnung von freien Energien (z.B. Replica-Exchange-MD und Umbrella-Sampling-MD). 7. Monte-Carlo-Simulationen, inklusive globaler Optimierung. 8. QM/MM-Simulationen, mit Anwendungen auf Enzyme.						
<i>Seminar:</i>						
1. Analyse einer Publikation zum Thema biomolekulare Simulation und eigene Simulationen zu dieser Publikation 2. Vorstellen der Publikation und der eigenen Simulationsergebnisse in einem Seminarvortrag (30 Minuten, Powerpoint)						
<i>Computerpraktikum:</i>						
1. Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS, des QM/MM-Programms ChemShell und des Programms VMD zur Darstellung von Biomolekülen 2. Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux. Die Übungsaufgaben werden selbstständig bearbeitet. 3. Protokolle zu den Übungen. Die Protokolle werden korrigiert und besprochen.						

Teilnahmevoraussetzungen	Keine, aber Kenntnisse wie sie z.B. im Bachelormodul QCCC vermittelt werden, werden vorausgesetzt.		
Studienleistungen	Bearbeitung von Übungen im Rahmen des Computerpraktikums inklusive Protokolle, Seminarvortrag.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des Bio-Sim-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts. Wenn das Modul bereits als Qualifikationsmodul im Bachelorstudiengang gewählt wurde, ist eine Belegung als Wahlpflichtmodul im Masterstudiengang ausgeschlossen.			
Literatur			
1. Skript zur Vorlesung 2. Fachbücher: T. Schlick, <i>Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide</i> , Springer, 2. Ed., New York, 2010 . A.R. Leach, <i>Molecular Modeling – Principles and Applications</i> , Prentice Hall, 2. Ed., Harlow, 2001 . D. Frenkel, B. Smit, " <i>Understanding Molecular Simulation. From algorithms to applications</i> ", Academic Press, 2. Ed., San Diego, 2002 . 3. Spezialliteratur zu Seminarthemen wird ausgegeben.			

Module mit Zuordnung zum 2. Fachsemester

Pflichtmodule

AC-M (Pflichtmodul Anorganische Chemie)				Stand: 10.10.2023		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Pflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Festkörper- und Materialchemie		V	2	70	30	100
Metallorganische Komplexchemie		V	1	35	15	100
AC-M-Praktikum mit Seminar		PExp & Sem	6	105	90	15 & 30
Modulverantwortliche:r	N.N.					
Beteiligte Dozenten	Die Dozenten der Anorganischen Chemie.					
Sprache	deutsch					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang				Modus	
	M. Sc. Chemie (anteilig)				Pflichtmodul	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> wichtige Aspekte der modernen anorganischen Chemie beschreiben und erläutern, ein vertieftes Verständnis für Festkörper- und Materialchemie nutzen, insbesondere die Verwandtschaft bestimmter Strukturtypen und Struktur-Eigenschaftsbeziehungen beurteilen, Synthesen mit modernen Synthesemethoden problemorientiert im Zusammenspiel mit begleitenden Analyseverfahren planen und durchführen, sicher mit komplexen Reaktionsapparaturen umgehen, moderne Synthesemethoden auswählen und anwenden, begleitende Analyseverfahren bewerten und auswerten, wissenschaftliche Ergebnisse kreativ präsentieren. 						
Inhalte						
<p>1. <i>Prinzipien der chemischen Material- und Strukturforschung:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Synthesemethoden der Festkörperchemie: Thermodynamik und Kinetik, Bedeutung von Temperatur und Druck Allgemeine und spezielle Punktlagen, Wyckoff-Notation, Relation zwischen Kristall- und Lagesymmetrien. Strukturverwandtschaften, Grundzüge von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen. Einblick in Röntgendiffraktion als Charakterisierungstechnik. Polyederverknüpfungen. Zintl-Klemm-Busmann-Konzept und Vorhersage bestimmter Struktur motive anhand von Elektronenzahlen. Grundlegende Beschreibung von Kristallstrukturen: Basis, Gitter, Struktur, Bravais-Gitter, Raumgruppentypen. Einfache Strukturtypen binärer und ternärer anorganischer Verbindungen. Bedeutung der Natur der chemischen Bindung. Beschreibung von Bandstrukturen, elektronische Eigenschaften von Festkörpern (Metalle, Halbleiter). Grundzüge des Magnetismus, Supraleitung. 						

2. Metallorganische Komplexchemie:

- Vertiefung der Grundlagen aus dem EOC-BSc-Modul.
- Reaktionsmechanismen und spektroskopische Methoden in der metallorganischen Chemie.
- Clusterregeln.
- Systematik der Liganden (Olefine und Diene, Allyle und Dienyle, cyclische Liganden, Carbene).
- Isolobalanalogie.

AC-M-Praktikum:

- Fortgeschrittene Synthesemethoden (Inertgas- und Schlenktechnik, HV-Apparaturen, Hydrothermalsynthese, Hochtemperaturreaktionen, Sol-Gel-Verfahren, nichtwäss. Lösungsmittel).
- Herstellung und Charakterisierung von Liganden, Metallkomplexen, bioanorganischen Modellverbindungen, Pigmenten, Gläsern und Metall- bzw. Halbleiternanopartikeln, Hybridmaterialien. Reaktions- und Produktkontrolle mit kombinierten spektroskopischen Methoden.

Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesungen, Teilnahme am Praktikum; Erfolgreiche Bearbeitung der Praktikumsaufgaben, Anfertigen von Protokollen; Seminarvortrag. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des AC-M-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	75	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			7/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen werden auf ILIAS und im HIS-LSF veröffentlicht.			
Literatur			
K. E. Huheey, E. A. Keiter, R. Keiter, <i>Anorganische Chemie. Prinzipien von Struktur und Reaktivität</i> , De Gruyter, 3., durchges Aufl., Berlin/New York, 2020 .			
D. F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford, <i>Anorganische Chemie</i> , Wiley-VCH, 2. Aufl., Weinheim, 1997 .			
U. Müller, <i>Anorganische Strukturchemie</i> , Vieweg+Teubner, 6., aktual. Aufl., Wiesbaden, 2008 .			
L. Smart, E. Moore, <i>Einführung in die Festkörperchemie</i> , Springer, Berlin/ Heidelberg, 1997 .			
U. Schubert, N. Hüsing, <i>Synthesis of Inorganic Materials</i> , Wiley VCH, 4. Ed., Weinheim, 2019 .			
C. Janiak, H. –J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, <i>Riedel. Moderne Anorganische Chemie</i> ; De Gruyter, 5. Aufl., Berlin/Boston, 2018 .			
C. Elschenbroich, <i>Organometallchemie</i> , Teubner, 6. Auflage, Wiesbaden, 2008 .			
J. D. Woollins, <i>Inorganic Experiments</i> , Wiley VCH, 3., rev. Ed., Weinheim, 2010 .			
G. Brauer, M. Baudler, <i>Handbuch der Präparativen Anorganischen Chemie</i> , Enke, Stuttgart, 1954 .			
W. A. Herrmann, G. Brauer, <i>Synthetic Methods of Organometallic and Inorganic Chemistry</i> , Thieme, Stuttgart, 1997 .			
Ausgewählte Artikel aus Chemie in unserer Zeit und dort zitierte Originalarbeiten.			

PC-M (Pflichtmodul Physikalische Chemie)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Pflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
7	210	1 Semester	WiSe	2.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Spektroskopie komplexer Systeme (SMKS-1)		V	3	120	45	200
SMKS-1 Übungen		Üb	1	40	15	30
SMKS-Praktikum		PExp	3	50	30	15
Modulverantwortliche		Prof. Dr. M. Karg / Prof. Dr. C. Seidel				
Beteiligte Dozenten		Die Dozenten der Physikalischen Chemie im Wechsel.				
Sprache		deutsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang		Modus		
		M. Sc. Chemie (anteilig)		Pflichtmodul		
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen und fortgeschrittene Anwendungen spektroskopischer und mikroskopischer Methoden zur Analyse komplexer Systeme wiedergeben, • Resonanzbegriff in der Spektroskopie erläutern und verschiedene Arten in Bezug auf Vorteile und Nachteile vergleichen, • die verschiedenen Ursachen des Zerfalls elektronisch angeregter Zustände erläutern, • verschiedene spektroskopische Messungen durchführen, • mikroskopische Techniken anwenden, • Spektren aufzeichnen, analysieren und interpretieren, • komplexe Moleküle, Grenzflächen und Nanostrukturen analysieren. 						
Inhalte						
<p><i>Vorlesung 1 (SMKS-1): Spektroskopie komplexer Systeme</i></p> <p>2. Grundlegende Prinzipien.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Motivation und historischer Abriss. • Resonanz (klassisch, quantenmechanisch), Absorption, Emission (spontan und stimuliert) und Dispersion. • Definition Spektroskopie, Spektroskopie mit EM-Wellen, Spektralbereiche. • Allgemeine Messmethoden (Prinzipien und apparative Voraussetzungen) der Spektroskopie. <p>3. Spektroskopie von mehratomigen Molekülen.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Überblick, Vorteile der Behandlung von isolierten Molekülen: Rotationen, Schwingungen, Elektronische Anregungen. • Unterschiede Gasphase/flüssige Phase: Linienbreiten, Resonanzfrequenzen. • Dephasing und Energiedissipation (T1 und T2 Zeiten). <p>3. Zerfall elektronisch angeregter Zustände und zeitaufgelöste Spektroskopie.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Übersicht über Zeitskalen, kürzestes Zeitskala für chemische Reaktionen • Methoden der zeitaufgelösten Spektroskopie, fs-Spektroskopie • Jablonski-Diagramm, Zerfallszeiten, Quantenausbeuten. • Strahlende Lebensdauer, Strickler-Berg. 						

- Intramolekulare Prozesse: Innere Konversion, Interkombination.
- Photochemie
- Fluoreszenzlöschung durch: Energietransfer (FRET) und Elektrontransfer

4. Physikalische Grundlagen der NMR-Spektroskopie und der Kernspintomographie

- Apparative Voraussetzungen, Spin- bzw. Photonenecho, 2-dimensionale NMR-Spektroskopie, dynamische Effekte.

Begleitend werden zu den verschiedenen Themen die Inhalte des Praktikums vermittelt.

Übungen für Studierende der Wirtschaftschemie

Vertiefende Rechenübungen zu den Themen der Vorlesung SMKS-1. Gestellte Aufgaben werden selbstständig bearbeitet. Die korrigierten Übungsaufgaben werden gemeinsam mit der Darstellung der Lösungswege besprochen.

Praktikum

Experimentelle Übungen zur physikochemischen Charakterisierung komplexer Systeme.

3 ausgewählte Versuche aus einem begrenzten Pool von Versuchen, z.B.

- Registrierung und Auswertung eines Iod-Dampf VIS- Spektr.
- Mikroskop. Techniken zur Messung von Größenverteilungen.
- IR-Koaleszenzspektroskopie.
- Korrosion + Passivität.

sowie weitere Versuche in enger Anlehnung an die Vorlesung.

Teilnahmevoraussetzungen	keine		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme an Vorlesung und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben. Praktikum: vor Versuchsbeginn mündliches Kolloquium zum Experiment, Seminarvortrag, Anfertigung von Protokollen. Art und Umfang der zu erbringenden Studienleistungen sind dem konkreten experimentellen Programm angepasst und in der Praktikumsordnung spezifiziert.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des SMKS-Praktikums.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	80	benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			7/110
Sonstige Informationen			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Weitere Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html			
Literatur			
P.W. Atkins, J. De Paula, J. J: Keeler, <i>Physikalische Chemie</i> , Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, 2022 .			
H.-J. Freund, G. Wedler, <i>Lehrbuch der Physikalischen Chemie</i> , Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, 2012 .			
W.J. Moore, D.O. Hummel, <i>Physikalische Chemie</i> , de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, 1986 .			
G.M. Barrow, G.W. Herzog, <i>Physikalische Chemie I-III</i> , Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, 1984 .			
H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, <i>Principles of Physical Chemistry</i> , John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, 2009 .			

Module mit Zuordnung zum 3. Fachsemester

Wahlpflichtmodule

Projektarbeit (MQ-WiC)				Stand: 04.03.2020		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Wahlpflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	SoSe/WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Projektarbeit mit Kolloquium		Sem/Üb		240	60	30
Das Qualifizierungsmodul entspricht inhaltlich einer Projektarbeit MQ06 des Masterstudiengangs Betriebswirtschaftslehre.						
Modulverantwortliche:r	Modulverantwortliche/r des zugeordneten Wahlpflichtmoduls					
Beteiligte Dozenten	Hauptamtlich im Studiengang M. Sc. Wirtschaftschemie in Forschung oder Lehre tätige Mitglieder der Gruppe der Hochschullehrerinnen und Hochschullehrer der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf; andere Personen benötigen die vorherige Zulassung durch den Prüfungsausschuss Wirtschaftschemie.					
Sprache	deutsch (englisch nach Absprache mit den Lehrenden)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
<p>Ziel der Projektarbeit ist es zu demonstrieren, dass die Studierenden in der Lage sind, selbständig ein wissenschaftliches Thema in begrenzter Zeit schriftlich und/oder mündlich zu erläutern, zu strukturieren und zu beurteilen. Das Kolloquium soll in erster Linie auf die Erstellung der Projektarbeit vorbereiten und darüber hinaus den Studierenden den Erwerb überfachlicher Schlüsselkompetenzen ermöglichen.</p> <p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> • selbständig ein wissenschaftliches Thema in begrenzter Zeit schriftlich und/oder mündlich erläutern, strukturieren und beurteilen, • Regeln der Sorgfalt bei der Erstellung wissenschaftlicher Arbeiten und/oder Präsentationen benennen und anwenden, • Arbeitsschritte bei der Erstellung wissenschaftlicher Arbeiten und/oder Präsentationen planen und selbständig durchführen, • Literaturrecherchen selbständig durchführen, Literaturquellen kritisch würdigen und Zitierweisen (auch in Präsentationen) anwenden, • Software zur Erstellung von Projektarbeiten und Präsentationen (ggf. inklusive Literaturverwaltungsprogrammen) benutzen, • Techniken guter wissenschaftlicher Präsentationen umsetzen, • Gruppenarbeiten zielführend gestalten, • Feedbackregeln anwenden, • ihre eigene Arbeitsweise reflektieren. 						
Inhalte						
<p>Die Projektarbeit ist in der Regel fachlich mit einem wirtschaftswissenschaftlichen Wahlpflichtmodul verknüpft. Die Inhalte der Projektarbeiten ergeben sich aus den dortigen Kursinhalten und werden von den Modulverantwortlichen festgelegt.</p> <p>Durch Lehrvortrag, Gruppenarbeit, Referate, Selbststudium und Studierendenvorträge sollen Studierende auf die Anforderungen einer Projektarbeit vorbereitet werden.</p>						

Das Kolloquium dient dem Erlernen wissenschaftlicher Arbeitstechniken sowie weiterer Methoden-, Selbst- und Sozialkompetenzen. Es bereitet somit nicht nur auf die Projektarbeit, sondern auch auf spätere berufliche Herausforderungen vor.			
Teilnahmevoraussetzungen	Wahl eines wirtschaftswissenschaftlichen Wahlpflichtmoduls und Abstimmung des Themas der Projektarbeit mit der/dem zugehörigen Modulverantwortlichen.		
Studienleistungen	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Kolloquium und der Gruppenarbeit zur Projektarbeit. Beteiligung an Sachdiskussionen. Vorträge und schriftliche Ausarbeitungen.		
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Die Anforderungen für die zu erbringenden Leistungen legt die Themenstellerin / der Themensteller der Projektarbeit gem. § 9 (10) und § 9 (11) der Prüfungsordnung zu Beginn der Projektarbeit fest.		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Prüfung gem. §9 der PO		benotet
Stellenwert der Note für die Gesamtnote			8/110
Sonstige Informationen			
Konkrete Informationen zum Ablauf und zur Organisation einer Projektarbeit sind an den Lehrstühlen zu erfragen. Aktuelle Informationen finden Sie auf den Internetseiten der Lehrstühle, auf ILIAS oder im HIS-LSF.			
Literatur			
Konkrete Literaturhinweise werden zu Beginn einer Projektarbeit durch die Lehrenden gegeben.			

Abschlussmodul

Masterarbeit				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: M. Sc. Wirtschaftschemie				Modus: Pflicht		
Zuordnung gem. § 2 Prüfungsordnung: Chemie oder Wirtschaftswissenschaften						
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
20	600	max. 4 Monate	SoSe/WiSe	3.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Masterarbeit				600		
Modulverantwortliche:r	Betreuer/in der Masterarbeit					
Beteiligte Dozenten	Hauptamtlich im Studiengang M. Sc. Wirtschaftschemie in Forschung oder Lehre tätige Mitglieder der Gruppe der Hochschullehrerinnen und Hochschullehrer der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf; andere Personen benötigen die vorherige Zulassung durch den Prüfungsausschuss Wirtschaftschemie.					
Sprache	deutsch (englisch auf Wunsch)					
Weitere Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang			Modus		
Lernziele und Kompetenzen						
Mit der Masterarbeit belegen Studierende die Fähigkeit innerhalb einer vorgegebenen Frist ein chemisches oder wirtschaftswissenschaftliches oder eines aus dem Überlappungsbereich beider Wissenschaftsfelder entnommenes Problem selbständig nach wissenschaftlichen Methoden zu bearbeiten, wissenschaftlich zu dokumentieren und öffentlich zu vertreten.						
Inhalte						
Die Inhalte der Masterarbeit sind abhängig vom gewählten Thema.						
Teilnahmevoraussetzungen	Die Zulassung zur Masterarbeit wird erteilt, wenn der Nachweis des Erwerbs von mindestens 45 Leistungspunkten des Curriculums M. Sc. Wirtschaftschemie erbracht worden ist.					
Studienleistungen	Einarbeitung in ein fachwissenschaftliches Problem inkl. Literaturrecherche. Anfertigung der schriftlichen Masterarbeit im Umfang von max. 60 Seiten. <i>Zusätzlich bei einer Arbeit im Bereich der Chemie:</i> Teilnahme an Arbeitskreiseminaren und öffentliche Präsentation der Ergebnisse der Bachelorarbeit (ca. 20 Min.) mit anschließender Diskussion (ca. 10 Min.).					
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	entfällt					
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]		benotet/unbenotet		
	schriftliche Abschlussarbeit			benotet		
Stellenwert der Note für die Gesamtnote				40/110		
Sonstige Informationen						
Literatur						
Die verwendete Literatur ist abhängig vom gewählten Thema.						