Modulhandbuch

Chemistry - Master's Programme

im Wintersemester 2021/2022

erstellt am 28/03/24

che400 - Advanced Organic Chemistry 3
che411 - Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces 5
che414 - Research Laboratory Course in Physical Chemistry 7
che420 - Advanced Inorganic Laboratory 9
che430 - Advanced Organic Laboratory 11
che440 - Advanced Inorganic Chemistry 12
che450 - Modern Spectroscopic and Diffractometric Methods in Inorganic Chemistry 14
che471 - Theoretical Chemistry 16
che472 - Practical course theoretical chemistry 18
che480 - Modern NMR Spectroscopic and Mass Spectrometric Methods 20
che491 - Chemical Process Engineering 21
che492 - Research Experience in Chemical Technology for advanced students 23
che501 - Heterogeneous Catalysis and Materials 25
mam - Master´s Thesis Module 27
che470 - Theoretische Chemie der Grenz- und Oberflächen 28

Mastermodule

che400 - Advanced Organic Chemistry

Module label	Advanced Organic Chemistry
Modulkürzel	che400
Credit points	9.0 KP
Workload	270 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Christoffers, Jens (module responsibility) • Doye, Sven (Module counselling) • Christoffers, Jens (Module counselling) • Hilt, Gerhard (Module counselling) • Hilt, Gerhard (Prüfungsberechtigt) • Christoffers, Jens (Prüfungsberechtigt) • Doye, Sven (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Den Studierenden werden in diesem Modul weiterführende und moderne Aspekte der Organischen Chemie unter Berücksichtigung der von Ihnen gewählten Schwerpunkte vermittelt. • Die Studierenden haben nach erfolgreichem Abschluss des Moduls ihr Basiswissen der Organischen Chemie stark erweitert.
Module contents	• Auf der Basis der im BSc-Studium grundlegend vermittelten Kenntnisse wählen die Studierenden entsprechend ihrer Schwerpunktwahl geeignete Fortgeschrittenenvorlesungen der Organischen Chemie aus, in denen weiterführende theoretische Grundlagen für Forschungsarbeiten in der Organischen Chemie diskutiert werden. • Die Studierenden wählen drei Vorlesungen aus der Serie "Organische Chemie für Fortgeschrittene" aus, dabei können in einem Semester mehrere Vorlesungen gehört werden. • Die Vorlesungsserie "Organische Chemie für Fortgeschrittene" umfasst folgenden Themen (bis zu drei Vorlesungen in einem Semester gemäß der Ankündigungen der jeweiligen Dozenten): ◦ "Stereochemie Organischer Verbindungen" (Doye, im WiSe), ◦ "Chemie der Heteroaromaten" (Doye, im SoSe), ◦ "Metallorganische Reagenzien und Katalysatoren in der Organischen Synthese" (Christoffers, im WiSe) ◦ "Naturstoffe" (Christoffers, im SoSe) ◦ "Asymmetrische Synthese und Katalyse - Prinzipien und Anwendungen" (Hilt, im WiSe) ◦ "Asymmetrische Oxidationen und Reduktionen" (Hilt, im SoSe)
Literaturempfehlungen	
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1-3 Semester
Module frequency	WiSe und SoSe
Module capacity	unlimited
Reference text	

WiSe und SoSe

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• nach Vereinbarung	M

Form of instruction	Lecture
SWS	6
Frequency	SoSe und WiSe

che411 - Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces

Module label	Physical Chemistry of Surfaces and Interfaces
Modulkürzel	che411
Credit points	9.0 KP
Workload	270 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Wittstock, Gunther (module responsibility) • Al-Shamery, Katharina (module responsibility) • Wittstock, Gunther (Prüfungsberechtigt) • Al-Shamery, Katharina (Prüfungsberechtigt) • Dosche, Carsten (Module counselling) • Brand, Izabella (Module counselling) • Al-Shamery, Katharina (Module counselling) • Wittstock, Gunther (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	Students familiarize themselves with complex research-related general concepts of interfacial and surface chemistry, their application in specialized experimental techniques as well as selected examples of their technical application with an emphasis on nanoscale systems.
Module contents	Master of Science On the basis of the general knowledge from the BSc. course (chemical thermodynamics, chemical kinetics, electrochemistry, basics of spectroscopy), students select 3 advanced lectures from the catalogue of physical chemistry. According to the research focus on interfacial chemistry, this subject should be represented by a minimum of 2 lectures. PhD program Interface Science Students select 1 to 3 lectures (3 KP each) according to interest and need and attend a colloquium (30 min pass/fail) at the end of the semester. PhD students can only select lectures that have not been part of their MSc. curriculum. These lectures are: Lecture - Structure of Interfaces and their Characterization, WiSe, freitags 8:30-10:00 Uhr (Wittstock/AlShamery) Thermodynamics of interfaces and adsorption, surface tension, contact angle, wetting, control of wetting, excess quantities, adsorption isotherms, charges at interfaces, transport phenomena at interfaces, colloids, control of interfacial properties in technical processes, interfaces in the environment. atomic structure of surfaces (two-dimensional lattices, relaxation, reconstruction, notation of surfaces), vibration at surfaces, electronic structure of surfaces Experimental methods: LEED (principles of diffraction, reciprocal lattices, Brillouin zones), scanning probe techniques (real lattices, tunneling process, STM, AFM) Photoelectron spectroscopy (UPS, XPS), vibrational spectroscopy at surfaces Lecture - Solid-gas interfaces in theory and application, SoSe, montags 12:15-13:45 Uhr (Al-Shamery) Advanced treatment of solid-gas interfaces with emphasis on low-dimensional systems optical and electronic properties of low dimensional systems adsorption and microkinetics at nanostructured materials nanostructured materials in heterogeneous catalysis: modern concepts from the perspective of surface science nanostructured materials and their application in nanooptics Lecture - Integrated Chemical Systems, SoSe, dienstags 10:15-11:45 Uhr (Wittstock) Theory: concept of integrated molecular functional systems, anaolgies and differences between existing biological and technical systems Präparation: Self-assembly processes, polymer films, conducting polymers, biomimetic systems, aspects of miniaturisation and patterning Charackterisation: Advanced electrochemical characterisation methods, Microelectrochemistry Semiconductor electrochemistry Application: molecular switches, chemo and biosensors, energy storage, dye-sensitized solar cells
Literaturempfehlungen	

VL Structure of Interfaces and their Characterization (Al-Shamery, Brand)

- M. Henzler, W. Göpel, „Oberflächenphysik des Festkörpers“, Teubner.
- K. W. Kolasinski, „Surface Science“, Wiley.
- A. W. Adamson, A.P. Gast, “Physical Chemistry of surfaces”, Wiley, Weinheim.
- J. C. Vickerman, I. S. Gilmore, „Surface analysis. The principal techniques”, Wiley, Chichester.

VL Solid-gas interfaces in theory and application (Al-Shamery)

- I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet, “Concepts of Modern Catalysis and Kinetics”, Wiley-VCH.
- H.-D. Dörfler, „Grenzflächen und kolloiddisperse Systeme“, Springer, Berlin.

VL Integrated Chemical Systems (Wittstock)

- R.J. Forster, T.E. Keyes, J.G. Vos, “Interfacial Supramolecular Assemblies”
- A.J. Bard, L.R. Faulkner, “Electrochemical Methods

VL Modern Spectroscopy for Particle and Interface Analytics (Dosche)

- Demtröder, “Laserspektroskopie“, Springer.
- Lakowicz, “Principles of Fluorescence Spectroscopy”, Springer

VL Physikalische Chemie von ungewöhnlichen Reaktionsmedien (Brand)

- J. N. Israelachvili, „Intermolecular and surface forces“, Academic Press, Amsterdam.
- S. Hyde, S. Andersson, K. Larsson, Z. Blum, T. Landh, S. Lidin, B. W. Ninham, “The language of shape. The role of curvature in condensed matter: Physics, chemistry and biology”, Elsevier, Amsterdam.

Links			
Language of instruction		English	
Duration (semesters)		1-3 Semester	
Module frequency		jährlich	
Module capacity		unlimited	
Examination	Prüfungszeiten		Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung		**1 benotete Prüfungsleistung:** • 1 mündliche Prüfung von max. 45 Min. (100 %) Prüfung kann auf Deutsch oder Englisch abgelegt werden

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		6	SoSe und WiSe	84
Exercises		3	SoSe und WiSe	42
Präsenzzeit Modul insgesamt				126 h

che414 - Research Laboratory Course in Physical Chemistry

Module label	Research Laboratory Course in Physical Chemistry
Modulkürzel	che414
Credit points	15.0 KP
Workload	450 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Wittstock, Gunther (module responsibility) • Al-Shamery, Katharina (module responsibility) • Dosche, Carsten (Prüfungsberechtigt) • Brand, Izabella (Prüfungsberechtigt) • Wittstock, Gunther (Prüfungsberechtigt) • Al-Shamery, Katharina (Prüfungsberechtigt) • Al-Shamery, Katharina (Module counselling) • Wittstock, Gunther (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	Students acquire pratical skills in complex instrumental methods of Physical Chemistry and apply them for solving a scientific problem. They learn the handling as well as presentation of research results. They use original literature, scripts and hand books and operational procedures to prepare and conduct complex experiments.
Module contents	Master of Science Students select 3 method courses out of the catalogue from physical chemistry. The courses should be related to the topic and requirements of the research exercise. Exceptions are possible after consultation with the student advisors of this module (Al-Shamery, Wittstock). Each method course comprises self-study, class-room instruction, a preset experiment and data evaluation. Students present the result of own literature research in a seminar talk. Students solve a research exercise in which they extend their capabilities in a selected area beyond the method courses. PhD program Interface Science Students may select method courses for their further qualification (1-2 KP each) and attend a colloquium (30 min pass/fail) at the end of the method course. PhD students can only select method courses that have not beeen part of their MSc. curriculum. Themen der Methodenkurse Die Themen und Zeitpunkte der Methodenkurse werden semesterweise festgelegt und per Aushang und Stud.IP bekanntgemacht. Typischerweise finden die Kurse im jährlichen Zyklus statt. Bei Bedarf ist auch ein halbjähriger Rythmus möglich. Ständige Angebote scanning electrochemical microscopy (Wittstock, SoSe) x-ray photoelectron spectroscopy (Wittstock, Dosche, SoSe) impedanz spectroscopy (Dosche, SoSe) polarisation modulation infrared reflection absorption spectroscopy (Brand, SoSe) rotating ring-disk electrode (Özaslan, SoSe) transmission electron microscopy (Al-Shamery, WiSe)
Literaturempfehlungen	wird entsprechend des Themas gestellt
Links	
Languages of instruction	German, English
Duration (semesters)	2 Semester
Module frequency	halbjährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module		
	In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	2 benotete Prüfungsleistungen: 1 mündliche Prüfung von max. 45 Minuten (50 % der Modulnote), Prüfung kann auf Deutsch oder English

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
		abgelegt werden 1 Seminarvortrag 15-30 Min. (Englisch oder Deutsch) (50 % der Modulnote) 1 unbenotete Prüfungsleistung: Protokolle für drei Methodenkurse und das Praktikum

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Seminar		5	SoSe und WiSe	70
Practical training		17	SoSe und WiSe	238
Präsenzzeit Modul insgesamt				308 h

che420 - Advanced Inorganic Laboratory

Module label	Advanced Inorganic Laboratory
Modulkürzel	che420
Credit points	15.0 KP
Workload	450 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Müller, Thomas (Prüfungsberechtigt) • Albers, Lena (Prüfungsberechtigt) • Albers, Lena (Module counselling) • Müller, Thomas (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	**Kenntnisse:** • Organoelement und Organometallchemie: Syntheseprinzipien, Bindungskonzepte, Eigenschaften • Aspekte der moderne Anorganischen Chemie: Molekulare Haupt- und Nebengruppenchemie, Molekulare Katalyse, Ungewöhnliche Moleküle, Neue Materialien **Fertigkeiten:** • Festigung experimenteller Fähigkeiten zur Entwicklung von neuen Syntheseverfahren und Katalyseprinzipien. • Erarbeitung von Fähigkeiten zur Umsetzung eigenständiger wissenschaftlicher Arbeiten in Projekten der Anorganischen Chemie. • Beherrschung von Fähigkeiten zur kritischen Auseinandersetzung mit der Originalliteratur. • Festigung der Fertigkeiten zur Planung, Durchführung und Dokumentation eigener Forschungsprojekte.
Module contents	Vermittlung von speziellen präparativen und analytischen Arbeitstechniken der Anorganischen Chemie am Beispiel der Forschungsschwerpunkte der hiesigen Anorganischen Chemie in den Bereichen Molekülchemie, Koordinationschemie, Organometallchemie, homogene Katalyse, Festkörperchemie, Funktionsmaterialien.
Literaturempfehlungen	• Huheey/Keiter/Keiter, Inorganic Chemistry, de Gruyter • Elschenbroich Organometallchemie, WILEY-VCH • Originalpublikationen SciFinder
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	halbjährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	M

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Seminar		4		56

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Practical training		18		252
Präsenzzeit Modul insgesamt				308 h

che430 - Advanced Organic Laboratory

Module label	Advanced Organic Laboratory
Modulkürzel	che430
Credit points	15.0 KP
Workload	450 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Hilt, Gerhard (module responsibility) • Christoffers, Jens (Prüfungsberechtigt) • Doye, Sven (Prüfungsberechtigt) • Hilt, Gerhard (Prüfungsberechtigt) • Christoffers, Jens (Module counselling) • Doye, Sven (Module counselling) • Hilt, Gerhard (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Den Studierenden erwerben in diesem Modul weitergehende Kenntnisse über die Reaktivität und die Charakterisierung von organischen Substanzen in Theorie und Praxis. • Die so gewonnenen Kompetenzen versetzen die Studierenden in die Lage, Forschungsaufgaben aus dem Bereich der Organischen Chemie zukünftig eigenständig zu bearbeiten.
Module contents	• Mit diesem Modul bauen die Studierenden ihr theoretisches und praktisches Basiswissen der Organischen Chemie weiter aus. • Sie lernen komplexere Reaktionsmechanismen moderner organisch-chemischer Reaktionen kennen und erwerben weiterführende Praxiskenntnisse aus dem Bereich der Übergangsmetallkatalyse und organischer Elektrochemie. • Begleitend werden die Studierenden in die Lage versetzt, auch mit empfindlichen Chemikalien unter sicherheits- und umweltrelevanten Gesichtspunkten fach- und ordnungsgemäß umzugehen. • Darüber hinaus erlangen sie grundlegende Fähigkeiten zur Präsentation wissenschaftlicher Sachverhalte in schriftlicher und mündlicher Form.
Literaturempfehlungen	• Aktuelle Publikationen der jeweiligen Arbeitsgruppe sowie neue Übersichtsartikel zu den entsprechenden Themen
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	halbjährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	M

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Seminar		4		56
Practical training		18		252
Präsenzzeit Modul insgesamt				308 h

che440 - Advanced Inorganic Chemistry

Module label	Advanced Inorganic Chemistry
Modulkürzel	che440
Credit points	9.0 KP
Workload	270 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Müller, Thomas (module responsibility) • Müller, Thomas (Prüfungsberechtigt) • van der Vlugt, Jarl Ivar (Prüfungsberechtigt) • Müller, Thomas (Module counselling) • van der Vlugt, Jarl Ivar (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	**Kenntnisse:** Organoelement und Organometallchemie: Syntheseprinzipien, Bindungskonzepte, Eigenschaften Aspekte der moderne Anorganischen Chemie: Molekulare Haupt- und Nebengruppenchemie, Molekulare Katalyse, Ungewöhnliche Moleküle, Neue Materialien **Fertigkeiten:** Verständnis und Übertragung von Syntheseverfahren und Katalyseprinzipien. Einsichten in die geometrische und elektronische Struktur von Anorganischen Molekülverbindungen und Festkörpern. Theoretische Grundlagen zum eigenständigen wissenschaftlichen Arbeiten in Projekten der Anorganischen Chemie.
Module contents	Organische Chemie der HG Elemente: Synthese und Eigenschaften, dynamische Prozesse in Molekülen, Elektronenüberschuss- und Unterschussverbindungen, analytische Methoden, Mehrfachbindungen zwischen Hauptgruppenelementen. Anwendungen in Synthese und Katalyse Materialwissenschaftliche Aspekte der Nebengruppenelementchemie: Anorganische Reaktionsmechanismen, Supramolekulare Chemie, Homogene Katalyse und Organometallchemie. in der Regel den Modul zugeordete Lehrveranstaltungen: **im Sommersemester: "**Nachhaltige Chemie & Homogene Katalyse" **im Wintersemester:** "New Trends in Inorganic Chemistry" und "Organische Chemie der Hauptgruppenelemente"
Literaturempfehlungen	• Huheey/Keiter/Keiter, Inorganic Chemistry, de Gruyter • Elschenbroich Organometallchemie, WILEY-VCH
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	2 Semester
Module frequency	halbjährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• Jederzeit nach Absprache mit den Lehrenden.	M

Form of instruction	Lecture
SWS	6

Frequency	SoSe und WiSe

che450 - Modern Spectroscopic and Diffractometric Methods in Inorganic Chemistry

Module label	Modern Spectroscopic and Diffractometric Methods in Inorganic Chemistry
Modulkürzel	che450
Credit points	6.0 KP
Workload	180 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Müller, Thomas (module responsibility) • Müller, Thomas (Prüfungsberechtigt) • Weiz, Alexander (Prüfungsberechtigt) • Albers, Lena (Prüfungsberechtigt) • Weiz, Alexander (Module counselling) • Müller, Thomas (Module counselling) • Albers, Lena (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	**Kenntnisse:** • Grundlagen der Röntgenbeugungsanalyse an Einkristallen und Pulvern Festkörper NMR Spektroskopie EPR Spektroskopie Mössbauer Spektroskopie Elektronenspektroskopische Methoden (PES, XPS, EDX, ESMA, EELS) **Fertigkeiten:** • praktische Kristallzüchtung, • Durchführung und Auswertung einer Einkristallröntgenbeugungsanalyse Auswertung und Interpretation einfacher Festkörper NMR Spektren, EPR Spektren, Mössbauer Spektren und Darstellung der Ergebnisse. • Studierende kennen nach dem Absolvieren dieses Moduls außerdem die wichtigsten modernen Verfahren der NMR Spektroskopie in flüssiger und fester Phase und sind in der Lage die prinzipielle Auswahl von geeigneten Experimenten zur Lösung eines gegebenen Problems bei der Strukturaufklärung einer Verbindung vornehmen können. • Daneben erwerben sie die Fähigkeit einfache Experimente an den Spektrometern durchzuführen.
Module contents	**Beugungsverfahren:** • Röntgen- und Neutroneneinkristall- und Pulverdiffraktometrie zum Gewinn von Strukturinformation; • Symmetrie von Molekülen und Festkörpern; • Datenauswertung und Darstellung struktureller Information mit geeigneten Computerprogrammen. **Spektroskopie:** • Physikalische Grundlagen der EPR, • Festkörper NMR, und Mössbauerspektroskopie, der Röntgenspektroskopie (XANES / EXAFS) sowie verschiedener elektronenspektroskopischer Methoden (PES, AES, EDX, ESMA, EELS). • Kristallzucht auf verschiedenen Wegen. • Durchführung und Auswertung einer Einkristallröntgenbeugungsuntersuchung • Vorstellung der bedeutendsten modernen Methoden dieses fundamental wichtigen analytischen Verfahrens und dessen Einsatz in der Strukturaufklärung komplexer Verbindungen. • Praktische Durchführung ausgewählter NMR-spektroskopischer Experimente.

Literaturempfehlungen

- Massa, Einführung in die Röntgenstrukturanalyse, Teubner
- Advanced Inorganic Chemistry, Wiley West,
- Solid State Chemistry and its Applications, Wiley,
- Hesse, Meier, Zeeh, Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie, Thieme Verlag;
- H. Günther NMR Spectroscopy 3rd Edition, Wiley
- VCH, J. Keeler Understanding NMR Spectroscopy, Wiley,
- J. W. Akitt, B. E. Mann NMR and Chemistry Chapman Hall,
- Weitere Literatur wird in der Vorlesung angegeben

Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	jährlich SoSe
Module capacity	unlimited (Das Modul findet im Sommersemester statt.)

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module		M

- In der vorlesungsfreien Zeit im Sommersemester entsprechend separater Ankündigung

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		2	SoSe	28
Practical training		4	SoSe	28
Seminar		2	SoSe	28
Präsenzzeit Modul insgesamt				84 h

che471 - Theoretical Chemistry

Module label	Theoretical Chemistry
Modulkürzel	che471
Credit points	6.0 KP
Workload	180 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Klüner, Thorsten (module responsibility) • Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Die Studierenden erlernen durch Vertiefung ihrer Kenntnisse in der Quantenchemie und der Quantendynamik die theoretischen Grundlagen zur Behandlung stationärer und explizit zeitabhängiger Phänomene der Molekülchemie sowie der Grenz- und Oberflächenchemie. • Das Modul vermittelt den Studierenden die Fähigkeit, eigenständig Probleme der Theoretischen Chemie zu bearbeiten und bereitet auf die wissenschaftliche Untersuchung aktueller theoretisch-chemischer Fragestellungen vor.
Module contents	• Theorie der elektronischen Struktur von Molekülen und Grenz- und Oberflächen, • molekulare Schrödingergleichung, • Hartree-Fock-Näherung, • Dichtefunktionaltheorie, • Einführung in Methoden zur Erfassung der Elektronenkorrelation Molekulare Reaktionsdynamik. • Die Studierenden erlernen moderne Methoden der Theorie der elektronischen Struktur, insbesondere Hartree-Fock und Methoden zur Erfassung der Elektronenkorrelation (Coupled Cluster, Konfigurationswechselwirkung, Moeller-Plesset Störungstheorie) und zur Beschreibung elektronisch angeregter Zustände (CASSCF und CASPT-2). • Moderne linear skalierende Ansätze und spezielle Kenntnisse der Verarbeitung von Zweielektronenintegralen werden vermittelt. • Weiterhin werden Prinzipien der molekularen Reaktionsdynamik mit einem Schwerpunkt auf Methoden zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung vertieft. • Wellenpaketdynamische Methoden werden unter Berücksichtigung quantendissipativer Effekte explizit diskutiert und in Übungen vermittelt.
Literaturempfehlungen	• A. Szabo, N.S. Ostlund "Modern Quantum Chemistry" • F. Jensen "Introduction to Computational Chemistry"
Links	
Languages of instruction	German, English
Duration (semesters)	2 Semester
Module frequency	jährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	M

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		4	SoSe und WiSe	56
Exercises		2	SoSe und WiSe	28
Präsenzzeit Modul insgesamt				84 h

che472 - Practical course theoretical chemistry

Module label	Practical course theoretical chemistry
Modulkürzel	che472
Credit points	15.0 KP
Workload	450 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Klüner, Thorsten (module responsibility) • Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt) • Röhse, Robert (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Selbstständiges Arbeiten mit aktueller englischsprachiger wissenschaftlicher Literatur, • Lernen des Haltens eines wissenschaftlichen Vortrags, • Erarbeitung einer komplexen theoretischen Aufgabenstellung im Rahmen der Forschungsschwerpunkte der Theoretischen Chemie in Oldenburg, wobei insbesondere modulübergreifendes Wissen einzusetzen bzw. zu rekapitulieren ist. • Es wird die Befähigung zur Nutzung von komplexer wissenschaftlicher Infrastruktur (Großrechner) für Abschlussarbeiten erworben.
Module contents	• Mit diesem Modul bauen die Studierenden ihre praktischen Fertigkeiten in der Theoretischen Chemie weiter aus. • Sie lernen komplexe Fragestellungen durch den kombinierten Einsatz mathematischer und numerischer Methoden zu lösen. • Darüber hinaus erlangen sie grundlegende Fähigkeiten zur Präsentation wissenschaftlicher Sachverhalte in schriftlicher und mündlicher Form. • Die Blockkurse befähigen die Studierenden zur effizienten Entwicklung und Anwendung theoretisch-chemischer Software. • Die Studierenden erlernen, diese Programmpakete zur Lösung ihrer Forschungsaufgaben unter Verwendung von Hochleistungsrechnern einzusetzen. Die in jährlichem Turnus angebotene Blockkurse beinhalten: • Theoretikum I (z.B. Effiziente numerische Implementierung von Hartree-Fock) • Theoretikum II (z.B. Effiziente numerische Implementierung von Elektronenkorrelationsverfahren) • Dynamikum (z.B. Numerische Wellenpaketpropagation in der Quantendynamik) **Die Belegung dieses Moduls schließt die Belegung des Moduls che414 "Forschungspraktikum Physikalische Chemie" aus.**
Literaturempfehlungen	• Aktuelle, wissenschaftliche Artikel aus Science, Nature, Acc. Chem Res., Chem. Rev., Journal of Chemical Physics, Theort. Chem. Acc. Lehrbücher und Skripte für die Blockkurse
Links	
Languages of instruction	German, English
Duration (semesters)	2 Semester
Module frequency	jährlich
Module capacity	unlimited

Reference text

Die Belegung dieses Moduls schließt die Belegung des Moduls che414 "Forschungspraktikum Physikalische Chemie" aus.

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	G

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Seminar		2	WiSe	28
Practical training (2 verpflichtende Blockpraktika)		18	SoSe und WiSe	252
Präsenzzeit Modul insgesamt				280 h

che480 - Modern NMR Spectroscopic and Mass Spectrometric Methods

Module label	Modern NMR Spectroscopic and Mass Spectrometric Methods
Modulkürzel	che480
Credit points	6.0 KP
Workload	180 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Christoffers, Jens (module responsibility) • Christoffers, Jens (Prüfungsberechtigt) • Christoffers, Jens (Module counselling)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Studierende kennen nach dem Absolvieren dieses Moduls die wichtigsten modernen Verfahren dieser Techniken und sind in der Lage die prinzipielle Auswahl von geeigneten Experimenten zur Lösung eines gegebenen Problems bei der Strukturaufklärung einer Verbindung vornehmen können. • Daneben erwerben sie die die Fähigkeit einfache Experimente an den Spektrometern durchzuführen.
Module contents	• Vorstellung der bedeutendsten modernen Verfahren dieser fundamental wichtigen analytischen Verfahren und deren Einsatz in der Strukturaufklärung komplexer Verbindungen. • Praktische Durchführung ausgewählter NMR-spektroskopischer und massenspektrometrischer Experimente.
Literaturempfehlungen	Hesse, Meier, Zeeh, Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie, Thieme Verlag
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	jährlich WiSe
Module capacity	10 Praktikumsplätze sind vorhanden
Reference text	Das Modul findet ausschließlich im WiSe statt

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit im Wintersemester entsprechend separater Ankündigung	M

Form of instruction	Seminar und Praktikum
SWS	8
Frequency	WiSe

che491 - Chemical Process Engineering

Module label	Chemical Process Engineering
Modulkürzel	che491
Credit points	6.0 KP
Workload	180 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Wark, Michael (module responsibility) • Wark, Michael (Module counselling) • Brehm, Axel (Prüfungsberechtigt) • Wark, Michael (Prüfungsberechtigt) • Rößner, Frank (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Aufbauend auf dem Modul Technische Chemie des von chemieorientierten Instituten angebotenen BSc-Studiums werden Grundlagen der Verfahrenstechnik vermittelt, die unter Berücksichtigung der Komplexität von industriellen Chemieanlagen mit wichtigen Aspekten vertraut machen. • Die Studierenden erlernen die Fähigkeit, naturwissenschaftlich basierte Vorgehensweisen mit denen der Ingenieurdisziplinen zu verknüpfen und schaffen somit eine Grundlage zur teamorientierten Zusammenarbeit im späteren Berufsfeld.
Module contents	• In der Verfahrenstechnik werden die Grundlagen der chemischen Produktionsverfahren vermittelt, die neben der chemischen Reaktionstechnik und der verfahrensbeschreibenden Prozesskunde, die technische Realisierbarkeit und die wirtschaftliche, umweltgerechte sowie ressourcenschonende Konzeption von Chemieanlagen entscheidend beeinflussen. • Sie erhalten Einblick in die Bedeutung von Wärme- und Stofftransport auf die chemische Reaktionsgeschwindigkeit. • Außerdem werden die Grundlagen für die Berechnung der Dimensionierung von chemischen Reaktoren vermittelt. • Die Grundoperationen beschreiben die Verfahrensschritte, die dem eigentlichen Reaktor vor- und nachgeschaltet sind. • Dazu zählen insbesondere die thermischen Trennverfahren, wie die Rektifikation, die Extraktion, die Absorption, die Kristallisation, die Adsorption, Membrantrennverfahren sowie die mechanischen Verfahren wie Rühren, Fördern von Gasen und Flüssigkeiten, Zerkleinern, Zerstäuben, Filtration und die Behandlung von Abwasser- und Abgasströmen bzw. die Vermeidung und Verminderung dieser sowie die Erarbeitung von Umweltstrategien.
Literaturempfehlungen	• M. Baerns, A. Behr, A. Brehm, J. Gmehling, K.O. Hinrichsen, H. Hofmann, U. Onken, R. Palkovits, A. Renken: "Technische Chemie" (2. Auflage), Wiley-VCH, Weinheim 2013 • Weitere Literatur wird in der Veranstaltung bekannt gegeben.
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	jährlich WiSe
Module capacity	unlimited
Reference text	Vorlesungsunterlagen über StudIP

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	M

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		4	WiSe	56
Exercises		1	WiSe	14
Präsenzzeit Modul insgesamt				70 h

che492 - Research Experience in Chemical Technology for advanced students

Module label	Research Experience in Chemical Technology for advanced students
Modulkürzel	che492
Credit points	15.0 KP
Workload	450 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Wark, Michael (module responsibility) • Wark, Michael (Module counselling) • Rarey, Jürgen (Module counselling) • Wark, Michael (Prüfungsberechtigt) • Rarey, Jürgen (Prüfungsberechtigt) • Rößner, Frank (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Selbstständiges Arbeiten mit aktueller englischsprachiger wissenschaftlicher Literatur, • Bearbeitung einer komplexen experimentellen Aufgabenstellung mit offenem Ausgang im Rahmen der Forschungsschwerpunkte der in Oldenburg ansässigen Arbeitsgruppen unter Nutzung unterschiedlicher Synthese- und Messmethoden, wobei insbesondere modulübergreifendes Wissen einzusetzen bzw. zu rekapitulieren ist. • Erlernen der Präsentation eines wissenschaftlichen Vortrags. • Im Hinblick auf eine spätere Masterarbeit ist es auch Ziel des Moduls, Studierende an die Planung, Durchführung und Dokumentation eigener Forschungsprojekte heranzuführen.
Module contents	• Mit diesem Modul bauen die Studierenden ihre Fertigkeiten zu Fragestellungen der Technischen Chemie aus. Für komplexe technisch-chemische Aufgabenstellungen aus den Forschungsschwerpunkten der Gruppen der Technischen Chemie werden durch den kombinierten Einsatz von Materialsynthese und instrumentellen Methoden, oder auch den Einsatz von chemisch-verfahrenstechnischen Simulationen Lösungen gesucht. • Darüber hinaus erlangen sie grundlegende Fähigkeiten zur Präsentation wissenschaftlicher Sachverhalte in schriftlicher und mündlicher Form. • Es wird entweder ein experimentell-orientiertes (Start jederzeit möglich) oder ein auf chemisch-prozesstechnische Simulationen ausgelegtes Forschungspraktikum (zumeist Juli-September) durchgeführt. • Es werden in die Forschungsgebiete einführende praktische Aufgabenstellungen zu aktuellen Themen der Heterogenen Katalyse, Reaktortechnik, Technischen Chemie solarer Anwendungen (Photokatalyse, Solarzellen), Chemie erneuerbarer Energien (u.a. Brennstoffzellen), Bioenergie, Verfahrenstechnik und Prozesssimulation angeboten. • Die Durchführung der Aufgabe wird möglichst unter intensiver Betreuung eines Doktoranden oder einer Doktorandin der Arbeitskreise durchgeführt. • Innerhalb des experimentell-orientierten Forschungspraktikum enthalten die Aufgabenstellungen jeweils einen Materialsyntheseteil (z.B. Sol-Gel-Synthese), einen Teil der Festkörpercharakterisierung (unter Erlernen neuer Methoden wie der diffusen Reflexionsspektroskopie, der Pulver-Röntgendiffraktometrie oder der Gassorption) und einen anwendungsorientierten Teil (z.B. photokatalytische Messungen oder Analyse von Ionenleitung über Impedanzspektroskopie, Gaschromatographie in der heterogenen Katalyse). • Bei einer Aufgabenstellung im Gebiet „Chemische Prozesssimulation“ liegt nach einer Einführung zum Umgang mit einem Prozesssimulator (z.B. Aspen Plus) und dem Erlernen grundlegender Programmierkenntnisse und numerischer Lösungsverfahren für chemisch-technische Fragestellungen der Schwerpunkt auf der exemplarischen Bearbeitung einer aktuellen Aufgabenstellung zur Verfahrensentwicklung (z.B. energiesparende Trennverfahren (Rektifikation, Extraktion), Meerwasser-Entsalzung) im Bereich der chemischen Verfahrenstechnik.

Literaturempfehlungen

- Wird in der Veranstaltung (bei der Absprache der Themen) bekannt gegeben.
- U.a. aktuelle wissenschaftliche Beiträge aus den wichtigsten Zeitschriften der Chemie (Schwerpunkt: Materialchemie und Physikalisch-technische Chemie) und der chemischen Verfahrenstechnik, z.B. Nature Materials, Chemistry of Materials, Journal of Materials Chemistry, Journal of Catalysis, Advanced Functional Materials, Advanced Chemical Engineering, ….

Links	
Languages of instruction	German, English
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	fortlaufend
Module capacity	4-15 (**Kapazität/Teilnahmezahl:** • Bis zu 10 Studiernede bei experimentell orientieren Themen bzw. • bis zu 15 STudierende bei Themen der chemisch-technische Simulationen **Anmeldeformalitäten:** Anmeldung bei den Leitern der AGs der Technischen Chemie)
Reference text	Materialien über StudIP Infos über Veranstaltungzeit und -ort: SEM: Aktuelle Fragen der technischen Chemie SEM: Bearbeitung aktueller Forschungsthemen der Technischen Chemie, PR: Technisch-chemisches Forschungspraktikum in den Forschungs-laboratorien der Arbeitsgruppen, Lösung einer komplexen Aufgaben aus den verschiedenen Teilgebieten der Technischen Chemie Modul wird besucht im 1.-3. Semester. Bei Wahl der Technischen Chemie als Schwerpunktfach sollten die Module „Verfahrenstechnik“ und „Heterogene Katalyse und Werkstoffkunde“ ebenfalls belegt werden.

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	• In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung	G

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		4	WiSe	56
Exercises		2	WiSe	28
Practical training		15	SoSe und WiSe	210
Präsenzzeit Modul insgesamt				294 h

che501 - Heterogeneous Catalysis and Materials

Module label	Heterogeneous Catalysis and Materials
Modulkürzel	che501
Credit points	9.0 KP
Workload	270 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Mastermodule
Zuständige Personen	• Wark, Michael (module responsibility) • Wark, Michael (Module counselling) • Wark, Michael (Prüfungsberechtigt) • Rößner, Frank (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	• Die Studierenden erlernen die Grundlagen der heterogenen Katalyse, wobei der Bogen von den Elementarschritten bis zu Prinzipien der Formgebung gespannt wird, und erhalten eine Einführung in die Chemie wichtiger Werkstoffe (u.a. Polymere, Keramiken, Metall/Stahl). • Ziel der Veranstaltungen ist die Vermittlung von Denkweisen, die auf unterschiedlichen Hierarchien der Katalysator- und Werkstoffentwicklung erforderlich sind. • Dabei wird ein besonderes Augenmerk auf die Besonderheiten der interdisziplinären Kommunikation gelegt, die sich aus den unterschiedlichen Denkansätzen von Wissenschaftlern und Ingenieuren ergibt. • Damit sollen die Studierenden auf ihren späteren Einsatz in projektbasierten, interdisziplinären Gruppen vorbereitet werden. • Weitere Schwerpunkte sind die Vermittlung von Aspekten der Katalyse unter dem Gesichtspunkt der ökonomischen Rahmenbedingungen und das Erlernen von chemischen Denkweisen in einem alltäglichen betriebswirtschaftlichen Umfeld. • In den Praktika sollen die Studierenden den Umgang mit komplexen Anlagen wie on-line Kopplungen und Charakterisierungsmethoden vertraut gemacht werden.
Module contents	**<u>Das Modul besteht aus den Vorlesungen</u>** 1. Heterogene Katalyse 2. Nachhaltigkeit in der chemischen Industrie 3. Werkstoffkunde sowie **<u>einem Praktikum</u>** und einer kostenpflichtigen **<u>Exkursion.</u>** **<u>Vorlesungen:</u>** • Aufbauend auf die Kenntnisse der Adsorptiv-Adsorbens-Wechselwirkungen werden die Unterschiede zur homogenen Katalyse herausgearbeitet. • Der Ansatz des limitierenden Schrittes wird in mehreren Fallbeispielen vorgestellt, wobei die Auswirkungen für das finale Design des Katalysators im Mittelpunkt stehen. • Besonderes Augenmerk wird auf Probleme der Maßstabsübertragung vom Labor auf größere Einheiten gelegt. • An ausgewählten Beispielen wird die Klassifizierung von heterogenen Katalysatoren diskutiert. • Am Beispiel von kristallinen Alumosilikaten werden Synthese, Modifizierung und Anwendung von Katalysatoren dargestellt. • Verschiedene thermische (TPD, TPR) und spektroskopische Charakterisierungsmethoden (FTIR, UV-Vis, MAS-NMR) für heterogene Systeme werden ebenfalls vorgestellt. • An Hand von Fallbeispielen werden moderne industrielle Verfahren vorgestellt, wobei die betriebswirtschaftliche Betrachtung und deren Konsequenzen für die Verfahrensgestaltung im Vordergrund stehen. • In einer gesonderten Vorlesung werden Grundkenntnisse der Werkstoffkunde sowohl im Hinblick auf Verfahren zur Werkstoff-Testung (z.B. mechanische Eigenschaften) als auch (im Schwerpunkt) auf die chemische Zusammensetzung und daraus resultierenden Eigenschaften von Polymeren, Keramiken, Gläser, Stähle und Legierungen vermittelt.

Im Praktikum:

- wird die Herstellung von Katalysatoren erlernt.
- Es werden Einblicke in technisch-relevante Katalyse- und Photokatalyse-Verfahren gegeben.

Es sind mind. 4 Versuche zu absolvieren, u.a. können derzeit gewählt werden:

- Synthese eines zeolithischen Katalysators (MFI-Typ), Kalzinierung, Belegung und Trocknung des Katalysators;
- Charakterisierung von Adsorbentien mittels einer on-line Adsorptionsapparatur;
- Austestung des Katalysators mit Hilfe einer Hydroisomerisierung;
- Untersuchungen zur makrokinetischen Beeinflussung mittels einer chemischen Reaktion
  Photokatalytischer Schadstoffabbau

Die Exkursion:

- erfolgt zu einem namhaften Katalysatorhersteller.
- Den Studierenden werden dabei Kenntnisse über die beim Herstellungsprozess verwendeten technischen Anlagen vermittelt.
- Ferner erhalten Sie Einblick in die Wechselbeziehung Chemie – Ökonomie – umweltpolitische Rahmenbedingung.

Literaturempfehlungen	

- I. Chorkendorff, J.W. Niemantsverdriet, „Concepts of Modern Catalysis and Kinetics“, Wiley-VCH 2003
- J.M. Thomas, W.J. Thomas, „Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis“, Wiley-VCH, 1997
- W. Göpel, Chr. Ziegler, „Einführung in die Materialwissenschaften“, B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, 1996.
- Weitere Literatur wird in der Veranstaltung bekannt gegeben

Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	jährlich WiSe
Module capacity	unlimited
Reference text	

- Vorlesungsunterlagen über StudIP

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module		M

- In der vorlesungsfreien Zeit entsprechend separater Ankündigung

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		4	WiSe	56
Practical training		2	WiSe	28
Study trip		1	WiSe	14
Präsenzzeit Modul insgesamt				98 h

Abschlussmodul

mam - Master´s Thesis Module

Module label	Master´s Thesis Module
Modulkürzel	mam
Credit points	30.0 KP
Workload	900 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Abschlussmodul
Zuständige Personen	• Al-Shamery, Katharina (Prüfungsberechtigt) • Beckhaus, Rüdiger (Prüfungsberechtigt) • Özaslan, Mehtap (Prüfungsberechtigt) • Brand, Izabella (Prüfungsberechtigt) • Wilkes, Heinz (Prüfungsberechtigt) • Brehm, Axel (Prüfungsberechtigt) • Müller, Thomas (Prüfungsberechtigt) • Brumsack, Hans-Jürgen (Prüfungsberechtigt) • Albers, Lena (Prüfungsberechtigt) • Rößner, Frank (Prüfungsberechtigt) • Christoffers, Jens (Prüfungsberechtigt) • Dittmar, Thorsten (Prüfungsberechtigt) • Dosche, Carsten (Prüfungsberechtigt) • Doye, Sven (Prüfungsberechtigt) • Hilt, Gerhard (Prüfungsberechtigt) • Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt) • Martens, Jürgen (Prüfungsberechtigt) • Rarey, Jürgen (Prüfungsberechtigt) • Rullkötter, Jürgen (Prüfungsberechtigt) • Schnetger, Bernhard (Prüfungsberechtigt) • Wark, Michael (Prüfungsberechtigt) • Wittstock, Gunther (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	
Skills to be acquired in this module	Die Studierenden wählen für die Anfertigung ihrer Masterarbeit einen Themenschwerpunkt in Absprache mit einem Betreuer aus. Die Masterarbeit basiert auf eigenen experimentellen Laborarbeiten oder theoretischen Berechnungen. Nach erfolgreichen Abschluss des Moduls besitzen die Studierenden die Fähigkeit innerhalb einer vorgegebenen Frist ein Problem aus dem Bereich der Chemie nach wissenschaftlichen Methoden zu bearbeiten.
Module contents	Anfertigung der Masterarbeit Aktive Mitarbeit im Seminar der Arbeitsgruppe, in der die Master-Arbeit geschrieben wird.
Literaturempfehlungen	Literatur zum Einstieg in das Thema wird vom jeweiligen Betreuer bereitgestellt. Im weiteren Verlauf wird eine eigenständige Literaturrecherche erwartet.
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	halbjährlich
Module capacity	unlimited

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module		G
Form of instruction	Seminar	
Frequency		

Frühere Module

che470 - Theoretische Chemie der Grenz- und Oberflächen

Module label	Theoretische Chemie der Grenz- und Oberflächen
Modulkürzel	che470
Credit points	6.0 KP
Workload	180 h
Verwendbarkeit des Moduls	• Master's programme Chemistry (Master) > Frühere Module
Zuständige Personen	• Klüner, Thorsten (Prüfungsberechtigt)
Prerequisites	Erfolgreiche Teilnahme am Modul „Grundlagen der Oberflächen und Grenzflächenchemie“
Skills to be acquired in this module	Die Studierenden erlernen durch Vertiefung ihrer Kenntnisse in der Quantenchemie und der Moleku-lar¬dynamik die theoretischen Grundlagen zur Be-handlung stationärer und explizit zeitabhängiger Phänomene der Molekülchemie sowie der Grenz- und Oberflächen¬chemie. Das Modul vermittelt den Studierenden die Fähigkeit, eigenständig Probleme der Theoretischen Chemie zu bearbeiten und berei-tet auf die wissen¬schaftliche Untersuchung aktueller theoretisch-chemischer Fragestellungen vor.
Module contents	Die Studierenden erlernen moderne Methoden der Theorie der elektronischen Struktur, insbesondere Methoden zur Erfassung der Elektronenkorrelation (Coupled Cluster, Konfigurationswechselwirkung, Moeller-Plesset Störungstheorie) und zur Beschrei-bung elektronisch angeregter Zustände (CASSCF und CASPT-2). Moderne linear skalierende Ansätze und spezielle Kenntnisse der Verarbeitung von Zwei-elektronenintegralen werden vermittelt. Weiterhin werden Prinzipien der molekularen Reaktionsdyna-mik vertieft mit einem Schwerpunkt auf Methoden zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Wellenpaketdynamische Methoden werden unter Berücksichtigung quanten-dissipativer Effekte explizit diskutiert und in Übungen vertieft. Im Praktikum erlernen die Studierenden die Anwen-dung der erworbenen Kenntnisse durch Verwendung quantenchemischer Standardprogramme zur Lösung ausgesuchter Probleme der Molekülchemie und der Grenzflächen- und Oberflächenchemie. Sie führen eigenständige Programmieraufgaben zur Quanten-dynamik einfacher Systeme durch.
Literaturempfehlungen	A. Szabo, N.S. Ostlund „Modern Quantum Chemistry“ F. Jensen „Introduction to Computational Chemistry“
Links	
Language of instruction	German
Duration (semesters)	1 Semester
Module frequency	jährlich
Module capacity	unlimited
Reference text	6 KP / SoSe: V 471, Ü 472, PR 473; WiSe: Ex 474 / 2. FS / Klüner

Examination	Prüfungszeiten	Type of examination
Final exam of module	In den Semesterferien entsprechend separater Ankündigung	Mündliche Prüfung von maximal 45 Minuten Praktikumsprotokolle (unbenotet)

Form of instruction	Comment	SWS	Frequency	Workload of compulsory attendance
Lecture		2		28
Exercises		1		14
Practical training		2		28
Study trip		1		14
Präsenzzeit Modul insgesamt				84 h