

MASTERSTUDIENGANG MATERIAL- und NANOCHEMIE

Modulhandbuch

Naturwissenschaftliche Fakultät
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

STAND 04.08.2014

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|---------------|
| Master-Studiengang Material- und Nanochemie – Pflichtmodule | 3 |
| Anorganische Materialchemie..... | 4 |
| Physikalische Materialchemie..... | 9 |
| Computational Chemistry | 16 |
| Grundlagen der Materialanalytik..... | 18 |
| Aktuelle Aspekte der Materialchemie | 22 |
| Molekulare und Polymere Materialien..... | 24 |
| Grenzflächen, Kolloide und Nanoteilchen | 28 |
| Materialorientierte Forschungspraktika 1 und 2..... | 33 |
| Entwicklung eines Forschungsprojektes..... | 35 |
| Master-Arbeit..... | 37 |
| Master-Studiengang Material- und Nanochemie – Wahlmodule..... | 39 |
| Fortgeschrittene Materialanalytik..... | 40 |
| Katalyse | 42 |
| Oberflächenchemie | 46 |
| Biomaterialien und Biomineralisation | 48 |
| Röntgenmethoden..... | 52 |
| Wirkstoffmechanismen und -darstellung | 56 |
| Stereokontrolle und Biogenese von Naturstoffen..... | 60 |
| Metallorganische Chemie | 64 |
| Polymere Materialien | 66 |
| Quantenchemie | 71 |
| Molekülspektroskopie..... | 74 |
| Koordinationsverbindungen | 77 |

Master-Studiengang Material- und Nanochemie – Pflichtmodule

Anorganische Materialchemie

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Anorganische Materialchemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Anorganische Chemie von Materialien und Nanosystemen (3 SWS) 14002 Ü Anorganische Chemie von Materialien und Nanosystemen (1 SWS) 14202 V Festkörpersynthese und Materialpräparation (3 SWS) P Festkörpersynthese und Materialpräparation (3 SWS) | |
| Semester | WS / 1. Semester und SS / 2. Semester | |
| Verantwortlicher | Behrens | |
| Dozenten | Behrens, Schneider | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 140 h Präsenzzeit 220 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 12 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter, erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Übungsblätter, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

| Vorlesung und Übungen: Anorganische Chemie von Materialien und Nanosystemen |
|--|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen Die Studenten verfügen über das Wissen von Strukturen, Eigenschaften und Anwendungen von Materialien und Nanosystemen sowie die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen. Insbesondere stehen dabei anorganische Festkörper im Mittelpunkt sowie wichtige Materialien.</p> <p>2.) Methodenkompetenzen Die Studierenden sind in der Lage wichtige Grundoperationen der Strukturbeschreibung und</p> |

–analyse einzusetzen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können erkennen, dass sich die Eigenschaften ausgedehnter Systeme (Bulk-Materialien) stark von nanoskaligen Materialien unterscheiden können. Außerdem sind sie in der Lage selbstständig Beziehungen zwischen der Struktur und den Eigenschaften einer Verbindung zu erfassen.

Inhalte

- Herleitung des Bändermodells auf der Basis von chemischen Konzepten (LCAO-Ansatz zur Erzeugung von Kristallorbitalen)
- Herleitung von grundlegenden elektronischen und spektroskopischen Eigenschaften (elektrische Leitfähigkeit, Art der Bandlücke etc.) von Materialien
 - Erläuterung der Eigenschaften im Laufe der Vorlesung und der Übungen
- Erläuterung von Defektstrukturen verschiedener anorganischer Materialien und ihren Einfluss auf deren Chemie
- Struktur-Eigenschaftsbeziehungen unter Berücksichtigung der nanoskaligen Analoga wichtiger Arten anorganischer Festkörper wie
 - Metalle
 - kovalente Verbindungen
 - Halbleiter
 - ionische Verbindungen
 - intermetallische Verbindungen
 - Silicate
- Besprechung insbesondere der mechanischen, elektrischen, dielektrischen und magnetischen Eigenschaften

Literatur

[1] Smart & Moore: Einführung in die Festkörperchemie

[2] U. Müller: Anorganische Strukturchemie

[3] A.R. West: Grundlagen der Festkörperchemie.

Weitere empfehlenswerte Literatur wird in der Vorlesung vorgestellt.

Vorlesung: Festkörpersynthese und Materialpräparation

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden kennen verschiedene Syntheseverfahren für die Herstellung von anorganischen Festkörpern und für die Präparation anorganischer Materialien.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten können die Vor- und Nachteile von verschiedenen Syntheseverfahren aufzeigen und beurteilen, welches für die gegebene Aufgabenstellung am geeignetsten ist.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage entsprechend ihres entwickelten Gefühls für die Wahl der geeignetsten Methode anorganische Festkörper herzustellen und anorganische Materialien zu präparieren.

Inhalte

1. Teil: Klassische Synthesemethoden

- Reaktionen im festen Zustand
 - fest-fest-Reaktionen
 - selbstfortschreitende Reaktionen
 - Mechanosynthese
 - druckinduzierte Umwandlungen
- Flüssig-fest-Reaktionen
 - Einkristallzuchtverfahren
 - Präzipitation
 - Kristallisation
 - Solvothermalsynthesen
 - Sol-Gel-Verfahren
 - Glasbildung und Glaskristallisation
- Gas-fest-Reaktionen
 - Transportreaktionen
 - Gasphasenabscheidung
 - Sputtering
 - Aerosol-Verfahren

2. Teil: Methoden mit erhöhter Kontrolle über den Reaktionsausgang

- Strukturdirigierende Synthesen
 - Precursor-Verfahren
 - Einsatz molekularer und aggregierter Strukturdirektoren
 - Biomineralisation
- Strukturlimitierte Synthesen
 - Ionenaustausch
 - Intercalation
 - Insertion

Literatur

[1] Smart & Moore, Einführung in die Festkörperchemie

[2] U. Schubert, N. Hüsing, Synthesis of Inorganic Materials, Wiley VCH, 2004.

Weitere empfehlenswerte Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt

Praktikum: Festkörpersynthese und Materialpräparation**Qualifikationsziele****1.) Fachkompetenzen**

Die Studenten kennen spezielle Verfahren zur Synthese und Präparation von Materialien und Nanomaterialien.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage zu erkennen wie verschiedene Reaktionsparameter den Ausgang einer Reaktion beeinflussen können und wie das gewählte Verfahren die Morphologie (Nanoteilchen, Pulver, Einkristall) bestimmt.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können die erlernten speziellen Verfahren zur Synthese und Präparation von Materialien praktisch im Labor anwenden und durchführen. Außerdem sind sie in der Lage ihre Erkenntnisse bezüglich des Einflusses verschiedener Reaktionsparameter auf den Ausgang einer Reaktion oder des gewählten Verfahrens auf die Morphologie schriftlich und verbal darzustellen.

Inhalte

Die Versuche behandeln verschiedene Substanzklassen. Im Allgemeinen werden Reihenversuche unter Variation einer oder mehrerer Reaktionsparameter durchgeführt, um so den Einfluss unterschiedlicher Reaktionsführungen auf die Produkteigenschaften in systematischer Weise aufzuklären.

Dabei dienen die folgenden Syntheseverfahren als Beispiele:

- Reaktionen im festen Zustand
 - Diese finden ihre Anwendung beispielsweise zur Bildung von Mischoxiden, wobei die Durchführung unter Variation des Versuchsvorgehens (Mörsern und Mischen, Ko-Fällung von Precursoren) und der Reaktionstemperatur erfolgt. Anschließend werden die Produkte mit der Röntgen-Pulverbeugung untersucht.
- Hydrothermalsynthesen
 - Diese finden ihre Anwendung bei zeolithartigen Substanzen, wobei die Durchführung unter Variation des Versuchsvorgehens (Art und Konzentration der Edukte, unterschiedliche Mineralisatorsysteme, unterschiedliche Synthesysteme) erfolgt. Anschließend werden die Produkte mit der Rasterelektronenmikroskopie und der Röntgen-Pulverbeugung untersucht.
 - Zudem werden mesostrukturierte Materialien unter hydrothermalen Bedingungen hergestellt, wobei verschiedene Parameter wie Art und Konzentration der Edukte variiert werden und ihr Einfluss auf die Produktbildung mit Hilfe der Röntgen-Pulverbeugung und von Sorptionsmessungen untersucht werden.

- In-situ-Untersuchungen zur Strukturbildung können durch Röntgenbeugung mit dem Theta-Theta-Diffraktometer erfolgen.
- Dip-coating
 - Das Dip-coating ist ein wichtiges Verfahren zur Herstellung dünner Filme. Anhand einfacher Modellsysteme werden die Einflüsse unterschiedlicher charakteristischer Parameter (Zusammensetzung der Eduktlösung, Luftfeuchtigkeit, Ziehgeschwindigkeit, Nachbehandlung) überprüft.

Der Einfluss von amphiphilen Molekülen und Polymeren auf die Kristallmorphologie wird anhand chemisch einfacher Beispiele (Calciumcarbonat, Bariumchromat) untersucht. Die Kristalle werden mittels Rasterelektronenmikroskopie und der Röntgen-Pulverbeugung untersucht.

Literatur

U. Schubert, N. Hüsing, Synthesis of Inorganic Materials, Wiley VCH, 2004.

Versuchsbeschreibungen und weiterführende Literaturstellen werden bei den einzelnen Versuchen angegeben.

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Physikalische Materialchemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V1 Physikalische Chemie von Festkörpern und Nanosystemen (3 SWS) 14090 Ü Physikalische Chemie von Festkörpern und Nanosystemen (1 SWS) 14290 V2 Funktionsprinzipien ausgewählter Festkörpermaterialien (3 SWS) 14897 P Funktionsprinzipien ausgewählter Festkörpermaterialien (3 SWS) | |
| Semester | WS / 1. Semester | |
| Verantwortlicher | Bigall | |
| Dozenten | V1: Feldhoff V2: Bigall, Bahnemann, Caro, Klüppel, Dorfs, | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 140 h Präsenzzeit 220 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 12 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter, erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Übungsblätter, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung 1 / Übungen: Physikalische Chemie von Festkörpern und Nanosystemen

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studenten verfügen über Wissen in dem Bereich der physikalischen bzw. physikalisch-chemischen Grundlagen zum Verständnis der besonderen Eigenschaften von Festkörper-Systemen als komplexes Funktionsmaterial. Dazu gehören das Bändermodell, die Thermodynamik realer Festkörper unter Berücksichtigung nanostrukturierter Systeme, die Elektrochemie mit Hinblick auf Elektroden und die Festkörperelektrochemie mit Festionenleitern als Elektrolytsysteme.

Die Studierenden kennen zudem die Grundlagen für die Anwendung nanostukturierter Festkörper

und für die Anordnungen von Nanoteilchen in Bauteilen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage jene Unterschiede zu erkennen, die auftreten, wenn die Abmessungen der Festkörper-Teilchen in den Bereich weniger Nanometer hinein absinken.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können das erlernte Wissen verbal und schriftlich darstellen, sowie es in Diskussionen beispielsweise über die Kinetik oder Dynamik in Festkörpern einbringen.

Inhalte

- Gitteraufbau von Festkörpern
 - Bravais-Gitter
 - Symmetrien
 - Quasikristalle
- Strukturaufklärung mit Beugungsmethoden
 - mit Röntgenstrahlung, Elektronen, Neutronen
 - reziproker Raum
 - Beugungsbedingung (Laue, Bragg, Brillouin) Symmetrien
 - Atom(formfaktor) und Strukturfaktor
 - Brillouin-Zonen
 - Patterson-Funktion
- Dynamik von Atomen in Festkörpern und Nanosystemen
 - harmonische Näherung der Atomdynamik
 - Quantisierung der Gitterschwingungen
 - Phononendispersion
 - Einstein- und Debye-Modell für die Wärmekapazität
- Dynamik von Elektronen in Festkörpern und Nanosystemen
 - freies Elektronengas zum Verständnis der Glühemission
 - quasifreie Elektronen im Festkörper
 - Bändermodell für kristalline und amorphe Festkörper (Isolatoren, Halbleiter, Leiter)
 - p-n-Übergang
- Thermodynamik realer Festkörper
 - unter besonderer Berücksichtigung nanostrukturierter Systeme auf der Basis der Grenzflächenthermodynamik
 - als Basis zur Diskussion von Fragen der Kinetik und Dynamik in Festkörpern
- Spezielle Nanosysteme
 - anhand aktueller Beispiele der Fachliteratur (z.B. nanostrukturierte Thermoelektrika)

Literatur

[1] Ch. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik

[2] H. Ibach, H. Lüth, Festkörperphysik [3] M.N. Rudden, J. Wilson, Elementare Festkörperphysik und Halbleiterelektronik
Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Vorlesung 2: Funktionsprinzipien ausgewählter Festkörpermaterien**Qualifikationsziele****1.) Fachkompetenzen**

Die Studenten kennen die Funktionsprinzipien und die physikalisch-chemischen Eigenschaften von Festkörpermaterien mit großer aktueller Bedeutung in der Anwendung.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden können die aktuellen Optimierungsmöglichkeiten für ausgewählte Materialsysteme erkennen. Außerdem sind sie in der Lage den funktionsorientierten Aufbau komplexer Materialien zu verstehen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können das erlernte Wissen verbal und schriftlich darstellen und zur Lösung vorliegender Aufgabenstellungen oder Problemstellungen anwenden. Zudem sind sie imstande aktuelle Themen aus dem Bereich der Funktionsprinzipien ausgewählter Festkörpermaterien zu diskutieren.

Inhalte

Behandlung einer Reihe von Materialien und Materialklassen

- im Vordergrund stehen die auftretenden Struktur-Eigenschafts-Beziehungen
- basierend auf der gedanklichen Kette: vom Molekül zum Material zum Bauelement
- die folgenden Materialien werden exemplarisch betrachtet und nach der gedanklichen Kette dargestellt
 - Hartwerkstoffe
 - Metalle
 - magnetische Materialien
 - Katalysatoren
 - ein photokatalytisches System
 - Membranmaterialien
 - Systeme zur Sensorik
 - Materialien von Brennstoffzellen
 - Materialien von Solarzellen
 - Materialien von Batterien
 - Halbleiterbauelemente
 - photonische Materialien
 - Metallnanopartikel
 - Halbleiternanopartikel
- Im folgenden werden die einzelnen Themengebiete der verschiedenen Materialien genauer dargestellt:
 - Hartwerkstoffe
 - Behandlung von Fragen der chemischen Stabilität und der Nanostruktur der Hartwerkstoffe in Abhängigkeit von der Geometrie als Kompaktmaterial oder Dünnschicht

- Es werden dabei die speziellen mechanischen Eigenschaften von nanostrukturierten Werkstoffen betrachtet.
- Metalle
 - Erklärung der elektrischen Eigenschaften, der Wärmeleitung und Deformierbarkeit bei gleichzeitig mechanischer Stabilität ausgehend vom Modell der metallischen Bindung
- Magnetische Materialien
 - Einführung in den Bereich von Festkörpern mit interessanten magnetischen Eigenschaften und ihren typischen Anwendungen sowie ihren Struktur-Eigenschaft-Korrelationen
 - Erklärung des Auftretens von Ferro-, Ferri- und Antiferromagnetismus makroskopischer Materialien sowie deren Charakterisierungsmethoden
 - Einführung in den Superparamagnetismus kolloidaler Materialien
- Katalysatoren
 - Herstellung und Stabilisierung nanoskaliger Oxid- und Metallpartikel auf üblichen Trägern wie Oxiden oder Kohlenstoff
 - Der Schwerpunkt liegt einerseits auf der Nanostruktur der Kontaktfläche zwischen Katalysator und Katalysator-Träger und andererseits auf dem hierarchischen Strukturaufbau.
- Photokatalytisches System
 - Behandlung des komplexen Zusammenwirkens von Superhydrophilie und Photo-Oxidation in Halbleiterkatalysatoren mit Nano-Design beim Schadstoffabbau in gasförmiger und flüssiger Phase
 - Behandlung von „smarten“ Nanomaterialien mit maßgeschneiderten Oberflächeneigenschaften für die Anwendung in der Photokatalyse
- Membranmaterialien
 - Poröse und dichte Materialien und ihre Strukturierung zu Membranen für die Gastrennung
 - Behandlung grundlegender Fragen über molekulare Materialien im Rahmen der Lehreinheit „Molekulare Elektronik“
 - Vorstellung ausgewählter Synthesen
 - Aufzeigung von Wegen der Selbstorganisation von Molekülen zu „molekularen Drähten“ und „Schaltern“
 - Diskussion von Aspekten der Kontaktierung und Vermessung
- Systeme zur Sensorik
 - Erläuterung moderner Systeme zur Gassensorik
 - Zentrale Aspekte sind die elektrochemischen Grundlagen der Nachweise bzw. der Ionenleitung und die Darstellung der notwendigen komplexen modularen Aufbauten
- Materialien von Brennstoffzellen
 - Erläuterung der Aufbau- und Wirkprinzipien der aktuell angewendeten

Brennstoffzell-Systeme

- Das Hauptaugenmerk liegt auf dem funktionellen Ineinandergreifen der verschiedenen Komponenten.
- Materialien von Solarzellen
 - Vorstellung und Vergleich der verschiedenen Aufbau- und Funktionsstrategien moderner photovoltaischer Zellen (Si-Solarzellen, Halbleiter-Dünnschichtzellen, Farbstoff-sensibilisierte Zellen und rein organische Solarzellen)
- Materialien von Batterien
 - Vorstellung moderner Batteriesysteme mit Schwerpunkt auf Li⁺-Ionen-Speicher
 - Der Schwerpunkt liegt auf den Struktur-Eigenschafts-Beziehungen.
- Halbleiterbauelemente
 - Erklärung des Aufbaus und der Wirkungsweise von Dioden und Feldeffekt-Transistoren
 - Im Mittelpunkt stehen die Elektrochemie von Halbleiter-Metall- und Halbleiter-Halbleiter-Kontakten.
- Photonische Materialien
 - Vorstellung der Prinzipien moderner optisch aktiver Werkstoffe für die Entwicklung von Mikro-Lasern, für die optische Datenspeicherung und für die optische Leiterbahntechnik
- Metallnanopartikel
 - Eine Einführung in wichtige Synthesemethoden kolloidaler Metallnanopartikel wird gegeben
 - Erklärung physikalischer Effekte wie der Ausbildung lokalisierter Oberflächenplasmonresonanzen
- Halbleiternanopartikel
 - Physikalische Eigenschaften von Halbleiternanopartikeln (Quantenpunkten): Bändermodell, effektive Masse von Ladungsträgern, Größenquantisierungseffekt
 - Schwerpunktbildung auf optischen Eigenschaften: Lichtabsorption, Fluoreszenz, Ladungsträger"trapping" etc.
 - Kurze Vorstellung moderner Syntheseverfahren: Form- und Zusammensetzungskontrolle von kolloidalen Halbleiternanopartikeln

Literatur

- [1] W. Göpel, C. Ziegler, Einführung in die Materialwissenschaften: Physikalisch-Chemische Grundlagen und Anwendungen, Teubner, 1996
 - [2] C.N.R. Rao, A. Müller, A.K. Cheetham, The Chemistry of Nanomaterials, Wiley-VCH, 2004
 - [3] R. Memming, D. Vanmaekelbergh, Semiconductor Electrochemistry, Wiley-VCH, 2001
 - [4] M.N. Rudden, J. Wilson, Elementare Festkörperphysik und Halbleiterelektronik, Spektrum Verlag, 1995
 - [5] J. Jahns, Photonik, Oldenbourg Verlag, 2001
- Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum: Funktionsprinzipien ausgewählter Festkörpermateriale

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Durch die Versuche im Praktikum wird eine Vertiefung des Vorlesungsstoffes erreicht, sodass die Studenten unter anderem aufbauend auf der Vorlesung über das Wissen wichtiger Eigenschaften von Festkörpermateriale anhand von ausgewählten Beispielen im Praktikum verfügen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die chemische Synthese der Materiale mit der physikalisch-chemischen Bestimmung ihrer Eigenschaften zu kombinieren, um die vorliegenden Versuche zu bearbeiten.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können die Versuche mit Hilfe ihres erlernten Wissens korrekt durchführen sowie die Messergebnisse exakt darstellen. Außerdem sind sie in der Lage die erhaltenen Ergebnisse kritisch zu betrachten und zu diskutieren, um letztendlich ein Urteil für den jeweiligen Versuch zu erhalten.

Inhalte

Verknüpfung von synthetischem Arbeiten mit der Probencharakterisierung und der Bestimmung wichtiger physikalisch-chemischer Parameter

Es werden Versuche mit den folgenden zentralen Themen behandelt:

- Mechanochemie
 - Behandlung einer äquimolaren Mischung aus CaF_2 und SrF_2 in einer Planetenkugelmühle
 - Interpretation des Röntgenpulverdiffraktogramms
 - Bestimmung der mittleren Kristallgröße nach der Scherrer-Gleichung
- Photokatalytischer Schadstoffabbau
 - Herstellung von TiO_2 - und TiO_2/CdS Dünnschichtfilmen für den photokatalytischen Abbau eines organischen Farbstoffs (Methylenblau) als Testmolekül
 - Einbringung des CdS über elektrochemische Abscheidung in die porösen TiO_2 -Filme (Tauchziehverfahren in Anwesenheit eines Porogens)
 - Abbau des gelösten Farbstoffs in Lösung erfolgt mittels UV-VIS-spektroskopischer Analyse
- Kolloidale Metallnanopartikel
 - Herstellung kolloidaler Gold-, Silbernanopartikel sowie Platinnanopartikel verschiedener Größen
 - Extinktionsspektrometrische Charakterisierung der Nanopartikel
 - Diskussion der Größenabhängigkeit der energetischen Lage des lokalisierten Oberflächenplasmons

- Halbleiternanopartikel
 - Synthese von kolloidalen CdSe Nanokristallen (Quantenpunkten) im Größenbereich von 2 bis 6 nm.
 - Verfolgung des Partikelwachstums mittels UV/Vis-Absorptionsspektroskopie (Brus-Gleichung, Größenquantisierungseffekt)
 - Fluoreszenzspektroskopie an allen Proben
 - Charakterisierung des Endprodukts mittels Pulverröntgendiffraktometrie (Scherrer Gleichung) und mittels Transmissionselektronenmikroskopie.

- Protonen-leitende Membranen für Brennstoffzellen
 - Sulfonsäure-Funktionalisierung von mesoporösem Si-MCM-41 als Additiv zur protonenleitender Membran in Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
 - Vergleich verschiedener Arten der Oberflächenfunktionalisierung in Bezug auf die erzielbare Ionenaustauschkapazität und die Messung der resultierenden Protonenleitung (impedanzspektroskopische Bestimmung)

- Mikrowellenheizen in der Synthese poröser Materialien
 - Synthese einer metallorganischen Gerüststruktur (MOF) des Typs ZIF-8 durch Mikrowellenheizen in Teflonautoklaven und anschließender Aufarbeitung des Produktes

- Charakterisierung eines kristallinen Pulvers durch Röntgenpulverdiffraktometrie und Elektronenmikroskopie
 - Vertiefte Analyse der im Rahmen des Versuches „Synthese des MOF ZIF-8“ hergestellten Produkte durch Röntgenpulverdiffraktometrie am Bruker D8 und am Jeol Rasterelektronenmikroskop (Bildaufnahme plus Elementanalytik durch EDXS)

Literatur

Die Versuchsbeschreibungen und weiterführenden Literaturstellen werden bei den einzelnen Versuchen angegeben.

Computational Chemistry

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Computational Chemistry | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Computational Chemistry (1 SWS) 18514 Ü Computational Chemistry (2 SWS) | |
| Semester | WS / 1. Semester | |
| Verantwortlicher | Frank | |
| Dozenten | Frank, Schneider | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 42 h Präsenzzeit 78 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte / | 4 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Grundkenntnisse in EDV Fortgeschrittene Kenntnisse in Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsaufgaben | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (1 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafel, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Arbeitsblätter | |

Vorlesung: Computational Chemistry

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über grundlegende Kenntnisse im Umgang mit Programmen, die auf den Molecular-Graphics-, Energieminimierungs-, Geometrieoptimierungs-, Monte-Carlo- und Moleküldynamik-Methoden basierend operieren.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in Lage die erlernten Programme auf Probleme anzuwenden, die in den studiengangsspezifischen Modulen auftreten.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können die erlernten Programme benutzen und die dadurch erhaltenen Ergebnisse im Hinblick auf die verwendeten Modellierungsmethoden der Programme beurteilen bzw. kritisch betrachten.

Inhalte

- Visualisierung von Strukturen organischer Moleküle und anorganischer Festkörperstrukturen
- Grundlagen der Modellierungsmethoden
 - Kraftfelder
 - Minimierungsalgorithmen
 - Monte-Carlo-Algorithmen
 - Moleküldynamik-Algorithmen
- Molecular-Modelling-Programme
- Prinzipien quantenchemischer Methoden
 - Semiempirik
 - *ab-initio*-Verfahren
 - DFT-Methoden

Literatur

Literatur wird in der LV bekannt gegeben

Grundlagen der Materialanalytik

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-------------|
| Modulbezeichnung | Grundlagen der Materialanalytik | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Grundlagen der Materialanalytik (2 SWS) 18512 P Grundlagen der Materialanalytik (3 SWS) 18513 | |
| Semester | WS / 1. Semester | |
| Verantwortlicher | Dorfs | |
| Dozenten | Dorfs, Giese, Lacayo, Caro, Wiebcke, Feldhoff, | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Analytik M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 70 h 110 h Selbststudium | Präsenzzeit |
| Leistungspunkte | 6 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer und physikalischer Chemie, Grundkenntnisse in instrumentellen Analyseverfahren | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Powerpoint-Präsentation, teilweise Skript zur Vorlesung, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung Grundlagen der Materialanalytik

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden besitzen Vorstellungen über die wichtigsten Festkörpermateriale und kennen die Methoden zur Charakterisierung von Festkörpern, zu denen die anorganischen Bulk-Materialien, organische Polymere, Nanoteilchen und auch die Komposite gehören. Sie erwerben Grundlagen über die hochauflösende analytische Elektronenmikroskopie am Beispiel von mikro- und nanostrukturierten Feststoffen (EDXS, SAED, TEM, SEM). Sie eignen sich die Verfahren und Modelle zur Ermittlung der Porosität von Festkörpern durch die Adsorption von Gasen, speziell der Quecksilberintrusionsporosimetrie, an und kennen die Anwendungsmöglichkeiten der Röntgenkleinwinkelstreuung (SAXS) sowie die speziellen Röntgenbeugungsmethoden an Pulverproben, aus ihnen sie über die Reflexverbreiterung auf die Teilchengröße schließen können (Scherrer-Formel). Sie beherrschen die Grundprinzipien thermoanalytischer Verfahren zur Materialcharakterisierung an Beispielen von Elastomeren und Polymeren hinsichtlich ihrer Identifizierung, Mikrostrukturaufklärung und quantitativer Analyse. Sie kennen die

Gelpermeationschromatographie sowie die Besonderheiten der optischen Spektroskopie an Oberflächen und bei der Charakterisierung von Festkörpern.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage, unter Verwendung ihrer Fachkenntnisse die Materialeigenschaften von Festkörpermaterialien zu beurteilen und darauf basierend die einzelnen analytischen Verfahren anzuwenden. Sie kennen Beispiele zur Bestimmung der Größe und Form von dispergierten Nanoteilchen und zur Analyse der Struktur und Porosität amorpher Gele. Sie können im Falle der UV/Vis-Spektroskopie die diffuse Reflexion und den Kubelka-Munk-Formalismus zur Vermessung von Festkörpern zur Separierung der zu ermittelnden Absorption von unerwünschten Lichtstreuungen anwenden. Sie sind in der Lage Molmassen und Molmassenverteilungen von Polymeren zu charakterisieren und die Vor- und Nachteile der unterschiedlichen analytischen Methoden gegeneinander abzuwägen und zu bewerten.

3.) Handlungskompetenzen

Sie sind in der Lage materialanalytische Sachverhalte verbal und schriftlich darzustellen. Sie können Literaturrecherchen zum Thema durchführen und zur Lösung und Erklärung von Problemstellungen anwenden.

Inhalte

- Grundlagen der Elektronenmikroskopie (Geräteaufbau, Kontrastentstehung, Abbildungsmodi und Abbildungsfehler)
 - energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDXS)
 - Elektronenbeugung (SAED)
 - Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)
 - Rasterelektronenmikroskopie (SEM)
 - Röntgenbeugung an Pulverproben (Debye-Scherrer-Verfahren)
 - Röntgenkleinwinkelstreuverfahren (SAXS)
- Verfahren und Modelle zur Bestimmung der Porosität, der inneren Oberflächen und der Porengrößenverteilungen
- Quecksilberintrusionsporosimetrie
- Thermoanalytische Verfahren zur Materialcharakterisierung
 - Thermogravimetrie (TGA)
 - Dynamischen Differenzkalorimetrie (DDK bzw. DSC)
 - Thermomechanischen Analyse (TMA)
- Gelpermeationschromatographie (GPC)
- Optische Spektroskopie
 - Raman-Spektroskopie
 - IR-Spektroskopie (u.a. Messmethoden in ATR-Anordnung)
 - UV/Vis-Spektroskopie (diffuse Reflexion, Kubelka-Munk-Formalismus)

Literatur

[1] W. F. Hemminger, H. K. Cammenga: Methoden der thermischen Analyse, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989, S. 57, [2] Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie, Bd. 5, Analysen und Messverfahren, Verlag Chemie

Weinheim, [3] D. W. Brazier, Applications of Thermal Analytical Procedures in study of Elastomers and Elastomer Systems, Rubber Chemistry and Technology, Vol. 53, S. 487 ff., [4] H. Kuzmany: Festkörperspektroskopie, Springer Verlag, 1990 [5] J.I. Goldstein, Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis, 3. ed., Kluwer Acad./Plenum Publ., New York, 2003, [6] L. Reimer, Scanning electron microscopy : physics of image formation and microanalysis, 2. ed., Springer, Berlin (1998). Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum Grundlagen der Materialanalytik

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben praktische Kenntnisse zu den Möglichkeiten und Grenzen der Charakterisierung von unterschiedlichen Festkörpern und Festkörper-Komposit-Materialien mit ausgewählten analytischen Verfahren.

2.) Methodenkompetenzen

Sie beherrschen die experimentellen Methoden um die gesetzten Ziele zu erreichen und können verschiedene Methoden zur Lösung der Aufgabenstellungen kreativ nutzen und ihre erworbenen Kenntnisse darauf anwenden. Sie kennen die Verfahren zur Charakterisierung der Struktur von Festkörpern (REM, UV-Vis-Messungen), zur Identifizierung von Polymermatrizen und Additiven in Elastomeren durch FT-IR spektroskopische Verfahren, zur Charakterisierung der Molmasse und Molmassenverteilung von Polymeren durch GPC sowie thermoanalytische Verfahren zur Bestimmung von Eigenschaften, wie das Schmelzverhalten.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage materialanalytische Sachverhalte schriftlich sowie verbal darzustellen. Sie können zur Realisierung von Aufgabenstellungen im Praktikum essentielle Angaben herausarbeiten, strukturieren und infolge dessen Schlussfolgerungen ziehen. Sie sind in der Lage über ihre Ergebnisse entsprechend wissenschaftlicher Gepflogenheiten zu diskutieren und mit Hilfe wissenschaftlicher Literatur zu erklären und zu begreifen. Sie führen die Praktikumsversuche unter den Arbeitsschutzvorschriften sorgfältig, gefahrlos und sicher im vorgegebenen Zeitrahmen durch und zeigen Verantwortungsbewusstsein in Hinsicht auf die Anwendung von Messgeräten und den Chemikalien.

Inhalte

Versuche zu(r)

- Adsorption von Gasen an porösen Festkörpern
- Rasterelektronenmikroskopie zur Ermittlung der Mikrostruktur synthetischer Materialien
- optischen Methoden zur Festkörpercharakterisierung (Messung von UV/Vis-Spektren in diffuser Reflexion an Pulvern und Dünnschichten von Halbleitern und Kompositproben)
- thermoanalytischen Verfahren wie DSC und TGA
 - Quantitative Elastomeranalyse
 - Thermische Stabilität von Polymeren
 - Glas- und Schmelzpunktsbestimmungen
 - Kristallisationsverhalten
- Identifizierung von Additiven in Elastomeren und Identifizierung von Polymermatrizes (Thermoplasten, Kautschuke) mittels FT-IR spektroskopischer Verfahren (Transmission und

ATR)

- Charakterisierung der Molmasse und Molmassenverteilung von Polymeren mittels GPC

Literatur

s.o. - empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Aktuelle Aspekte der Materialchemie

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-----------|
| Modulbezeichnung | Aktuelle Aspekte der Materialchemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | S Industrielle Materialchemie (1 SWS, als Block), S Aktuelle Ergebnisse aus der Materialchemie (1 SWS) | |
| Semester | nicht festgelegt | |
| Verantwortlicher | Behrens | |
| Dozenten | Anselmann, Behrens, Caro | |
| Sprache | Deutsch oder Englisch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 28 h Präsenzzeit 32 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 2 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer und physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Teilnahme am Blockseminar, Teilnahme an insgesamt 10 Instituts- oder GDCh-Kolloquien zur Materialchemie | |
| Prüfungsleistungen | Keine | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint- Präsentation | |

| Seminar Industrielle Materialchemie |
|--|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen Die Studierenden erlangen einen Überblick über die typischen Betriebsabläufe der industriellen Materialchemie und der Materialwissenschaften und können sich so einen Eindruck über die Anforderungen an Material- und Nanochemiker in der industriellen Chemie oder in den industriellen Materialwissenschaften schaffen und somit mögliche spätere Berufsbilder kennenlernen. Die Studierenden kennen weitere Aspekte, die über die Wissenschaft hinausgehen und eng miteinander verknüpft sind, sodass sie sich mit alternativen passenden Berufsbildern (Patentanwalt, Selbstständige) vertraut machen können.</p> <p>2.) Methodenkompetenzen Die Studierenden verstehen die neuen Entwicklungen in der Materialchemie bzw. in den Materialwissenschaften. Sie können beim Bearbeiten wichtiger industrieller Betriebsabläufe ihr erworbenes Wissen unter Beachtung der Kosten-Nutzen-Bilanzen, der ökologischen Aspekte und der Marktanalysen anwenden und Zusammenhänge zu anderen Bereichen der Chemie erkennen und herstellen.</p> <p>3.) Handlungskompetenzen</p> |

Sie verstehen die Anforderungen an die industriellen Syntheseprozesse unter Berücksichtigung der Wirtschaftlichkeit, dem Risikopotential und der Gesetzgebung sowie der Herkunft, des Herstellungsaufwandes und dem Einsatz wichtiger Festkörpermaterien.

Inhalte

Die Studierenden sollen typische Betriebsabläufe der industriellen Materialchemie und Materialwissenschaften kennen lernen und insbesondere auch mit über die Wissenschaft hinaus gehenden Aspekten vertraut gemacht werden (Projekt- und Innovationsmanagement, Marktanalysen, Kosten-Nutzen-Bilanzen, ökologische Aspekte).

Die Blockveranstaltung wird vorzugsweise von einem Referenten abgehalten, der nicht im Hochschulbereich tätig ist.

Literatur

Wird in der Veranstaltung bekannt gegeben

Seminar Aktuelle Aspekte der Chemie

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden eignen sich im Rahmen der Lehrveranstaltung durch Vorträge, die insbesondere von auswärtigen Referenten präsentiert werden, die aktuellen Forschungsergebnisse an. Sie erwerben Kenntnisse über den Zusammenhang von Werkstoffeigenschaften, der Organisation molekularer und polymerer Materialien und deren Anwendungen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die aktuellen Forschungsergebnisse einzustufen und sich mit den verschiedenen Vortragsstilen vertraut zu machen sowie Zusammenhänge zwischen Werkstoffeigenschaften und den neuesten Syntheseverfahren unter wirtschaftlichen und ökonomischen Aspekten herstellen zu können.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können Sachverhalte der Materialchemie in prägnanter Form schriftlich sowie verbal darstellen und Möglichkeiten zur Beteiligung an gemeinsamen Diskussionen bei der Präsentation von wissenschaftlichen Beiträgen nutzen.

Inhalte

Vielfältige aktuelle Forschungsergebnisse aus der Material- und Nanochemie und ihrem Umfeld. Die Vorträge werden im Rahmen etablierter wissenschaftlicher Kolloquien gehalten und sind öffentlich zugänglich.

Literatur

Wird gegebenenfalls in der Veranstaltung bekannt gegeben

Molekulare und Polymere Materialien

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Molekulare und Polymere Materialien | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Molekulare und Polymere Materialien (3 SWS) 15030 P Molekulare und Polymere Materialien (4 SWS) 15031 | |
| Semester | SS / 2. Semester | |
| Verantwortlicher | Butenschön | |
| Dozenten | Butenschön, Giese, Renz | |
| Sprache | Deutsch oder Englisch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Anorganischer, Organischer und Physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Besuch der Vorlesung, erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (120 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Beamer-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung Molekulare und Polymere Materialien

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben in den Bereichen des molekularen Magnetismus, der magnetischen Materialien, der organischen Polymere sowie der molekularen Elektronik einen Überblick über die Möglichkeiten der Synthese von molekularen und polymeren Materialien sowie über die physikalisch-chemischen Eigenschaften bestimmter Stoffklassen mit ihrem Anwendungspotenzial als Materialien und Nanomaterialien. Dazu kennen sie die essentiellen physikochemischen Begriffe im Zusammenhang mit Polymeren und die in der Industrie aktuell eingesetzten Synthesewege.

2.) Methodenkompetenzen

Sie verstehen den Aufbau, die Synthese und die supramolekulare Organisation von anwendungstechnisch relevanten organischen Polymeren. Sie sind in der Lage Zusammenhänge zwischen der Struktur, den Eigenschaften und Anwendungen von Festkörpern zu erkennen und

können beurteilen, in welcher Weise die supramolekulare Organisation der Mehrphasensysteme von der Funktionalität der Nanopartikel sowie von dem chemischen Aufbau von Polymeren abhängt.

3.) Handlungskompetenzen

Sie verstehen den Einsatz und den Herstellungsaufwand molekularer und polymerer Materialien. Sie sind in der Lage Literaturrecherchen durchzuführen, ihre Kenntnisse durch Erschließen wissenschaftlicher Texte zu vertiefen und problemorientierte Diskussionen zu führen.

Inhalte

Es wird eine Reihe von Materialien und Materialklassen behandelt, wobei die auftretenden Struktur-Eigenschafts-Beziehungen im Vordergrund stehen sollen:

- Molekularer Magnetismus
 - Eigenschaften und Anwendungen molekularer Materialien
 - Schwerpunkt in koordinationschemischen Verbindungen
 - Molekulare Schalter, Molekulare Maschinen
- Magnetische Materialien
 - Eigenschaften und typische Anwendungen
 - Supraleitung
- Organische Polymere
 - Struktur-Eigenschafts-Beziehungen über
 - Reaktionsmechanismen
 - Syntheseverfahren von Polymeren mit definierten Strukturen
 - Taktizität
 - Molmassenverteilung
 - supramolekulare Organisation der Polymere in Kristalliten
 - Bildung polymere Gläser
 - Beziehungen zwischen Morphologie und den mechanischen, optischen und elektrischen Eigenschaften der Werkstoffe
 - Synthese entropieelastischer Werkstoffe über die chemische oder physikalische Vernetzung von Kautschuken und Dispersionen von euklidischen bzw. fraktalen Nanopartikeln
 - typische Beispiele für die zu behandelnden Polymere: Kunststoffe, Kautschuke und Fasern
- Molekulare Elektronik
 - Im Rahmen der Lehrinheit „Molekulare Elektronik“ werden grundlegende Fragen der dafür relevanten molekularen Materialien behandelt.
 - ausgewählte Synthesen
 - Wege der Selbstorganisation von Molekülen zu „molekularen Drähten“ und „Schaltern“
 - Aspekte der Kontaktierung und Vermessung
-
-

Literatur

W. Göpel, C. Ziegler, Einführung in die Materialwissenschaften: Physikalisch-Chemische Grundlagen und

Anwendungen, Teubner, 1996. - C.N.R. Rao, A. Müller, A.K. Cheetham, The Chemistry of Nanomaterials, Wiley-VCH, 2004. - R. Memming, D. Vanmaekelbergh, Semiconductor Electrochemistry, Wiley-VCH, 2001. - E. V. Anslyn, D. A. Dougherty, Modern Physical Organic Chemistry, Univ. Science Books, Sausalito 2006, Kap. 13, 17. Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum Molekulare und Polymere Materialien

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erlangen im Praktikum Grundkenntnisse über wichtige Syntheseverfahren und Eigenschaften von Festkörpermateriale an ausgewählten Beispielen. Sie kennen die Synthese und die magnetischen Eigenschaften von Supraleitern, die Herstellung von Schaltern und deren möglichen Schaltzustände, die Polymerisationsarten und -verfahren, die Kautschukherstellung und Möglichkeiten zur Modifizierung der Eigenschaften.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage Versuche durchzuführen, in denen in den meisten Fällen eine Kombination aus chemischer Synthese der Materialien mit der physikalisch-chemischen Bestimmung der Eigenschaften gefordert wird. Die Studierenden kennen die wichtigsten Polymerisationsarten, zu denen mitunter die radikalische und ionische Polymerisation sowie die Polykondensation und -addition gehören. Sie beherrschen die technisch wichtigen Polymerisationsverfahren zur Herstellung von Polymeren und die Verfahren zur gezielten Modifikation bzw. Variation von Werkstoffeigenschaften.

3.) Handlungskompetenzen

Sie sind dazu befähigt Messergebnisse kritisch zu beurteilen und korrekt darzustellen. Dazu können sie effiziente Recherchen von Literaturdaten durchführen, englischsprachige wissenschaftliche Publikationen auswerten und Inhalte verständlich darstellen. Sie sind in der Lage neue und aktuelle Entwicklungen in ausgewählten Materialklassen über einen Seminarvortrag zu berichten und Möglichkeiten zur kritischen, aber fairen wissenschaftlichen Diskussion zu nutzen. Sie führen die Versuche eigenständig in einem vorgegebenen Zeitfenster nach Arbeitsschutzvorschriften sorgfältig, sicher und gefahrlos durch und zeigen Gefahrenbewusstsein im Umgang mit Chemikalien und Laborgeräten. Durch die Versuche vertiefen und festigen sie den Vorlesungsstoff.

Inhalte

- Herstellung und Charakterisierung magnetischer Eigenschaften moderner Hochtemperatur-Supraleiter auf Basis von Mischoxiden
- Herstellung molekularer Schalter (Spin-Crossover-Verbindungen) auf Basis von Koordinationsverbindungen und Charakterisierung der verschiedenen Schaltzustände (High- und Low-Spin)
- Synthese verschiedener Polymere über typische Polymerisationsmechanismen (u.a. radikalische Polymerisation bzw. Polykondensation) und grundlegender Polymerisationsverfahren (z.B. Emulsion in Masse, Aufarbeitung der Polymere, analytische Charakterisierung)
 - Molmassenbestimmung (Membranosmose, Viskosimetrie, Gelpermeationschromatographie)
 - Thermoanalytische Verfahren (DSC, TGA) zur Bestimmung von

- Glasübergangspunkte
- thermische Stabilität
- Kristallisations- bzw. Schmelzpunkte
 - molekularer Aufbau und Struktur von Polymeren (FT-IR Spektroskopie)
- Herstellung einer Kautschukmischung, Vulkansiaton und Charakterisierung ausgewählter mechanischer Eigenschaften (z.B. Bruchverhalten, Dehnungsverhalten)
- organische und metallorganische Synthesen zur Herstellung von Bausteinen für molekulare Drähte einschließlich vollständiger Charakterisierung der Reaktionsprodukte
-

Literatur

Die Versuchsbeschreibungen und weiterführenden Literaturstellen werden bei den einzelnen Versuchen angegeben.

Grenzflächen, Kolloide und Nanoteilchen

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-----------|
| Modulbezeichnung | Grenzflächen, Kolloide und Nanoteilchen | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Physikalische Chemie von Grenzflächen (2 SWS) 15901 V Kolloide und Nanoteilchen (2 SWS) 15902 P Grenzflächen, Kolloide und Nanoteilchen (3 SWS) 15071 | |
| Semester | SS / 2. Semester | |
| Verantwortlicher | Bigall | |
| Dozenten | Becker, Caro, Bigall, Dorfs | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung: Physikalische Chemie von Grenzflächen

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über das Wissen der wichtigsten physikalisch-chemischen Eigenschaften von Grenzflächen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten erkennen Zusammenhänge zwischen den physikalisch-chemischen Eigenschaften von Grenzflächen und auftretenden Grenzflächenphänomenen, die der Stabilisierung von Clustern sowohl in der Gasphase als auch in flüssiger und fester Phase zugrunde liegen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können ihr Wissen hinsichtlich der Diskussion bedeutender Aspekte der Adsorption auf Festkörperoberflächen, der Adsorption an geladenen Grenzflächen, der Elektrokinetik und der Koagulation von Clustern anwenden.

Inhalte

- Vorstellung der Synthese und Stabilisierung von Clustern in der Gasphase und kolloidalen Lösungen
- Erläuterung von Kolloidassoziaten
- Besprechung von Phänomenen der Thermodynamik von Oberflächen, von Wechselwirkungspotentialen (van der Waals-Kräfte) und Transporteigenschaften innerhalb von Suspensionen zum Verständnis
- Diskussion bedeutender Aspekte der Adsorption auf Festkörperoberflächen, der Adsorption an geladenen Grenzflächen, der Elektrokinetik und der Koagulation von Clustern
- Vorstellung der statistischen Mechanik von Flüssigkeiten und Streuexperimenten an kolloidalen Strukturen
- Untersuchung des Einflusses von externen Feldern auf die Größe und Form kolloidaler Teilchen
- Diskussion von Begriffen wie elektrochemische Doppelschicht, Zetapotential und Rheologie

Literatur

[1] R. J. Hunter, Foundations of Colloid Science, Oxford University Press, 2004

[2] G. Brezinsky, H. Mügel, Grenzflächen und Kolloide, Spektrum Verlag, 1993, Bergmann-Schäfer, Vielteilchensysteme, Band 5, Walter de Gruyter, 1992.

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Vorlesung: Kolloide und Nanoteilchen**1.) Qualifikationsziele Fachkompetenzen**

Die Studierenden kennen die grundlegenden Prinzipien der Kolloidchemie sowie Techniken der Strukturierung von Nanoteilchen als Grundlage ihrer Handhabung.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten beherrschen Kriterien, mit denen sie beurteilen können, wann kolloidale Lösungen stabil sind.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage das erlernte Wissen verbal und schriftlich darzustellen. Außerdem können sie anhand der erlernten Kriterien entscheiden, welche chemischen oder physikalischen Methoden für ein aufzubauendes nanostrukturiertes Bauelement (beispielsweise in der Nano- bzw. Mikroelektronik) am geeignetsten anzuwenden sind.

Inhalte**Teil „Kolloide“ der Vorlesung**

- Stabilisierung kolloidaler Lösungen
- Besprechung
 - der Auswirkungen der wichtigsten statischen und elektrostatischen Wechselwirkungen auf die Stabilität und Koagulation von Teilchen anhand der DLVO-Theorie
 - der Stabilisierung durch oberflächenaktive Agenzien und die Bildung von

Mizellkolloiden

- der Erzeugung, der Stabilisierung und des Einsatzpotentials von Makro- und Mikroemulsionen
- der Anordnung von kolloidalen Partikeln zu 3-dimensionalen Strukturen anhand von Latex-Partikeln als Beispiel zum Aufbau inverser Opale
- der Anwendung inverser Opale als photonische Kristalle als kleiner Seitenaspekt
- Kinetische Betrachtung von Nukleation und Wachstum bei kolloidchemischen Synthesen nach dem LaMer Modell.

Teil „Nanopartikel“ der Vorlesung

- Behandlung von Techniken der Stabilisierung und Deposition von Nanoteilchen ausgehend von den grundlegenden Methoden der Präparation von Nanoteilchen in gasförmiger, flüssiger und fester Phase
 - Ankopplung von Nanoteilchen über elektrostatische Wechselwirkung in fluiden Phasen an entsprechend vorbehandelten Oberflächen planarer und poröser Feststoffe (unterschiedliche Zeta-Potentiale).
 - Dekoration von Feststoffoberflächen mit Nanoteilchen nach der Langmuir-Blodgett-Technik unter Ausnutzung hydrophiler/ hydrophober Wechselwirkungen
 - Kovalente Bindung von Nanoteilchen an Feststoffen in strukturierter Form über das Knüpfen chemischer Bindungen
 - Beliebige Strukturierungen von Schichten aus Nanoteilchen durch anisotropes Ätzen zusammen mit Positiv- und Negativ-Lithographietechniken
 - Betrachtung von Sonderformen der Anordnung von Nanoteilchen sowie deren Synthese und Konzentration in mizellaren Flüssigkeiten, deren in situ-Synthese und Stabilisierung in porösen Feststoffen und die Erzeugung nanokristalliner Feststoffe durch Energieeintrag betreffend
 - Besprechung der Rastertunnelmikroskopie und der Rasterkraftmikroskopie als bekannteste Vertreter einer Reihe von Rastersondentechniken, die eine große Bedeutung bei der Manipulation und Analyse von atomaren Oberflächenstrukturen besitzen
 - Behandlung von Abscheidungen aus der Gasphase (CVD, PVD) sowie laser- und plasmagestützten Spurtechniken, die unter Ausnutzung unterschiedlicher Grenzflächenenergien zur 1D- und 2D-Nano-Strukturierung von Oberflächenschichten nach Volmer-Weber eingesetzt werden können
 - Moderne kolloidchemische Syntheseverfahren zur Herstellung von metallischen, halbleitenden oder magnetischen Nanopartikeln
 - Überstrukturbildung von Nanopartikeln durch Selbstanordnung, Entropiegesteuerte Verfahren; Überstrukturbildung von nichtsphärischen Nanopartikeln

Literatur

[1] H.-D. Dörfler, Grenzflächen- und Kolloidchemie, VCH Verlag, 1994

[2] C.N.R. Rao, A. Müller, A.K. Cheetham, The Chemistry of Nanomaterials, Wiley-VCH, 2004.

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum: Grenzflächen, Kolloide und Nanoteilchen**Qualifikationsziele****1.) Fachkompetenzen**

Die Studierenden sollen im Praktikum die besonderen Eigenschaften von kolloidalen Lösungen an Beispielen kennenlernen und damit den Inhalt der Vorlesungen vertiefen. Themen, die in den Vorlesungen aus Zeitgründen nicht abgehandelt werden können, werden hier ergänzend dargestellt. Darüber hinaus werden einige gängige Methoden zur Charakterisierung von Grenzflächen, Kolloiden und Nanoteilchen vorgestellt.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden lernen eine Reihe wichtiger Verfahren kennen, die zur physikalisch-chemischen Charakterisierung von Grenzflächen und Kolloiden genutzt werden. Weiterhin werden Fähigkeiten der Probenpräparation vermittelt.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sollen dazu befähigt werden, weitgehend selbständig präparative Arbeiten im Bereich der Kolloid- und Grenzflächenchemie sowie physikalisch-chemische Messungen in diesem Bereich durchzuführen. Dabei sind insbesondere die hohen Anforderungen an die Reinheit von Substanzen und Sauberkeit des Arbeitens zu erwähnen, die sich im Rahmen dieser Thematik ergeben. Die Versuchsergebnisse werden ausgewertet und zusammen mit der zugehörigen Theorie in einem Protokoll dargestellt.

Inhalte:

- 1) **Kontaktwinkel:** Es werden selbstorganisierte Monolagen (SAM) von Thiolen auf Münzmetalloberflächen hergestellt, chemisch modifiziert und mittels Kontaktwinkelmessungen charakterisiert. Dabei werden grundlegende Konzepte der Oberflächenthermodynamik erläutert. Die Funktionsweise des Mikrokontaktdruckens mittels SAMs wird dargestellt.
- 2) **Kritische Mizellbildung:** Mittels Messungen der Grenzflächenspannung und der elektrischen Leitfähigkeit wird die Bildung von Mizellen in wässrigen Tensidlösungen verfolgt (Assoziationskolloide). Aus den Messreihen werden die kritische Mizellbildungskonzentration, sowie die freie Enthalpie, Enthalpie und Entropie der Mizellbildung ermittelt.
- 3) **Langmuir-Blodgett-Filme:** Unter Verwendung einer Filmwaage werden Druck-Flächen-Isothermen von Langmuir-Blodgett-Filmen auf Wasser aufgenommen. Die kritischen Daten der untersuchten Filme werden bestimmt und aus diesen thermodynamische Daten gewonnen. In einem weiteren Versuchsteil werden Goldelektroden mit Langmuir-Blodgett-Filmen beschichtet und anschließend cyclovoltammetrisch untersucht.
- 4) **Nanoparticle Tracking Analysis:** Die Größenverteilung von Teilchen in einer Reihe von Kolloiden bzw. Suspensionen von Nanoteilchen wird mittels „Nanoparticle Tracking

Analysis" untersucht. In diesem Zusammenhang wird auf die Theorie der Diffusion von Nanoteilchen in Lösungen (Fluktuationen, statistisch-thermodynamische Behandlung) eingegangen.

- 5) **Rasterkraftmikroskopie (AFM):** Mittels eines AFM wird die Oberflächenstruktur einer Reihe von Proben eingehend analysiert. Es werden Ätzgruben in einem LiF-Substrat hergestellt und anschließend durch AFM sichtbar gemacht. Diese Studien können dazu verwendet werden, Stufen- und Schraubenversetzungen an der Kristalloberfläche zu charakterisieren.
- 6) **Laser-Doppler-Anemometrie (Zeta-Potential):** In diesem Versuch sollen kolloidale Silikasphären in wässriger Lösung synthetisiert werden. Mittels Laser-Doppler-Anemometrie wird die Oberflächenladung und kolloidale Stabilität in Abhängigkeit vom pH-Wert bestimmt. Die Beobachtungen sollen im Hinblick auf die zugrundeliegende Theorie interpretiert werden.

Literatur:

R. J. Hunter, *Foundations of Colloid Science*, Oxford University Press 2001.

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird in den Versuchsbeschreibungen angegeben.

Materialorientierte Forschungspraktika 1 und 2

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | - Materialorientiertes Forschungspraktikum | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | P Forschungspraktika in der materialorientierten Chemie (8 SWS) | |
| Semester | WS / 3. Semester | |
| Verantwortliche | Alle Dozenten des Master-Studiengangs Material- und Nanochemie | |
| Dozenten | Alle Dozenten des Master-Studiengangs Material- und Nanochemie | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 112 h Präsenzzeit 158 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 9 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Abgeschlossene Module: Anorganische Materialchemie und Physikalische Materialchemie | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Materialchemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung der notwendigen Versuche, Projektbericht | |
| Prüfungsleistung | Hausarbeit | |
| Medienform | Anleitungen zu den Laborexperimenten | |

Praktikum: Materialorientiertes Forschungspraktikum

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden kennen die Vorgehensweise bei der Bearbeitung aktueller Forschungsthemen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten beherrschen Methoden zur Recherche von Literaturdaten, können eigenständig Vorschläge zur Präparation neuartiger Materialien unterbreiten und die Beschaffung der notwendigen Chemikalien und Geräte organisieren.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage neue Synthesen durchzuführen und unbekannte Materialproben hinsichtlich ihrer strukturellen, chemischen und physikalischen Eigenschaften zu charakterisieren. Außerdem können sie eigene Forschungsergebnisse korrekt und gut nachvollziehbar darstellen, erläutern sowie im wissenschaftlichen Zusammenhang diskutieren. Dies erlernen sie im Rahmen einer Hausarbeit bzw. eines sogenannten Projektberichts.

Inhalte

Die Inhalte ergeben sich aus den aktuellen Forschungsthemen der in der Materialchemie tätigen Arbeitsgruppen. Die Aufgabenstellungen werden von einem Dozenten vorgestellt und es wird eine Strategie zur Bearbeitung der Aufgabe entwickelt. Falls nötig, werden einzusetzende Methoden, die noch unbekannt sind, erläutert. Die Durchführung der Synthesen und notwendigen Charakterisierungen erfolgt in der Regel in enger Abstimmung mit einem Diplomanden/Doktoranden aus dem Arbeitskreis des betreuenden Dozenten.

Um einen breiten aktuellen Kenntnisstand zu erlangen, sind begleitend wissenschaftliche Vorträge zu hören, die in ausgewählten Vortragsveranstaltungen (GdCh-Kolloquien, Institutskolloquien) vorgetragen werden.

Literatur

Literaturstellen, die an die zu bewältigenden Aufgaben heranzuführen, werden von den Betreuern zur Verfügung gestellt.

Entwicklung eines Forschungsprojektes

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-------------|
| Modulbezeichnung | Entwicklung eines Forschungsprojekts | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | S Entwicklung eines Forschungsprojekts (4 SWS) 15903 | |
| Semester | 2 (SS) oder 3 (WS) | |
| Verantwortliche | Alle Dozenten des Master-Studiengangs Material- und Nanochemie | |
| Dozenten | Alle Dozenten des Master-Studiengangs Material- und Nanochemie | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 56 h 64 h Selbststudium | Präsenzzeit |
| Leistungspunkte | 4 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Abgeschlossene Module: Anorganische Materialchemie und Physikalische Materialchemie | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Anorganischer und Physikalischer Chemie sowie insbesondere in Materialchemie | |
| Studienleistungen | Projektskizze, Projektplan | |
| Prüfungsleistungen | Projektarbeit | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Powerpoint-Präsentation | |

Seminar: Entwicklung eines Forschungsprojektes

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erlangen die Vorgehensweise zur Entwicklung und Beantragung eines Forschungsprojektes und erwerben die Fertigkeiten, zumeist aufbauend auf eigenen Forschungsergebnissen im Rahmen der Projektarbeit bzw. des Forschungspraktikums, Ideen für ein materialorientiertes Forschungsprojekt zu entwickeln.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage sich kritisch mit dem Forschungsprojekt auseinanderzusetzen und können unter Beachtung einiger wissenschaftlicher, rechtlicher, ethischer und ökonomischer Kriterien bei der Erarbeitung ihres Projektes die Relevanz bzw. Chancen auf die Realisierung beurteilen. Sie lernen Fragestellungen in Bezug auf ihr Forschungsprojekt von verschiedenen Seiten zu betrachten, können neben dem wissenschaftlichen Aspekt ebenfalls einen strukturierten Aufbau des Projektplans mit Kostenplänen, Meilensteinen und Alternativplänen erstellen und über einen Seminarvortrag ihr Forschungsprojekt gegenüber Vorgesetzten oder Gutachtern vorstellen und verteidigen.

3.) Handlungskompetenzen

Sie können komplexe Fragestellungen eigenständig bearbeiten und in prägnanter Form schriftlich sowie verbal darstellen. Sie sind in der Lage sich wissenschaftliche Literatur zur Erläuterung ihres Projektthemas zu erschließen sowie Recherchetechniken zur Realisierung ihres Projektes zu verwenden. Sie nutzen die Möglichkeit der gemeinsamen wissenschaftlichen Diskussion bei der Präsentation und Auswertung von Aufgabenstellungen und sind in der Lage, gestellte Anforderungen zu erarbeiten und über (Teil-)Ergebnisse zu kommunizieren. Sie erhalten somit chemische, technische und gesellschaftliche Qualifikationen, welche für zukünftige Forschungsprojekte nützlich sein werden.

Inhalte

Die Themen der zu erarbeitenden Forschungsprojekte ergeben sich aus dem Umfeld der Themenstellungen, in denen die am Studiengang beteiligten Dozenten tätig sind.

Es werden Methoden zur Einschätzung der Literatursituation und der Patentlage (Recherche), der rechtlichen, ökologischen und ökonomischen Randbedingungen für eine Projektentwicklung vorgestellt. Es werden Kostenpläne und Effizienz kalkulationen aufgestellt.

Literatur

Die notwendige (aktuelle) Literatur wird in Abhängigkeit des Forschungsthemas in Zusammenarbeit mit dem Betreuer ausgewählt und durch eigene Literaturrecherchen ergänzt. Literatur zur formalen Erstellung von Forschungsanträgen wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-------------|
| Modulbezeichnung | Master-Arbeit | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | Master-Arbeit | |
| Semester | SS / 4. Semester | |
| Verantwortliche | Am Studiengang beteiligte Dozenten | |
| Dozenten | Am Studiengang beteiligte Dozenten | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 800 h 100 h Selbststudium | Präsenzzeit |
| Leistungspunkte | 30 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Mindestens 75 LP/ drittes Fachsemester | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse auf dem Gebiet der Material- und Nanochemie | |
| Studienleistungen | Laborarbeit nach Vorgabe | |
| Prüfungsleistungen | Master-Arbeit und Vortrag über ihre Ergebnisse | |
| Medienform | Laborarbeit, Präsentationstechniken | |

Master-Arbeit

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erlangen im Rahmen dieser Veranstaltung die Fähigkeiten, in einem inhaltlich begrenzten sowie in einem größeren zeitlichen Rahmen einen Projektplan zu erstellen und umzusetzen und vertiefte Kenntnisse in einem ausgewählten Bereich zu erwerben.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage ein erweitertes Thema aus dem Bereich materialorientierter Chemie unter Anleitung zu erarbeiten, eigenständig zu vertiefen und durch eigene Arbeiten in einem vorgegebenen Zeitraum weiterzuentwickeln. Sie sind in der Lage neue Herangehensweisen zu entwickeln und abzuschätzen. Sie können weitere Aspekte in Bezug auf das gestellte Thema geben.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage eigene wesentliche Ergebnisse in geeigneter Schriftform zusammenzufassen und im Seminar einem Fachpublikum vorzustellen. Das vorgegebene Thema können sie in einen wissenschaftlichen Kontext einordnen und Möglichkeiten zur gemeinsamen Diskussion mit Kommilitonen und wissenschaftlichen Mitarbeitern des Arbeitskreises nutzen. Sie können ihre Ergebnisse kritisch hinterfragen sowie beurteilen und Fortschritte zeitlich abschätzen.

Die Experimente führen sie eigenständig unter Beachtung der Arbeitsschutzvorschriften sorgfältig, sicher und gefahrlos in einem gegebenen Zeitfenster durch. Zur Realisierung ihrer Master-Arbeit sind sie in der Lage sachgemäß Rechartechniken zu nutzen und sich fachgerechter und

wissenschaftlicher Techniken beim Schreiben sowie Präsentieren ihrer Arbeit zu bedienen.

.

Inhalte

Themen aus dem Bereich Material- und Nanochemie

Literatur

Weitere Literatur wird vom betreuenden Dozenten bekannt gegeben.

Master-Studiengang Material- und Nanochemie – Wahlmodule

Fortgeschrittene Materialanalytik

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-------------|
| Modulbezeichnung | Fortgeschrittene Materialanalytik | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Fortgeschrittene Materialanalytik (3 SWS) 15090 P Fortgeschrittene Materialanalytik (4 SWS) 15072 | |
| Semester | SS / 2. Semester | |
| Verantwortlicher | Vogt | |
| Dozenten | Feldhoff, Caro, Imbihl | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Analytik M. Sc. Material- und Nanochemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h 142 h Selbststudium | Präsenzzeit |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer und physikalischer Chemie, Grundkenntnisse in instrumentellen Analyseverfahren | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Powerpoint-Präsentation, Skript zur Vorlesung, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung Fortgeschrittene Materialanalytik

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden kennen die diversen Methoden und Verfahren mit spezieller Eignung zur Charakterisierung von Festkörpern und Eigenschaften moderner Materialien, bei denen es sich mitunter um Bulk-Materialien, Nanoteilchen, Biomineralisatoren, mesoporöse Materialien, Supraleiter, Halbleiter, Katalysatoren oder Schichtmaterialien handelt. Sie erwerben weiterführende Kenntnisse in der Elektronenmikroskopie an Beispielen mikro- und nanostrukturierter Feststoffe (STEM, HHDF, EELS, EFTEM, CBED, HRSEM) und eignen sich die Anwendungsmöglichkeiten der speziellen röntgenanalytischen Verfahren an.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage analytische Messverfahren mit PIXE, RBS und SIMS an Beispielen der Halbleiteranalytik, der Biomineralien und der Analyse von Kunstobjekten zu erläutern. Sie können im Bereich der Oberflächenanalytik die Leistungsfähigkeit und die Präzession hinsichtlich

der Ergebnisse der Photoelektronenspektroskopie und Auger-Elektronenspektroskopie an Beispielen aus der Katalyseforschung und Halbleitertechnologie beschreiben und demonstrieren.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die Inhalte aus der Vorlesung schriftlich sowie verbal darzustellen und sich mit komplexen Fragestellungen auseinanderzusetzen.

Inhalte

- Grundlagen der Analytik mit beschleunigten Ionen
 - Erzeugung fokussierter Ionenstrahlen
 - Wechselwirkungen der Ionen mit Festkörper und der sich daraus ergebenden spektroskopisch nutzbaren Signale aus der Probe
 - Methodische Schwerpunkte: Analytik mit PIXE, RBS, SIMS
- Spezielle röntgenanalytische Verfahren
 - Fokussierung von Röntgenstrahlung
 - Erhöhung der Empfindlichkeit der Messung durch neue technische Entwicklungen (Synchrotronstrahlung, Prinzip der Totalreflexion)
- Elektronenmikroskopische Verfahren
 - Rastertransmissionselektronenmikroskopie (STEM)
 - Z-Kontrast-Abbildung
 - Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS)
 - energiegefilterte Transmissionselektronenmikroskopie (EFTEM)
 - konvergente Elektronenbeugung (CBED)
 - hochauflösende Rasterelektronenmikroskopie (HRSEM) mit Sekundärelektronen
- „Parallelisierte Feststoffanalytik großer Bibliotheken der kombinatorischen Festkörperforschung“
 - automatisierter Materialherstellung
 - parallelisierte Materialanalytik
 - parallelisierte Auswertung an Bsp. Von Katalysatoren und Materialien mit einstellbaren dielektrischen und elektrischen Eigenschaften
- Grundlagen der Photonenspektroskopie (XPS) und Auger-Elektronenspektroskopie (AES)

Literatur

[1] J.I. Goldstein, Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis, 3. ed., Kluwer Acad./Plenum Publ., New York, 2003, [2] L. Reimer, Scanning electron microscopy : physics of image formation and microanalysis, 2. ed., Springer, Berlin (1998), [3] D. Shindo, T. Oikawa, Analytical Electron Microscopy for Materials Science, Springer, 2002, [4] Eds. K. Tsuji, J. Injuk, R. van Grieken, X-ray spectrometry: recent technological advances, Wiley, 2004, [5] D. Brune, R. Hellborg, H.J. Whitlow, O. Hunderi, Surface Characterization, Wiley-VCH, 1997, [6] H. Kuzmany: Festkörperspektroskopie, Springer Verlag, 1998

Katalyse

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Katalyse | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Katalyse (2 SWS) 14900 P Katalyse (4 SWS) 14901 S Katalyse (1 SWS) 14904 | |
| Semester | SS / 2. Semester oder WS / 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Caro | |
| Dozenten | Bahnmann, Caro, Kirschning, Scheper, Lindner | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer, physikalischer und technischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen, Seminarvortrag | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung/Seminar

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über das Wissen der aktuellen Methoden und Verfahren in der homogenen und heterogenen Katalyse und deren Anwendung in der chemischen Industrie.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in der Lage die Effektivität katalytischer Prozesse zu beurteilen und können Kriterien für eine Optimierung von Katalysatoren und Katalyseverfahren entwickeln. Zudem können sie auch neuartige Verfahren, beispielsweise in der homogenen, der Bio- oder der Photokatalyse beurteilen und die Bedeutung der Entwicklung von Nanostrukturen erkennen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage das erlernte Wissen aus dieser Vorlesung verbal und schriftlich darzustellen. Außerdem können sie komplexe Geschwindigkeitsgesetze für Parallel- und Folgereaktionen und für vorgelagerte Gleichgewichte auf katalysierte Reaktionen anwenden.

Inhalte

- Feststoffanalyse
 - heterogene Katalyse
 - Photokatalyse
- molekulare Katalyse
 - homogene Katalyse
 - Biokatalyse
- Grundlegende Begriffe wie Umsatz, Selektivität und Ausbeute sowie TON
- Anwendung von komplexen Geschwindigkeitsgesetzen für Parallel- und Folgereaktionen und für vorgelagerte Gleichgewichte auf katalysierte Reaktionen
- Gruppen von katalysierten Reaktionen wie Oxidation, Hydrierung oder Isomerisierung
- moderne Anwendungen der homogenen Katalyse basierend auf Übergangsmetallen wie Gold und Ruthenium
- besondere mechanistische Aspekte der homogenen Katalyse
- moderne Entwicklungsrichtungen der Katalyse wie
 - kombinatorische Katalysatorforschung
 - molekulares Design enzymatischer anorganischer Katalysatoren
 - in situ-Techniken zur Diagnostik arbeitender Katalysatoren
 - Membran-unterstützte Katalyse
 - Heterogenisierung homogener Katalysatoren
 - Miniaturisierung katalytischer Systeme durch Baugruppen der Mikroreaktionstechnik
- umweltrelevante Katalyseverfahren wie
 - Autoabgasreinigung
 - Technische Abgaskatalyse
 - Reduktion von VOC
- Spezialfeld der Katalyse: Polymerisation
 - am Beispiel der Niederdruck-Ethen-Polymerisation im Gaswirbelschichtverfahren
- hohe Selektivität und Spezifik der Enzymkatalyse und Biotransformation anhand von exemplarischen Beispielen

- besondere Verdienste des NPT Ertl, der von 1968 bis 1972 an der Universität Hannover lehrte und forschte, um die katalytische CO-Oxidation und die Aufklärung des Mechanismus der NH_3 -Synthese

Literatur

[1] I. Chorkendorff, J.W. Niemantsverdriet, Concepts of Modern Catalysis and Kinetics, Wiley-VCH, 2003

[2] G. Ertl, H. Knözinger, J. Weitkamp, Preparation of Solid Catalysts, Wiley-VCH, 1999.

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden kennen aufbauend auf der Vorlesung katalytische Verfahren aus unterschiedlichen Bereichen der Chemie. Dazu gehören die Feststoffkatalyse, die Photokatalyse, die molekulare Katalyse und die Biokatalyse.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten können Kriterien entwickeln, mit denen die wichtigsten Methoden zur Optimierung von Katalysatoren und katalytischen Prozessen beurteilt werden können. Außerdem können sie spezielle Katalysatoren im Hinblick auf Effektivität, Selektivität, aber auch auf ökologischer Hinsicht miteinander vergleichen und beurteilen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können anhand der entwickelten Kriterien die wichtigsten Methoden zur Optimierung von Katalysatoren und katalytischen Prozessen beurteilen. Außerdem können sie die durchgeführten katalytischen Versuche detailliert in Hinblick auf die Ausbeute, Selektivität, Wirtschaftlichkeit und Ökobilanz auswerten.

Inhalte

- Einsatz von Übergangsmetallkomplexen in der homogenen Katalyse
- Heterogene Katalyse
 - exemplarisch eine Oxidationskatalyse im Membranreaktor
 - Prinzipien des Stofftransportes durch perowskitische Sauerstoffleiter einschließlich der entsprechenden Reaktionstechnik
 - Messungen bei der katalytischen Partialoxidation von Kohlenwasserstoffen mit Sauerstoff, der über eine Permeation von den Membranen bereitgestellt wird
 - Analyse und Quantifizierung der erhaltenen Stoffgemische über die Gaschromatographie

- Biokatalyse
 - Isolierung von Enzymen
 - verschiedene Verfahren unter Einsatz von Enzymen

- Photokatalyse
 - Betrieb einer photoelektrochemischen Wasserspaltung und eines photokatalytischen Schadstoffabbaus
 - Aufbau einer geeigneten photoelektrochemischen Zelle bzw. einer geeigneten Photokatalyseapparatur
 - Erzeugung von einzusetzenden Titandioxidelektroden bzw. Photokatalysatoren mittels Sol/ Gel-Beschichtung und deren Charakterisierung mit verschiedenen Techniken (UV-/Vis-Reflektionsspektroskopie, BET-Messung)
 - Durchführung von photokatalytischen Reaktionen einschließlich einer quantitativen Produktanalyse

Für alle durchgeführten katalytischen Versuche erfolgt eine detaillierte Auswertung in Hinblick auf die Ausbeuten, Selektivitäten, Wirtschaftlichkeit und Ökobilanz.

Literatur

Die Versuchsbeschreibungen und weiterführenden Literaturstellen werden bei den einzelnen Versuchen angegeben.

Oberflächenchemie

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Oberflächenchemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Oberflächenchemie (2 SWS) 15089 Ü Oberflächenchemie (1 SWS) | |
| Semester | SS / 2. Semester oder WS / 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Imbihl | |
| Dozent | Imbihl | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 42 h Präsenzzeit 78 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 4 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter | |
| Prüfungsleistungen | Mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation | |

Vorlesung/Übungen

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über das Wissen der physikalisch-chemischen Eigenschaften von Festkörperoberflächen und Methoden zur Charakterisierung von Oberflächen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten können die chemischen, strukturellen und elektronischen Eigenschaften von Festkörperoberflächen mit den entsprechenden abweichenden Eigenschaften des Volumens des jeweiligen Festkörpers vergleichen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können das erlernte Wissen verbal und schriftlich wiedergeben und Festkörperoberflächen anhand der erlernten Analysemethoden charakterisieren.

Inhalte

- die besonderen chemischen, strukturellen und elektronischen Eigenschaften von Festkörperoberflächen im Vergleich zum Volumen des jeweiligen Festkörpers
- Verwendung der Festkörperoberflächen in der heterogenen Katalyse unter Nutzung ihrer besonderen Eigenschaften, die die Grundlage für die Adsorption sind
- Vorstellung zahlreicher Analysemethoden als Grundlage zur Charakterisierung von Oberflächen

Literatur

- [1] K. Christmann, Introduction to surface physical chemistry, Steinkopff/Springer
[2] I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet, Concepts of modern catalysis and kinetics, Wiley-VCH
[3] G. Ertl, J. Küppers, Low energy electrons and surface chemistry, Wiley-VCH

Biomaterialien und Biomineralisation

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Biomaterialien und Biomineralisation | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Biomaterialien und Biomineralisation (3 SWS) 14012 P Biomaterialien und Biomineralisation (4 SWS) 14212 | |
| Semester | WS / 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Behrens | |
| Dozenten | Behrens, Vogt, Schlie-Wolter, Ehlert | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie M. Sc. Biochemie M. Sc. Life Science | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer, physikalischer und/oder technischer Chemie, Biochemie, Life Sciences | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung Biomineralisation und Biomaterialien

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben wesentliche Kenntnisse über die Wechselwirkungen zwischen polymeren und anorganischen Materialien (Keramiken, Metalle) und lebender Materie (Zellen, Gewebe, Körper) sowie über die modernen Anwendungsgebiete der Biominerale und Biomaterialien im Bereich des Tissue und Stem Cell Engineering. Sie beherrschen die speziellen Analyseverfahren zur Charakterisierung von Festkörpern, welche auf den Kontakt mit biologischen Stoffen sowie auf den Kontakt mit Grenzflächen ausgerichtet sind. Sie kennen typische Klassen dauerhafter oder

resorbierbarer Biomaterialien, wie die Polymere, die anorganischen Keramikwerkstoffe und Metalle und sind mit den physikalischen, chemischen, biochemischen und biologischen Modifikationen von Biomaterialien vertraut. Sie erlangen zudem ein Verständnis für die gesundheitlichen Gefahren und Risiken, die von Nanoteilchen ausgehen können

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die grundlegenden Prinzipien des strukturellen Aufbaus von Biomineralen und ihrer Prozesse widerzugeben, die zu den hierarchischen Strukturen führen, sowie Zusammenhänge zwischen dem Aufbau, der Struktur und ihrer Funktion herzustellen. Sie können die Voraussetzungen für den Einsatz von Materialien im biologischen Kontakt (Material-Zell-, Material-Gewebe-Interaktion) beschreiben und die Anwendungsgebiete für verschiedene Biomaterialien benennen. Sie verstehen die Wechselwirkungen zwischen den Biomaterialien und den bioorganischen Molekülen bzw. biologischen Strukturen bezüglich der Zellen, des Gewebes und des Körpers. Sie beherrschen die experimentellen Methoden der Mikroskopie im μm -Bereich mit Photonen und Ionen und können diese zur Untersuchung von Gewebeproben anwenden.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage über die spezifischen Problemstellungen bei analytischen Untersuchungen an Biomineralen und Biomaterialien hinsichtlich der Probenpräparation, Analyse von Makromolekülen und der Analytik von Grenzflächen zu diskutieren und können Sachverhalte entsprechend wissenschaftlicher Gepflogenheiten schriftlich sowie verbal darstellen.

Inhalte

Biominerale

- hierarchische Struktur
- Charakter als bioorganische Kompositstruktur
- Strukturen an Grenzflächen
- Grundlegende Mechanismen der Biomineralisation
- ausgewählte Substanzklassen: Calciumcarbonat, Calciumphosphat, Eisenoxide, Siliciumdioxid
 - Struktur
 - Eigenschaften
 - Funktion

Biomaterialien

- Anwendungsgebiete
 - dauerhaft resorbierbare Biomaterialien (Polymere, anorganische Keramikstoffe, Metalle)
 - Grenzflächenverhalten zwischen Biomaterial und bioorganischen Molekülen bzw. biologischen Strukturen (Zellen, Gewebe, Körper)
 - physikalische, chemische, biochemische und biologische Modifikationen
 - Einsatz für Tissue und Stem Cell Engineering
 - gesundheitliche Gefahren von Festkörpern und Nanoteilchen im Körperkontakt
-
- spezifische Problemstellungen analytischer Verfahren an Biomineralen und -materialien

- Probenpräparation
- Analyse von Makromolekülen
- Analytik von Grenzflächen
- Spezielle analytische Methoden: Mikroskopie im μm -Bereich mit Photonen (Raman, IR, UV, Röntgen) und Ionen
- Analytik von Gewebeproben und gezielte Bestimmung der mineralischen Bestandteile und Spurenelemente

Literatur

[1] M. Epple: Biomaterialien und Biomineralisation, Teubner, 2003, [2] S. Mann: Biomineralization, Oxford 2001, [3] B. Ratner u.a.: Biomaterials Science

Praktikum Biomineralisation und Biomaterialien

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben praktische Verfahrensweisen zur Präparation von Biomineralen durch Festkörper enthaltende biologische Proben und beherrschen die Analysemethoden zur Charakterisierung von Festkörpern im Kontakt mit biologischen Stoffen und mit Grenzflächen. Sie erwerben zudem grundlegende praktische Kenntnisse im Bereich von Zellkulturtechniken.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden können eigenständig analytische Untersuchungen der Präparate durchführen und diese auf bestimmte Bestandteile und Spurenelemente überprüfen. Sie sind in der Lage selbstständig Biomaterialien herzustellen und diese, wie die Biominerale, geeigneten Testverfahren zu unterziehen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können Biomaterialien selber herstellen und unter verschiedenen Gesichtspunkten testen. Sie können ihre Versuchsergebnisse auswerten und unter Einbeziehung wissenschaftlicher Literatur ihre Ergebnisse begreifen und erklären sowie schriftlich und verbal in prägnanter Form definieren. Sie nutzen Gegebenheiten zur Diskussion mit anderen Studierenden und Assistenten. Sie führen die Versuche in dem vorgegebenem Zeitrahmen sorgfältig, sicher und gefahrlos unter Beachtung der Arbeitsschutzvorschriften durch und zeigen Verantwortungsbewusstsein im Umgang mit Chemikalien, organischen und biologischen Materialien und Laborgeräten.

Inhalte

- Aufarbeitung und Charakterisierung von Reisspelzen, Eierschalen, Zähnen oder Knochen
 - Erprobung verschiedener Präparationsverfahren
 - Entfernung organischer Komponenten durch enzymatischen oder chemisch-oxidativen Abbau
 - Entfernung anorganischer Komponenten durch Ausnutzung selektiver Löslichkeiten)

- Charakterisierung der Proben durch verschiedene Methoden (Thermoanalyse, Mikroskopie, Elektronenmikroskopie, IR-Spektroskopie, Röntgenkleinwinkel-streuung, elementanalytische Verfahren)
- Untersuchungen zum Einbau von Enzymen in anorganische Matrices (z.B. Kieselgel)
- Durchführung von Aktivitätstests
- Kristallisation von Calciumcarbonat in Gegenwart von Biomolekülen
- Untersuchung der Auswirkung auf die Kristallmorphologie
- Synthese von Chitosan-Apatit-Kompositen (Bsp. für Komposit-Biomaterial)
- Charakterisierung mittels Röntgen-Pulverbeugung und Rasterelektronenmikroskopie
- Untersuchung der Reaktion in Simulated Body Fluid
- Methoden der mechanischen Testung
- ortsaufgelöste Analytik von biologischen Proben
- Zellkulturtechniken

- ;
-

Literatur

Versuchsbeschreibungen und weiterführende Literaturstellen werden bei den Versuchen angegeben.

Röntgenmethoden

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Röntgenmethoden | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Röntgenmethoden und Kristallstrukturanalytik (2 SWS) Ü Röntgenmethoden und Kristallstrukturanalytik (1 SWS) P Röntgenmethoden und Kristallstrukturanalytik (4 SWS) | |
| Semester | 3. Semester (WS, zweijährig) | |
| Verantwortlicher | Behrens | |
| Dozenten | Behrens (Chemie), Buhl (Mineralogie), Wiebcke (Chemie) | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer und physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter, erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung/Übungen Röntgenmethoden

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben weitgehende Kenntnisse in der Kristallstrukturanalyse einkristalliner und polykristalliner Proben anorganischer Materialien sowie weitere Röntgenverfahren zur strukturbezogenen Analytik von nicht-kristallinen Feststoffen an Gläsern, Solen, Gelen und Nanomaterialien. Sie erlangen diesbezüglich einen Überblick über die Struktur verschiedener Festkörper und kennen die möglichen Beugungserscheinungen von Strahlen an Atomen bzw.

Molekülen, Partikeln und Gasen sowie an diversen amorphen Materialien.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden verstehen die Methoden zur analytischen Bestimmung des atomaren Aufbaus von Kristallen und amorphen Materialien hinsichtlich der räumlichen Anordnung der Atome durch Röntgen-, Elektronen-, Synchrotron- und teils Neutronenstrahlung. Sie können über die Einkristallstrukturanalyse Informationen zur Elementarzelle erhalten und jeweils die Raumgruppen herleiten. Sie sind in der Lage über die Beugung und Interferenzen von Röntgenstrahlen an Elektronen die Struktur und Symmetrie von Kristallen mit Hilfe mathematischer Formalismen zu bestimmen. Sie kennen die Verfahren zur Analyse von pulverförmigen Materialien, wie das Debye-Scherrer-, Bragg-Brentano und das Guinier-Verfahren zur Identifizierung von Substanzen und Substanzgemischen in Proben. Sie sind in der Lage Reflexe zu indizieren, Gitterkonstanten zu bestimmen und Zusammenhänge zwischen der Form von Streukurven und Partikelgröße, -größenverteilung und -form sowie der Struktur von Partikelaggregaten (Oberflächen- und Massenfraktale) zu erkennen und benennen. Des Weiteren kennen sie das Grundprinzip der Neutronenbeugung und können deren Vor- und Nachteile beschreiben.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die Strukturparameter und Gütekriterien kritisch zu betrachten und sich an problemorientierten Diskussionen zu beteiligen. Sie können die verschiedenen Messmethoden nach den Anwendungsmöglichkeiten und Genauigkeiten hinsichtlich der Ergebnisse beurteilen und Auswirkungen von Strukturen auf die Messergebnisse voraussagen und begründen.

Inhalte

- Einführung in grundlegende Organisationsformen von Materialien (Kristalle, modulierte Strukturen, Quasikristalle, Zwillinge, nicht-periodisch strukturierte Materialien und Komposite, periodische nanostrukturierte Materialien)
- vertiefende Wiederholung der kristallografischen Symmetriellehre (Ebenen- und Raumgruppen)
- Physik der Streuung/Beugung von Röntgenstrahlen an: Atom, Molekül/Elementarzelle, Gitter, Gas, Partikel, Glas (Fourier-Transformation, Bragg-Gleichung, Debye-Gleichung)
- kurze Einblick in die Neutronenstreuung
- moderne Röntgenstrahlungsquellen (z.B. Synchrotronquellen) und Detektorsysteme (z.B. Bildplatte)
- Einkristallmethoden
 - Ewald-Konstruktion
 - Buerger-Verfahren
 - Vierkreisdiffraktometer
- Einkristallstrukturanalyse
 - Bestimmung von Raumgruppen
 - Strukturlösung mittels direkter Verfahren und der Patterson-Funktion in Form der Schweratommethode
 - Fourier-Synthese und Verfeinerung zur Vervollständigung eines Strukturmodells
- Röntgenpulvermethoden (beinhaltet entsprechende Verfahren unter Nutzung von Neutronenstrahlen und insbesondere unterschiedliche, sich ergänzende Informationen über Röntgen- und Neutronenverfahren)

- Debye-Scherrer-, Bragg-Brentano- und Guinier-Verfahren
- Profilkfunktionen, Peakentfaltung
- Strukturverfeinerung mit Rietveld-Methode
- Möglichkeiten und Methoden der Strukturlösung mit Reziprokraum- und Direktraummethode
- Totalstreuverfahren (Hochenergiestreuverfahren am Synchrotron) mit der Gewinnung von Abstandsverteilungsfunktionen zur Strukturanalytik von Gläsern und Nanomaterialien
- Röntgenkleinwinkelstreuverfahren zur Analytik von Solen und Gelen
- Guinier-Näherung
- Porod-Gesetz
- Gewinnung von Paar-Abstandsverteilungskurven zur Partikelformanalyse
- Form- und Strukturfaktor
- Methode des streifenden Einfalls (GISAXS) zur Untersuchung von dünnen Filmen
- Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS)
 - EXAFS und XANES zur Erhaltung elementspezifischer Informationen zur lokalen Struktur (Atomabstände, Oxidationsstufen)

Literatur

[1] R. Allmann, „Röntgenpulverdiffraktometrie“, Springer, Berlin, 2003; [2] W. Massa, „Kristallstrukturbestimmung“, Teubner Studienbücher Chemie, Stuttgart, 2002; [3] R.E. Dinnebier & S.J.L. Billinge (Ed.) „Powder Diffraction, Theory and Practice“. Weitere Literatur in Form von Übersichtsartikeln wird in der Lehrveranstaltung bekannt gegeben.

Praktikum Röntgenmethoden

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erhalten eine Einführung in die Standardverfahren der Kristallstrukturanalyse. Sie erlangen einen Einblick in die Probenpräparation und Durchführung der Messmethoden und erwerben Konzepte zur Lösung strukturanalytischer Problemstellungen.

2.) Methodenkompetenzen

Sie können mittels der Einkristallstrukturanalyse und der Röntgenpulvermethode kristalline und pulverförmige Proben untersuchen und ausgewählte Verfahren zur Analyse anwenden. Sie trainieren den „Umgang mit dem reziproken Raum“ und die Bestimmung von Gitterkonstanten, systematischen Auslöschungen sowie von Raumgruppen durch die Anfertigung von Aufnahmen eines Einkristalls und einer Pulverprobe.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die erhaltenen Strukturparameter und Gütekriterien kritisch zu betrachten und ihre Ergebnisse fachgerecht darzustellen. Die Auswertungen können sie am CIP-Pool der Chemieinstitute durchführen und die bestimmte Kristallstruktur mit Hilfe von Visualisierungsprogrammen interpretieren. Die Versuche führen sie sicher, gefahrlos und sorgfältig unter Einhaltung der Arbeitsschutzvorschriften in einem vorgegebenen Zeitraum durch.

Inhalte

Während des Praktikums sollen folgende Aufgaben ausgeführt werden

- Aufnahmen vororientierter Kristalle an Buerger-Kameras
 - Intensitätsmessungen mit einem Einkristall (Vierkreisdiffraktometer)
 - Intensitätsmessungen mit einer Pulverprobe (Pulverdiffraktometer mit Debye-Scherrer-Geometrie, Kapillartechnik)
- wahlweise vollständige Kristallstrukturanalyse mit dem Pulver- oder Einkristalldatensatz unter Anwendung moderner Computerprogramme

Literatur

Anleitungen für die experimentellen Arbeiten an den Röntgengeräten und die Kristallstrukturrechnungen an den Computern werden vor dem Praktikum ausgegeben.

Wirkstoffmechanismen und -darstellung

| Studiengang | Master-Studiengang 1.) Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|---------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Wirkstoffmechanismen und -darstellung | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Wirkstoffmechanismen und pharmazeutische Eigenschaften (2 SWS) Ü Wirkstoffmechanismen und pharmazeutische Eigenschaften (1 SWS) V Bioprozesstechnik und Enzymtechnologie (2 SWS) S Bioprozesstechnik und Enzymtechnologie (1 SWS) | |
| Semester | WS / 1. Semester | |
| Verantwortlicher | Kalesse | |
| Dozenten | Kalesse, Benz, Kirschning, Scheper, Bellgardt, Nickisch, Gaich | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 84 h Präsenzzeit 156 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen | Bachelor (B. Sc.) in Chemie | |
| Zulassungsvoraussetzungen | Keine | |
| Studienleistungen | Keine | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (3 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Skript, Tafelanschrieb, Overheadfolien, Power-Point Präsentation zum Skript | |

Vorlesung Wirkstoffmechanismen und pharmazeutische Eigenschaften

Qualifikationsziele

2.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über Wissen der modernen Medizinischen Chemie. Außerdem kennen sie die Zusammenhänge zwischen der Chemie und den Strukturen von biologisch aktiven Verbindungen mit den korrespondierenden biologischen Targets. Darauf basierend beherrschen sie die zugrunde liegenden Wirkmechanismen sowie die Prinzipien des Wirkstoffdesigns. Die Studenten verfügen ergänzend dazu über ein Verständnis der biologisch-medizinischen Aktivität auf molekularer Grundlage.

3.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage den Zusammenhang zwischen kleinen molekularen durch Synthese erzeugten Liganden und eines makromolekularem Rezeptors zu erkennen und daraus

mögliche Therapieansätze für die medizinische Forschung herzuleiten. Zudem können sie ausgehend von den bekannten Zusammenhängen moderne Aspekte der pharmakologischen Forschung ableiten und erlernen an ausgewählten Beispielen interdisziplinäre Methoden zum Bearbeiten von medizinischen Fragestellungen.

4.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können den erlernten Vorlesungsstoff verbal und schriftlich wiedergeben und medizinisch relevante Fragestellungen mit den erlernten interdisziplinären Methoden lösen bzw. erarbeiten. Außerdem können sie durch die Veranschaulichung an ausgewählten Beispielen beurteilen wie eine Wirkstoffentwicklung erfolgen kann.

Inhalte

- Aufbau pharmakologisch relevanter Verbindungen
- biologisch-medizinische Aktivität auf molekularer Grundlage
- bedeutende biologische Targets
- wichtige Naturstoffklassen sowohl als Target als auch als biologisches Werkzeug
- aktuelle Aspekte der Wirkstoffforschung
- moderne Themen der bioorganischen Chemie vor dem Hintergrund der Diagnostik
- aktuelle Methoden der Biologischen Chemie wie
 - Chemical Genomics
 - Metabolomics
- gebräuchliche Hoch-Durchsatz-Methoden zum Verständnis der Wirkstoffchemie

Literatur

- [1] H. Dugas, Bioorganic Chemistry, Springer, 1999; H.-J. Böhm, G. Klebe, H. Kubinyi, Wirkstoffdesign, Spektrum Verlag, 1996
- [2] E. Mutschler, Arzneimittelwirkungen, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1991
- [3] W. Forth, D. Henschler, W. Rummel, K. Starke (Hrsg.), Pharmakologie und Toxikologie, Spektrum Verlag, 1998 [4] P.M. Dewick, Medicinal Natural Products, 3. Ausgabe, John Wiley & Sons, 2008

Übung Wirkstoffmechanismen und pharmazeutische Eigenschaften

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studenten verfügen durch die Übung über ein vertieftes Wissen des in der Vorlesung vermittelten Stoffes über Wirkstoffmechanismen und pharmazeutische Eigenschaften auf der Basis der Übungsaufgaben.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden beherrschen durch die Übungen ein selbständiges Arbeiten bei der Konzeptionierung von medizinisch-chemischen Projekten.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können mit einer gewissen Sicherheit mit pharmakophoren Gruppen für die Wirkstoffentwicklung umgehen und deren richtige Nutzung beurteilen. Zudem sind sie in der Lage das erlernte Wissen zu ausgewählten Themen der Vorlesung zu diskutieren.

Inhalte

- selbstständige Bearbeitung von Übungsaufgaben zu den Einzelthemen
- vertiefte Diskussion zu ausgewählten Themen der Vorlesung

Literatur

- [1] H. Dugas, Bioorganic Chemistry, Springer, 1999; H.-J. Böhm, G. Klebe, H. Kubinyi, Wirkstoffdesign, Spektrum Verlag, 1996
- [2] E. Mutschler, Arzneimittelwirkungen, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1991
- [3] W. Forth, D. Henschler, W. Rummel, K. Starke (Hrsg.), Pharmakologie und Toxikologie, Spektrum Verlag, 1998 [4] P.M. Dewick, Medicinal Natural Products, 3. Ausgabe, John Wiley & Sons, 2008
- [5] Übersichten und Primärliteratur aus internationalen Journalen

Vorlesung Bioprozesstechnik und Enzymtechnologie

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studenten erlangen durch die Vorlesung „Bioprozesstechnik und Enzymtechnologie“ ein Verständnis für die Kopplung einzelner Systemkompartimente in Bioprocessen.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden können Zusammenhänge zwischen der Reaktionskinetik und dem Stofftransport erkennen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten können das erlernte Wissen verbal und schriftlich darstellen sowie vorliegende Fragestellungen bzw. Probleme der Bioprozesstechnik bearbeiten und lösen.

Inhalte

- Reaktionskinetik biotechnologischer Prozesse (Kopplung, Stofftransport und Reaktionskinetik)
- Stofftransportphänomene in biotechnologischen Prozessen
- Spezielle Reaktortechniken/-typen
- Metabolic Flux Analysis
- Prozessbeispiele
- Downstream-Processing
- Pflanzenbiotechnologie
- Marine Biotechnologie
- Tissue Engineering
- Zellkulturtechnik
- Industrielle Biotransformationen

Literatur

- [1] J. Bailey, D. Ollis, Biochemical Engineering Fundamentals, McGraw Hill, ISBN 0-07-003212-2

- [2] H. Land, D. Clark, Biochemical Engineering, Marcel Dekker, Inc., ISBN 0-8247-0099-6
[3] H.-J. Rehm, Industrielle Mikrobiologie, Springer-Verlag, ISBN 3-540,09642-2
[4] Liese, K. Seelbach, C. Wandray, Industrial Biotransformations, Wiley-VCH ISBN 3-527-30094-5
[5] K. Buchholz, V. Kasche, Biokatalysatoren und Enzymtechnologie, VCH, ISBN 3-527-28238-6

Seminar Bioprozesstechnik und Enzymtechnologie

Inhalte

- selbstständige Ausarbeitung von Vorträgen zu ausgewählten Themen der Biotechnologie in kleinen Gruppen

Literatur

Übersichten und Primärliteratur aus internationalen Journalen.

Stereokontrolle und Biogenese von Naturstoffen

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|---------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Stereokontrolle und Biogenese von Naturstoffen | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Stereokontrolle in der Organischen Chemie (2 SWS) Ü Stereokontrolle in der Organischen Chemie (1 SWS) V Biogenese von Naturstoffen (2 SWS) Ü Biogenese von Naturstoffen (1 SWS) | |
| Semester | WS / 1. Semester | |
| Verantwortlicher | Kirschning | |
| Dozenten | Kirschning, Kalesse, Boysen, Butenschön, Gaich, Cordes | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 84 h Präsenzzeit 156 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzung | Bachelor (B. Sc.) der Chemie | |
| Zulassungsvoraussetzungen | Keine | |
| Studienleistungen | Keine | |
| Prüfungsleistung | Klausur (3 h) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Skript, Tafelanschrieb, Overheadfolien, Power- Point Präsentation zum Skript | |

| Vorlesung Stereokontrolle in der Organischen Chemie |
|--|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen Die Studierenden verfügen über Kenntnisse moderner Synthesemethoden der stereoselektiven Synthese unter Einbeziehung der enzymatischen Katalyse.</p> |
| Inhalte |

- Einführung in die Stereochemie
 - nicht lineare Effekte
- Methoden der stereoselektiven Synthese unter Einbeziehung der Katalyse in Form der organischen Katalyse und Organokatalyse
 - Oxidationen
 - C-C-Verknüpfungen
 - Reduktionen
- Chirale Bausteine (ex chiral pool) für die Synthese
- Biotransformationen mit Enzymen und ganzen Zellen in der Synthese
- Gekoppelte asymmetrische Katalyse
- Einführung in die Retrosynthese

Literatur

- [1] R. Brückner, Reaktionsmechanismen (Organische Reaktionen, Stereochemie, moderne Synthesemethoden), Spektrum Akademischer Verlag, 2. Aufl., 2003
- [2] Clayden, Greeves, Warren & Wothers, Organic Chemistry, Oxford, 2001
- [3] K.C. Nicolaou, Classics in Total Synthesis I u. II, Wiley-VCH; Stereochemie
- [4] E. L. Eliel, S. H. Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley & Sons 1994

Übung Stereokontrolle in der Organischen Chemie

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Anhand von Übungsaufgaben wird eine Vertiefung des in der Vorlesung „Stereokontrolle in der organischen Chemie“ vermittelten synthetischen Wissens erreicht.

2.) Methodekompetenzen

Die Studierenden können das in der Vorlesung „Stereokontrolle in der organischen Chemie“ vermittelte synthetische Wissen auf Transferaufgaben übertragen bzw. anwenden und diese durch die Interpretation von analytischen Daten lösen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten sind in der Lage Übungsaufgaben aus dem Themengebiet der Stereochemie selbstständig zu bearbeiten und zu diskutieren.

Inhalte

- selbstständige Bearbeitung und anschließende Diskussion von Übungsaufgaben zur Vorlesung

- Die Übungsaufgaben behandeln Synthesesequenzen verbunden mit analytischen Fragestellungen (NMR-, MS, IR-Spektren, EA).
- mittels dem in der Vorlesung vermittelten synthetischen Wissen und die Interpretation der analytischen Daten werden die Übungsaufgaben gelöst.

Literatur

- [1] R. Brückner, Reaktionsmechanismen (Organische Reaktionen, Stereochemie, moderne Synthesemethoden), Spektrum Akademischer Verlag, 2. Aufl., 2003
- [2] Clayden, Greeves, Warren & Wothers, Organic Chemistry, Oxford, 2001
- [3] K.C. Nicolaou, Classics in Total Synthesis I u. II, Wiley-VCH
- [4] E. L. Eliel, S. H. Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley & Sons 1994.

Vorlesung Biogenese von Naturstoffen

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über einen umfassenden Überblick über die Naturstoffklassen (Terpene, Alkaloide, Polyketide, nicht-ribosomale peptidische Naturstoffe, \square Lactam-Antibiotika) und die ihnen zu Grunde liegenden biosynthetischen Prinzipien. Zudem beherrschen sie die universellen, mechanistischen Konzepte der Chemie und der Biosynthese.

2.) Methodekompetenzen

Die Studenten besitzen nicht mehr das reine „Schubladendenken“, sondern sind in der Lage sich einen Überblick über die einzelnen Biosynthesewege und Transformationen mit Zusammenhängen zu verschaffen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können die aus mechanistischer Sicht engen Beziehungen zwischen den Biotransformationen und chemischen Reaktionen herausarbeiten und Reaktionen, die durch Enzyme vermittelt werden, miteinander vergleichen.

Inhalte

- Universelle Biosynthesewege zu der strukturell unübersichtlich großen Zahl von Sekundärmetaboliten (Terpene, Alkaloide, Polyketide und nicht-ribosomale peptidische Naturstoffe)
- Auflösung des reinen „Schubladendenkens“ einzelner Biosynthesewege und Transformationen
- Universelle und vereinfachte Prinzipien, die sich auf mechanistische Aspekte zurückführen lassen
- Herausarbeitung der aus mechanistischen Sicht engen Beziehung zwischen Biotransformationen und chemischen Reaktionen
- Vergleich von durch Enzyme vermittelter Reaktionen (z. B. Metallkatalyse, Organokatalyse und Enzym-Katalyse)

Literatur

- [1] R. Brückner, Reaktionsmechanismen (Organische Reaktionen, Stereochemie, moderne Synthesemethoden), Spektrum Akademischer Verlag, 2. Aufl., 2003
- [2] Clayden, Greeves, Warren & Wothers, Organic Chemistry, Oxford, 2001
- [3] Perkins, Radical Chemistry, Oxford Chemistry Primers, 2000
- [4] Moody, Whitham, Reactive Intermediates, Oxford Science Publications, 1992
- [5] Dewick, Medicinal Natural Products, 3. Ausgabe, John Wiley & Sons, 2008.

Übung Biogenese von Naturstoffen**Qualifikationsziele****4.) Fachkompetenzen**

Anhand von Übungsaufgaben wird eine Vertiefung des in der Vorlesung „Biogenese von Naturstoffen“ vermittelten Wissens erreicht.

5.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden können das in der Vorlesung „Biogenese von Naturstoffen“ vermittelte Wissen auf Transferaufgaben übertragen und anwenden.

6.) Handlungskompetenzen

Die Studenten sind in der Lage Übungsaufgaben aus dem Themengebiet der Biogenese selbstständig zu bearbeiten und die Ergebnisse anschließend zu diskutieren.

Inhalte

- selbständige Bearbeitung und anschließende Diskussion von Übungsaufgaben zur Vorlesung
- der verbindende, mechanistische Charakter verschiedener Reaktionen in der Chemie und in der Zelle

Literatur

- [1] R. Brückner, Reaktionsmechanismen (Organische Reaktionen, Stereochemie, moderne Synthesemethoden), Spektrum Akademischer Verlag, 2. Aufl., 2003
- [2] Clayden, Greeves, Warren & Wothers, Organic Chemistry, Oxford, 2001
- [3] Perkins, Radical Chemistry, Oxford Chemistry Primers, 2000
- [4] Moody, Whitham, Reactive Intermediates, Oxford Science Publications, 1992
- [5] Dewick, Medicinal Natural Products, Wiley, 1998
- [6] Übersichten und Primärliteratur aus internationalen Journalen

Metallorganische Chemie

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Metallorganische Chemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Metallorganische Chemie (2 SWS) 15051 Ü Metallorganische Chemie (1 SWS) 1502 P Metallorganische Chemie (4 SWS) 15053 | |
| Semester | SS / 2. Semester oder WS / 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Butenschön | |
| Dozent | Butenschön | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in Organischer und Anorganischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter, erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

| Vorlesung und Übung |
|---|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen Die Studierenden kennen die Grundlagen der Metallorganischen Chemie und die Prinzipien des Verbindungsaufbaus, der Herstellung und der Reaktionen (stöchiometrisch und katalytisch) metallorganischer Verbindungen. Außerdem verfügen sie über das Wissen ihrer Anwendungen in der Chemie. In der Übung wird eine Vertiefung des in der Vorlesung vermittelten Stoffes zur Metallorganischen Chemie (Synthese, Struktur, Reaktivität) auf der Basis von Übungsaufgaben erreicht.</p> <p>2.) Methodenkompetenzen Die Studenten sind in der Lage Übungsaufgaben zur Metallorganischen Chemie zu bearbeiten und</p> |

können die erlernten Grundlagen und Prinzipien anwenden.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können das erlernte Wissen verbal und schriftlich darstellen.

Inhalte

- Aufbauprinzipien metall-organischer Verbindungen der Haupt- und Nebengruppenmetalle
- stereochemische und stereoelektronische Aspekte
- besondere Arbeitstechniken der metallorganischen Chemie
- Analytik metallorganischer Verbindungen
- Darstellung der wichtigsten metallorganischen Verbindungsklassen
- Beispiele wichtiger metallorganischer Reaktionen (Einführung)
- Dekomplexierung organischer Liganden
- Reaktionen metallorganischer Verbindungen: nucleophiler und elektrophiler Angriff, Cyclisierungen
- Prinzipien katalytischer Reaktionen
- spezielle Aspekte

4.)

In der Übung wird der in der Vorlesung vermittelte Stoff zur Metallorganischen Chemie (Synthese, Struktur, Reaktivität) auf der Basis von Übungsaufgaben vertiefend behandelt.

Literatur

- [1] Collman, Hegedus, Norton, Finke, Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry, University Science Books, Mill Valley CA 1987
- [2] C. Elschenbroich, Organometallchemie, 6. Aufl., Teubner, Stuttgart 2008
- [3] D. Astruc, Organometallic Chemistry and Catalysis, Springer, Berlin 2007

Praktikum

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden kennen die Grundlagen der Metallorganischen Chemie sowie die speziellen Probleme der metallorganischen Synthese.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten können die vorliegenden Versuche mit Hilfe der erlernten Grundlagen der Metallorganischen Chemie bearbeiten und auswerten.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage die speziellen Probleme der metallorganischen Synthese zu lösen.

Inhalte

- Grundlagen und ausgewählte Anwendungen der Metallorganischen Chemie

Polymere Materialien

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Polymere Materialien | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Synthese organischer Polymere und Polymerkomposite (2 SWS) V Polymeranalytik (2 SWS) P Polymere Materialien (2 SWS) | |
| Semester | SS oder WS / 2. oder 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Giese | |
| Dozenten | Giese | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 84 h Präsenzzeit 156 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer, physikalischer und technischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

Vorlesung Synthese von Polymeren und Polymerkompositen

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben Möglichkeiten der Synthese und die physikalisch-chemischen Eigenschaften ausgewählter organischer Polymere in Abhängigkeit der Konstitution, Konformation und Konfiguration sowie von Kompositmaterialien. Diesbezüglich kennen sie die wichtigsten Polymerisationsarten, zu denen mitunter die radikalische und ionische Polymerisation sowie die Polykondensation und -addition gehören. Sie beherrschen die technisch relevanten Polymerisationsverfahren zur Herstellung von Polymeren und Polymerkompositen sowie die Verfahren zur gezielten Modifikation bzw. Variation von Werkstoffeigenschaften.

2.) Methodenkompetenzen

Sie sind in der Lage Zusammenhänge zwischen der Struktur und den mechanischen Eigenschaften sowie den Eigenschaften im festen Zustand hinsichtlich ihres Schmelz- und Kristallisationsverhaltens der Polymere und Polymerkomposite an Beispielen von Kunststoffen, Kautschukverbindungen und Elastomeren zu erkennen und zu beschreiben. In Abhängigkeit ihrer Eigenschaften können sie die Effizienz der geeigneten Syntheseverfahren einschätzen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studenten sind in der Lage Zusammenhänge zwischen den Eigenschaften, der Struktur und deren Funktionalitäten zu erkennen und Sachverhalte schriftlich sowie verbal darzustellen.

Inhalte

Die Vorlesung Synthese von Polymeren und Polymerkompositen beinhaltet

- Synthese von Polymeren durch Anwendung radikalischer und ionischer Mechanismen in Verbindung mit Polymerisationsverfahren wie z. B. Emulsionspolymerisation, Lösungspolymerisation sowie "Polymerisation in Masse"
- Herstellen von Polymerkompositen (Kautschukmischungen, Elastomere)
- Vertiefung der physikalischen Chemie und Physik von Polymeren
- Struktur - Eigenschaftsbeziehungen von Polymeren und Polymerkompositen im festen Zustand (Glasübergang, Kristallisation und Schmelzen) als auch die mechanischen Eigenschaften (Viskoelastizität, Gummielastizität etc.)
- Typische Beispiele für Polymere und Polymerkomposite: Kunststoffe, Kautschuke und Elastomere

Literatur

Hans Georg Elias, Makromoleküle Hüthig&Wepf Verlag, M. D. Lechner , K. Gehrke, E. H. Nordmeier, Birkhäuser Berlin 1993,
Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Vorlesung Polymeranalytik

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erwerben verschiedene Methoden zur chemischen, physikalischen und rheologischen Charakterisierung von organischen Polymeren und Polymerkompositen. Sie erlangen ein Verständnis für besondere Fragestellungen der Polymeranalytik im Vergleich zur niedermolekularen Stoffanalytik. Sie kennen die besonderen Eigenschaften von Polymeren als Festkörper und in Lösung und beherrschen die grundlegenden physikalischen Grundbegriffe der Polymerchemie.

2.) Methodenkompetenzen

Sie sind in der Lage die Eigenschaften, wie die Molmasse, die Molmassenverteilung und die Monomerzusammensetzung über z.B. Pyrolyse-GC-MS zu bestimmen und dazu die Blocklängen, die Substitutionsmuster sowie die Verzweigungs- und Vernetzungsgrade u.a. durch

Gleichgewichtsquellungsmessungen und NMR-Relaxationszeitspektroskopie zu ermitteln. Sie können thermische Eigenschaften und die Kettenbeweglichkeit von Kautschuken und Elastomeren bestimmen und mittels Thermoanalyse Polymere als Festkörper charakterisieren.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage Sachverhalte schriftlich sowie verbal darzustellen und unterschiedliche Analysemethoden zu beurteilen.

Inhalte

In der Vorlesung „Polymeranalytik“ werden folgende Inhalte behandelt

- analytische Probleme und Untersuchungsmethoden für Polymere
- grundlegenden Definitionen und Begriffe der physikalischen Polymerchemie
- Analytik von Makromolekülen in der Lösung anhand von
 - Methoden zur Bestimmung von Molmassen und Molmassenverteilungen (vertiefte Behandlung von Osmose, Lichtstreuung, Gelpermeationschromatographie, Viskosimetrie)
 - weiteren modernen Methoden, wie z.B. die dynamische Lichtstreuung und die Massenspektroskopie von Makromolekülen
- Methoden der Polymercharakterisierung als Festkörper durch Thermoanalyse (TGA, DSC etc.)
- klassische und moderne Methoden zur Charakterisierung der Kettenbeweglichkeit und des Vernetzungsgrades von Elastomeren (z. B. durch Gleichgewichtsquellungsmessungen und NMR-Relaxationszeitspektroskopie)
- Ermittlung der Polymerzusammensetzung (z. B. Pyrolyse-GC-MS, spezielle Methoden der IR Spektroskopie)

Literatur

Hans Georg Elias, Makromoleküle Hüthig&Wepf Verlag, , M. D. Lechner , K. Gehrke, E. H. Nordmeier, Birkhäuser Berlin 1993, W. F. Hemminger, H. K. Cammenga: Methoden der thermischen Analyse, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989, Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie, Bd. 5, Analysen und Messverfahren, Verlag Chemie Weinheim,

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum Polymere Materialien

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erlangen im Rahmen des Praktikums zur Synthese von Polymeren und Kompositen sowie zur Polymeranalytik den Umgang mit den entsprechend in der Forschung eingesetzten Geräten und experimentellen Techniken in Verbindung mit spezifischen Fragestellungen. Sie beherrschen die Methoden zur Charakterisierung der Eigenschaften und erhalten einen Einblick in aktuelle Forschungsthemen der Polymerchemie.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in der Lage durch Emulsions- und Lösungspolymerisation sowie Vulkanisation ausgewählter Polymere sowie eine Kautschukmischung und einen Elastomer zu synthetisieren und modifizieren. Sie kennen die Anforderungen an die verschiedenen Syntheseverfahren und können im Zusammenhang mit den möglichen Anwendungsgebieten der herzustellenden polymeren Materialien deren Effizienz beurteilen. Sie können thermische Eigenschaften, wie das Schmelzverhalten und die Glasübergangstemperatur mittels DSC bestimmen und sich darüber thermodynamische Daten erschließen. Ferner sind sie in der Lage die Zusammensetzung polymerer Materialien über analytische Messanordnungen zu bestimmen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden sind in der Lage mit den Laborgeräten und Chemikalien ordnungsgemäß umzugehen und Praktikumsexperimente unter den Arbeitsschutzvorschriften sicher und sorgfältig durchzuführen. Sie arbeiten selbstständig, können Versuchsanordnungen eigenständig planen und die Zeit effizient nutzen. Sie können ihre Ergebnisse kritisch bewerten, Sachverhalte wissenschaftlich darlegen und problemorientierte Diskussionen führen.

Inhalte

Vorgesehen sind folgende Versuche

- Synthese von ausgewählten Polymeren (z. B. Polystyrol, Polyacrylate) durch Emulsions- und Lösungspolymerisation
- Herstellung einer Kautschukmischung und eines Elastomeren unter Anwendung der Schwefelvulkanisation
- Bestimmung des Molekulargewichts durch Messungen des osmotischen Drucks (Osmometrie), des Viskositätsmittels (Viskosimetrie) und der mittleren Molmasse (M_w) sowie des Molmassenzahlenmittels (M_n) durch Gelpermeationschromatographie (GPC)
- Charakterisierung der thermischen Eigenschaften von Polymeren mittels Differential Scanning Kalorimetrie (DSC)
- Schmelzpunkt- und Glasübergangstemperaturbestimmung verschiedener Polymere
- Einfluss der thermischen Vorgeschichte auf die Schmelzpunkte und -enthalpien einschließlich Bestimmung der Größe der Kristallite in den Polymerproben
- Charakterisierung der Kettenbeweglichkeit von Polymeren/Elastomeren mittels Relaxationszeit-NMR
- Ermittlung der Polymerzusammensetzung mittels Pyrolyse-GC-MS bzw. IR-Spektroskopie

Literatur

Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

Praktikum: Polymere Materialien

Angestrebte Lernziele:

Im Praktikum zur "Synthese von Polymeren und Kompositen" und zur „Polymeranalytik“ soll in Experimenten das Erlernete in praktischen Versuchen umgesetzt und vertieft werden. Dabei sollen auch erste Erfahrungen an entsprechenden in der Forschung eingesetzten Geräten in Verbindung mit spezifischen Fragestellungen erlangt werden.

Inhalte:

Vorgesehen sind folgende Versuche:

- Synthese von ausgewählten Polymeren (z. B. Polystyrol, Polyacrylate) durch Emulsions- und Lösungspolymerisation
- Herstellung einer Kautschukmischung und eines Elastomeren unter Anwendung der Schwefelvulkanisation
- Bestimmung des Molekulargewichts durch Messungen des osmotischen Drucks (Osmometrie), des Viskositätsmittels (Viskosimetrie) und der mittleren Molmasse (M_w) sowie des Molmassenzahlenmittels (M_n) durch Gelpermeationschromatographie (GPC).
- Charakterisierung der thermischen Eigenschaften von Polymeren mittels Differential Scanning Kalorimetrie (DSC). Hier soll an verschiedenen Polymeren der Schmelzpunkt bzw. die Glasübergangstemperatur bestimmt werden. weiterhin soll der Einfluss der thermischen Vorgeschichte auf die Schmelzpunkte und -enthalpien ermittelt werden und darauf auf die Größe der Kristallite in den Polymerproben geschlossen werden.
- Charakterisierung der Kettenbeweglichkeit von Polymeren/Elastomeren mittels Relaxationszeit-NMR.
- Ermittlung der Polymerzusammensetzung mittels Pyrolyse-GC-MS bzw. IR-Spektroskopie

Literatur: Empfehlenswerte weitere (aktuelle) Literatur wird zu Beginn der Veranstaltung vorgestellt.

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Quantenchemie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Quantenchemie III (2 SWS) P Quantenchemie am Rechner (5 SWS) | |
| Semester | SS / 2. Semester | |
| Verantwortliche | Frank | |
| Dozentin | Frank | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Grundkenntnisse in Mathematik und Physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung der Übungsaufgaben, erfolgreiche Erstellung von Protokollen zu den Rechner-Übungen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Vorlesung: Tafel, Overheadfolien, Arbeitsblätter Praktikum: Rechner, Arbeitsblätter | |

Vorlesung

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über das Wissen des mathematischen Ansatzes der Funktionalvariation und kennen basierend darauf den Vergleich zwischen der Hartree-Fock- und Dichtefunktionaltheorie. Außerdem beherrschen sie die Grundlagen und Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie, das Prinzip der Moleküldynamik sowie deren Kombination mit der Dichtefunktionaltheorie zur First-Principles-Moleküldynamik.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in der Lage die erlernten Theorien auf Oberflächen und Festkörper anzuwenden.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können die erlernten Theorien und ihre Zusammenhänge verbal und schriftlich darstellen sowie mit ihnen umgehen und sie zur Analyse von Oberflächen und Festkörpern anwenden.

Inhalte

- Funktionalvariation
- Orbitaltheorie
- Hartree-Fock-Gleichungen
- Kohn-Sham-Gleichungen
- Dichtefunktionale
- Bewegung auf Potentialhyperflächen
- klassische Moleküldynamik
- First-Principles-Moleküldynamik
- periodische Randbedingungen
- ebene Wellen
- Anwendung auf Oberflächen und Festkörper

Literatur

- [1] Levine, Quantum Chemistry
 [2] Parr u. Yang, Density Functional Theory for Atoms and Molecules
 [3] Szabo u. Ostlund, Modern Quantum Chemistry
 [4] Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods

Praktikum

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden verfügen über das Wissen der elementaren Linux-Befehle, der elementaren Fortran-Befehle und beherrschen die Formelprogrammierung mit Fortran. Außerdem kennen sie die Anwendungsmöglichkeiten der Programme.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in der Lage mit der Dateistruktur unter Linux und der Programmstruktur unter Fortran umzugehen und können ein einfaches Programm schreiben.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können mit den erlernten Programmen Anwendungsrechnungen durchführen, auswerten und die damit erhaltenen Ergebnisse beurteilen. Ergänzend dazu sind sie imstande die Programme in Bezug auf komplexere Situationen zu erweitern.

Inhalte

- Dateistruktur unter Linux
- elementare Linux-Befehle
- Programmstruktur unter Fortran
- elementare Fortran-Befehle
- Formelprogrammierung mit Fortran
- Schreiben eines einfachen Programms
- Erweiterung des Programms auf komplexere Situationen
- Anwendung der Programme

Literatur

Molekülspektroskopie

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|---|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Molekülspektroskopie | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Molekülspektroskopie (2 SWS) 15082 Ü Molekülspektroskopie (1 SWS) 15087 | |
| Semester | SS oder WS / 2 oder 3. Semester | |
| Verantwortlicher | Grabow | |
| Dozenten | Grabow, Becker | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 42 h Präsenzzeit 78 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 4 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter | |
| Prüfungsleistungen | Mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienform | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Präsentationen, Übungsblätter | |

| Vorlesung Molekülspektroskopie |
|--|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen Die Studierenden erwerben Grundlagen über die elektrischen Dipolübergänge und die Anwendungen der Molekülspektroskopie. Sie erlangen hierbei Kenntnisse über die Techniken und Anwendungsgebiete der Quantentheorie und die essentiellen Grundtypen molekularer Spektren am Beispiel zweiatomiger und polyatomarer Moleküle. Sie kennen die allgemeinen und speziellen Auswahlregeln spektroskopischer Übergänge und sind mit den elektronischen Zuständen vertraut.</p> <p>2.) Methodenkompetenzen Die Studierenden sind in der Lage die experimentellen Techniken in der Spektroskopie anzuwenden. Zur Erhöhung der Empfindlichkeit und besserer Rausch-Signal-Verhältnisse verstehen sie den Einsatz der FT-NMR gegenüber der CW-Technik und können elektronische Erscheinungen in Bezug auf die Transmission, Streuung und Emission beschreiben und erklären.</p> |

3.) Handlungskompetenzen

Sie sind in der Lage, Sachverhalte in der Molekülspektroskopie schriftlich sowie verbal darzustellen, vollständige Literaturrecherchen durchzuführen und auszuwerten sowie problemorientierte Diskussionen mit anderen Studierenden und fachkompetenten Mitarbeitern zu führen.

Inhalte

- Grundlagen, Techniken und Anwendungen (Ursprung, Prinzipien) der Quantentheorie
- Grundtypen molekularer Spektren (Rotations-, Vibrationsanregung)
- allgemeine wie spezielle Auswahlregeln spektroskopischer Übergänge
- elektronische Zustände und die damit verbundenen Erscheinungen
- Merkmale der Spektroskopie
 - experimentelle Techniken (CW, FT, Transmission, Streuung, Emission)
 - Linienform (Intensität, Breite)
- Kohärenz-, und LASER-Spektroskopie

Literatur

[1] P. F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules Oxford University Press; [2] J. I. Steinfeld, Molecules and Radiation, Dover Publications, allgemeine Lehrbücher der Physikalischen Chemie.

Übung Molekülspektroskopie

Qualifikationsziele

1.) Fachkompetenzen

Die Studierenden erhalten durch die Übung vertiefende Einblicke in die allgemeinen Lehrinhalte aus der Vorlesung. Sie erwerben weitgehende Kenntnisse über die grundlegenden Prinzipien der Quantenmechanik sowie deren Anwendungspotential in Hinsicht auf die Schrödinger'sche Wellenmechanik, über numerische Methoden bei der Bestimmung von zunächst stationären (zeitunabhängigen) Problemstellungen, über die spektrale Lage und Form molekularer Dipolübergänge anhand von Beispielen und über die Wechselwirkung von Molekülen mit elektromagnetischer Strahlung.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studierenden nutzen die Übungen zur Berechnung und Auswertung spezieller Beispiele und können so die Inhalte konkretisieren und verinnerlichen. Sie können mathematische Methoden auf physikalisch-chemische Aufgabenstellungen aus der Molekülspektroskopie anwenden und lösen. Sie sind in der Lage zum Lösen der Schrödinger-Gleichung die Näherungen und Störungstheorien nach z.B. Møller-Plesset anzuwenden und über die energetischen Gegebenheiten und elektronischen Strukturen auf die Eigenschaften von Atomen bzw. Molekülen schließen zu können.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können zum Lösen von Aufgabenstellungen quantentheoretische

Berechnungsmethoden anwenden und fachgerecht schriftlich sowie verbal darstellen.

Inhalte

Die Molekülspektroskopie erfordert ein tiefes Verständnis des quantenmechanischen Unterbaus, um die beobachteten Phänomene zu verstehen und quantitativ beschreiben zu können. Die Übungen demonstrieren daher

- die Prinzipien der Quantenmechanik (Impuls-, Ortskoordinaten, Unschärfe)
- die Anwendung der Quantenmechanik (Schrödinger'sche Wellenmechanik)
- Nutzung numerischer Methoden (Heisenberg'sche Matrizenmechanik) bei der Bestimmung von zunächst stationären (zeitunabhängigen) Problemstellungen
- Verdeutlichung mathematischer Näherungen und Aufzeigen derer Grenzen (Born-Oppenheimer Näherung, Störungstheorie)
- spektrale Lage und Form molekularer Dipolübergänge
- Wechselwirkung von Molekülen mit elektromagnetischer Strahlung
 - Intensität von Spektrallinien
 - Linienbreite
 - Spin-Statistik
 - Auswahlregeln
 - Zentrifugalverzerrung
 - Anharmonizität
 - instationäre (zeitabhängige) Antwort auf Störungen

Koordinationsverbindungen

| Studiengang | Master-Studiengang Material- und Nanochemie | Modul-Nr. |
|--------------------------------------|--|-----------|
| Modulbezeichnung | Wahlmodul Funktionale Koordinationsverbindungen der Übergangselemente | |
| Art der Lehrveranstaltung / SWS | V Funktionale Koordinationsverbindungen der Übergangselemente (3 SWS) 14003 P Funktionale Koordinationsverbindungen der Übergangselemente (4 SWS) 14003-P | |
| Semester | SS / 2. Semester | |
| Verantwortlicher | Renz | |
| Dozenten | Renz, Wiebcke | |
| Sprache | Deutsch | |
| Zuordnung zum Curriculum | M. Sc. Material- und Nanochemie M. Sc. Analytik M. Sc. Wirk- und Naturstoffchemie | |
| Arbeitsaufwand | 98 h Präsenzzeit 142 h Selbststudium | |
| Leistungspunkte | 8 LP | |
| Voraussetzungen nach Prüfungsordnung | Keine | |
| Empfohlene Voraussetzungen | Fortgeschrittene Kenntnisse in anorganischer, organischer und physikalischer Chemie | |
| Studienleistungen | Erfolgreiche Durchführung aller vorgegebenen Versuche, erfolgreiche Erstellung der Protokolle zu den Versuchen | |
| Prüfungsleistungen | Klausur (2 h) oder mündliche Prüfung (30 min) über die Themengebiete des Moduls | |
| Medienformen | Tafelanschrieb, Overheadfolien, Powerpoint-Präsentation, Versuchsanleitungen zu den Laborexperimenten | |

| Vorlesung |
|---|
| <p>Qualifikationsziele</p> <p>1.) Fachkompetenzen</p> <p>Die Studierenden vertiefen ihre im Bachelor-Studium erworbenen Kenntnisse über die modernen Aspekte der Koordinationschemie der Übergangselemente. Dazu gehören eine Vielfalt an molekularen, supramolekularen und polymeren Koordinationsverbindungen und die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten als innovative Materialien, die sich aus den Eigenschaften ergeben. Außerdem kennen sie die besonderen physikalischen und chemischen Eigenschaften von Koordinationsverbindungen (Komplexe) der Übergangselemente, die auf den offenen elektronischen d-Schalen basieren.</p> |

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten können besondere analytische Verfahren zur Charakterisierung von Übergangselementverbindungen einsetzen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können Koordinationsverbindungen bzw. Übergangselementverbindungen mittels typischer analytischer Methoden wie der Mößbauerspektroskopie, der ESR-Spektroskopie, der UV/Vis-Spektroskopie oder der SQUID-Methode charakterisieren.

Inhalte

- Vielkern- und supramolekulare Komplexe
 - Rotaxane
 - Catenane
 - molekulare Gitter
 - Metallacyclen und -käfige
- kristalline und amorphe Koordinationspolymere der Übergangselemente
- moderne Verfahren zur Synthese von supramolekularen Komplexen und Koordinationspolymeren
 - supramolekulare Komplexe: Selbstorganisation, Templat-Synthesen
 - Koordinationspolymere: Kristall-Engineering, retikuläre Synthese
- magnetische und optische Eigenschaften
 - Einzelmolekülmagnete
 - Komplexe mit kooperativen magnetischen Eigenschaften wie Ferro- und Antiferromagnetismus
 - schaltbare bistabile Spin-Crossover-Komplexe
- Konzept der molekularen Maschinen in Hinblick auf supramolekulare Koordinationsverbindungen
- besondere Eigenschaften poröser Polymere (metallorganische Gerüstverbindungen)
- Einführung in die Betrachtung komplexer kristalliner Verbindungen aus geometrischer und topologischer Sicht (netzbasierte Strukturchemie)
- aktuelles Gebiet der nanoskaligen Koordinationspolymere
- typische Methoden zur Charakterisierung von Koordinationsverbindungen mit offener d-Schale
 - Mößbauer-Spektroskopie
 - ESR-Spektroskopie
 - UV/Vis-Spektroskopie
 - Methoden zur Messung der magnetischen Eigenschaften (SQUID)

Literatur

- [1] L. Gade, Koordinationschemie, Wiley-VCH, 1998
[2] C. Janiak in E. Riedel (Hrsg), Moderne Anorganische Chemie, de Gruyter, 2007
[3] Aktuelle Übersichts- und Originalartikel aus der Literatur

Praktikum**Qualifikationsziele****1.) Fachkompetenzen**

Die Studierenden kennen Methoden zur Synthese von molekularen und polymeren Koordinationsverbindungen, die durch aktuelle Beispiele veranschaulicht werden. Desweiteren verfügen sie über das Wissen von speziellen spektroskopischen (Mößbauer, UV/Vis) und magnetischen (SQUID) Verfahren zur Charakterisierung von hergestellten Verbindungen. Ergänzend wissen sie, dass die Strukturen von Materialien, von denen gewisse Eigenschaften abhängig sind, mit der Röntgen-Einkristallstrukturanalyse bestimmt werden können.

2.) Methodenkompetenzen

Die Studenten sind in der Lage Mößbauer- und UV/Vis-Spektren von hergestellten Verbindungen aufzunehmen sowie die magnetische Suszeptibilität in Abhängigkeit von der Temperatur auf einem SQUID zu messen.

3.) Handlungskompetenzen

Die Studierenden können molekulare und polymere Koordinationsverbindungen herstellen und deren spektroskopischen und magnetischen Eigenschaften sowie die Struktur der Materialien mittels der erlernten Verfahren bestimmen. Somit sind sie in der Lage molekulare und polymere Koordinationsverbindungen zu charakterisieren, deren ermittelte Eigenschaften zu erläutern, auszuwerten und zu diskutieren.

Inhalte

- Herstellung molekularer als auch polymerer Koordinationsverbindungen
 - Beispiele stammen aus den Bereichen der schaltbaren Spin-Crossover-Komplexe und porösen kristallinen Koordinationspolymere
- Standardcharakterisierung
- Aufnahme und Auswertung von Mößbauer- und UV/Vis-Spektren der hergestellten Verbindungen
- Messung der magnetischen Suszeptibilität in Abhängigkeit von der Temperatur auf einem SQUID
- Bestimmung und Beschreibung der Kristallstruktur von einem Koordinationspolymer nach Intensitätsmessungen auf einem Röntgen-Einkristalldiffraktometer

Literatur

Die Versuchsbeschreibungen und weiterführenden Literaturstellen werden bei den einzelnen Versuchen angegeben.