
Modulhandbuch

Master Materialchemie

Mathematisch-Naturwissenschaftlich- Technische Fakultät

Wintersemester 2022/2023

Die weiteren Verwendungsmöglichkeiten der Module in anderen Studiengängen können Sie im Digicampus einsehen.

Wichtige Zusatzinformation aufgrund der Corona-Pandemie:

Bitte berücksichtigen Sie, dass aufgrund der Entwicklungen der Corona-Pandemie die Angaben zu den jeweiligen Prüfungsformaten in den Modulhandbüchern ggf. noch nicht aktuell sind. Welche Prüfungsformate schließlich bei welchen Modulen möglich sein werden, wird im weiteren Verlauf des Semesters geklärt und festgelegt werden.

Übersicht nach Modulgruppen

1) 1. Chemie neuer Materialien

PHM-0268: Poröse funktionale Materialien (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	3
PHM-0269: Materialien zur elektrochemischen Energiespeicherung (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	5
PHM-0270: Computerchemie/Materialmodellierung (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	7
PHM-0271: Photonische Materialien (6 ECTS/LP, Wahlpflicht) *	9
PHM-0272: Funktionale und smarte makromolekulare Materialien (6 ECTS/LP, Wahlpflicht) *	11
PHM-0273: Metallorganische Chemie und Katalyse (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	13

2) 2. Materialchemischer Wahlbereich und Nachhaltigkeit

MRM-0087: Nachhaltige Chemie der Materialien und Ressourcen - Reaktionen und Kreisläufe (6 ECTS/LP, Wahlpflicht) *	15
MRM-0141: Wasserstoff-Chemie und Technologie (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	17
MRM-0149: Magnetische, nanoskalige und multifunktionale Materialien (6 ECTS/LP).....	19
PHM-0274: Materialien unter extremen Bedingungen (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	21
PHM-0275: Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften (6 ECTS/LP, Wahlpflicht) *	23
PHM-0276: Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften (6 ECTS/LP, Wahlpflicht) *	25
PHM-0277: Grundzüge der Seltenerdchemie (6 ECTS/LP, Wahlpflicht).....	27

3) 3. Materialchemische Methoden

PHM-0278: Materialchemische Methoden (12 ECTS/LP, Pflicht) *	29
--	----

4) 4. Wissenschaftliches Arbeiten und Präsentieren

PHM-0279: Forschungsprojekt (12 ECTS/LP, Pflicht).....	31
PHM-0280: Seminar Materialchemie (6 ECTS/LP, Pflicht) *	32

5) 5. Abschlussleistungen

PHM-0281: Masterarbeit (26 ECTS/LP, Pflicht).....	34
PHM-0282: Kolloquium (4 ECTS/LP, Pflicht).....	36

* = Im aktuellen Semester wird mindestens eine Lehrveranstaltung für dieses Modul angeboten

Modul PHM-0268: Poröse funktionale Materialien <i>Porous Functional Materials</i>	6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Dirk Volkmer	
Inhalte: (i) Einleitung und historischer Überblick (ii) Theorie (1) Wichtige Klassen poröser Materialien: Strukturen und Herstellungsmethoden a) Zeolithe, MCM-Materialien und silikatische Aergel b) Poröse Kohlenstoffe u. Kohlenstoffnitride c) Metall-Organische Gerüstverbindungen (MOFs) d) Kovalente Organische Gerüstverbindungen e) Poröse Flüssigkeiten und Gläser f) Flexible und Stimulus-responsive poröse Materialien (2) Physisorption in porösen Materialien a) Instrumentelle Methoden zur Bestimmung von spezifischer Oberfläche und Porosität b) Auswertung von Physisorptionsisothermen c) Atomistische Modellierung von Diffusion und Stofftransport (3) Ausgewählte Methoden der Struktur- und Thermoanalytik zur Charakterisierung poröser Materialien a) Thermoanalytische Methoden b) Dynamische Chemisorptionsanalyse c) Multikomponenten-Gasadsorption, Durchbruchkurven und IAST (iii) Anwendungen (4) Speicherung chemischer Stoffe in porösen Materialien a) Speicherung von wichtigen Energieträgern (H ₂ /Methan) b) CO ₂ -Fixierung c) Pharmakologischer Wirkstofftransport u.-freisetzung (5) Stofftrennprozesse a) Poröse Materialien in industriellen Trennprozessen b) Membran-Trenntechnologie (6) Heterogene Katalyse a) Zeolithe in der industriellen Katalyse b) Photokatalyse u. künstl. Photosynthese (7) Integration poröser Materialien in integrierte Schaltkreise und Sensoren	
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden wissen die Designprinzipien, Herstellungs- und Charakterisierungsmethoden poröser Materialien, • wissen wichtige technische Anwendungen poröser Materialien • besitzen die Fertigkeit zur atomistischen Modellierung von porösen Materialien und Sorptionsprozessen • besitzen die Fertigkeit zur mathematischen Auswertung von Sorptions-analytischen Daten zur Bestimmung der spezifischen Oberfläche und Porosität der Materialien • besitzen Kompetenzen in der selbstständigen Bearbeitung von Problemstellungen aus den genannten Themenbereichen 	
Bemerkung: Das Modul kann in den Studiengängen Master Materialchemie und Master Materials Science and Engineering belegt werden	
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium)	

30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 60 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 3.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	

Modulteile
Modulteil: Poröse funktionale Materialien Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3
Lehr-/Lernmethoden: Beamerpräsentation, Blended Learning
Modulteil: Übung zu Poröse funktionale Materialien Lehrformen: Übung Sprache: Deutsch SWS: 1
Lehr-/Lernmethoden: Tutorium, Beamerpräsentationen, Tafelanschrieb
Literatur: <ul style="list-style-type: none"> • Pascal Van Der Voort, Karen Leus, Els De Canck, Introduction to Porous Materials (Wiley, 1. Ausgabe 2019), ISBN-13 # : # 978-1119426608

Prüfung Poröse funktionale Materialien Mündliche Prüfung, Einzel oder Gruppenprüfung (Prüfungsdauer pro Person) / Prüfungsdauer: 30 Minuten

Modul PHM-0269: Materialien zur elektrochemischen Energiespeicherung <i>Materials for electrochemical energy storage</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Leo van Wüllen		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • elektrochemische Grundlagen • elektrochemische Energiespeicher: Superkondensatoren und Batterien • Batteriesysteme • Li-Ionen-Batterien • Redox-flow-Batterien • Metall-Fluorid-Batterien • Neue Materialien für Anode, Kathode, Elektrolyt und Separator 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • kennen die grundlegenden Konzepte zur elektrochemischen Energiespeicherung • erhalten spezifische Kenntnisse über die wichtigsten aktuellen Batterie- und Akkumulatorsysteme • erhalten die Fertigkeit, für spezifische Einsatzfelder die geeigneten Batteriesysteme zu identifizieren • erwerben die Kompetenz, Materialien hinsichtlich ihrer Eignung als Anoden-, Kathoden- und Elektrolytmaterialien auszuwählen und zu beurteilen • Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Fähigkeit sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen aktiv zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen anzuwenden 		
Bemerkung: Das Modul kann auch im Studiengang Master Materials Science and Engineering belegt werden.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 120 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Sommersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Materialien zur elektrochemischen Energiespeicherung Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Inhalte: siehe Modulbeschreibung		

Literatur:

Hamann, C. H., Vielstich, W. (2005). *Elektrochemie*. (4. Auflage) Wiley-VCH Verlag GmbH.
Job, R. (2020). *Electrochemical Energy Storage*. Walter de Gruyter GmbH.
Kurzweil, P. (2015). *Elektrochemische Speicher: Superkondensatoren, Batterien, Elektrolyse-Wasserstoff, Rechtliche Rahmenbedingungen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Modulteil: Übung zu Materialien zur elektrochemischen Energiespeicherung

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

SWS: 1

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Prüfung

Materialien zur elektrochemischen Energiespeicherung

Mündliche Prüfung, Einzel- oder Gruppenprüfung; Prüfungsdauer pro Person: 30 Minuten

Modul PHM-0270: Computerchemie/Materialmodellierung <i>Computational Chemistry and Material Modeling</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Georg Eickerling		
Inhalte: Die Vorlesung bietet einen vertiefenden Einblick in die Computerchemie und die Methoden zur Modellierung von Molekül- und Festkörpermaterialien: <ul style="list-style-type: none"> • Fortgeschrittene Einführung in die Methoden und Konzepte quantenchemischer Rechnungen zur Modellierung von Materialien • <i>mean-field</i> und Dichtefunktionalmethoden • Methoden zur Beschreibung der elektronischen Korrelation • Modellierung chemischer Reaktionsmechanismen molekularer Verbindungen • Von Molekülen zu Festkörpern: Materialmodellierung unter periodischen Randbedingungen • Modellierung dynamischer und spektroskopischer Eigenschaften von Molekülen und Festkörpern (z.B. IR, Raman, NMR, UV/VIS) • Modellierung von Materialien unter Druck • Modellierung von Oberflächen 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • kennen vertiefte Grundlagen der für die Modellierung von Festkörpern und Molekülen wesentlichen Methoden • sind kompetent, diese Methoden auf ihre Anwendbarkeit auf mögliche Fragestellungen der Materialchemie hin einzuschätzen und so z.B. die jeweils benötigte und erreichbare Genauigkeit gegeneinander abzuwägen • sind kompetent, das erworbene Verständnis der theoretischen Grundlagen der Methoden bei der praktischen Durchführung von quantenchemischen Rechnungen und Modellierungen anzuwenden und so unter Anleitung Lösungsstrategien für theoretische Fragestellungen der Materialchemie zu entwerfen • können die aus quantenchemischen Rechnungen erhaltenen Ergebnisse analysieren • sind kompetent, die theoretischen Ergebnisse z.B. im Hinblick auf z.B. vorliegende experimentelle Daten zu evaluieren und daraus unter Anleitung die weitergehenden Schritte einer theoretischen Studie zu planen 		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 60 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes inkl. Prüfungsvorbereitung (Selbststudium)		
Voraussetzungen: Es wird empfohlen, zuvor das Modul PHM-0248 zu absolvieren.		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Sommersemester	Empfohlenes Fachsemester:	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	

Moduleile
<p>Moduleil: Computerchemie/Materialmodellierung Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3</p>
<p>Inhalte: siehe Modulbeschreibung</p>
<p>Lehr-/Lernmethoden: Beamerpräsentation, Tafelanschrieb</p>
<p>Literatur:</p> <ul style="list-style-type: none"> • I. N. Levine <i>Quantum Chemistry</i>, 7th Ed., Pearson, Boston, US 2013. • A. Szabo, N. S. Ostlund <i>Modern Quantum Chemistry</i>, Dover, NY, US 1996. • E. G. Lewars <i>Computational Chemistry</i>, 3rd Ed., Springer, Cham, Switzerland, 2016. • D. C. Young <i>Computational Chemistry: A practical guide for applying techniques to real world problems</i>, Wiley, NY, US 2001. • R. A. van Santen, Ph. Sautet <i>Computational Methods in Catalysis and Materials Science</i>, Wiley, Weinheim, Deutschland, 2009. • J. B. Foresman, <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>, 3rd Ed., Gaussian Inc., Wallingford, US, 2015.
<p>Moduleil: Übung zu Computerchemie/Materialmodellierung Lehrformen: Übung Sprache: Deutsch SWS: 1</p>
<p>Lehr-/Lernmethoden: Beamerpräsentationen, Tafelanschrieb, praktische Übungen am Computer</p>
<p>Prüfung Computerchemie/Materialmodellierung Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten</p>

Modul PHM-0271: Photonische Materialien <i>Photonic Materials</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Henning Höppe		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Einführung in grundlegende Konzepte • Silicatanaloge Materialien und Halbleiter • Lumineszierende Materialien • Pigmente • Anwendungsbeispiele • Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis 		
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden kennen die grundlegenden theoretischen Konzepte (wie Ligandenfeld- und Bändertheorie), die zur Beschreibung charakteristischer Bindungsverhältnisse in Festkörpern notwendig sind; sie sind vertraut mit den Ordnungsprinzipien in Festkörpern (Kristallographie und Gruppentheorie) und verfügen über Grundkenntnisse in Stoffchemie und Festkörpersynthesen • Die Studierenden können die optischen Eigenschaften photonischer Materialien erklären und analysieren. • Sie erwerben die Kompetenz, ausgehend von bekannten Materialien die Eigenschaften neuer Verbindungen abzuschätzen und einen sinnvollen synthetisch-strategischen Zugang zu diesen Verbindungen zu erarbeiten. • Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Fähigkeit sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen aktiv zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen anzuwenden 		
Bemerkung: Das Modul kann in den Studiengängen Master Materialchemie und Master Materials Science and Engineering belegt werden.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 80 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Photonische Materialien Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Inhalte: siehe Modulbeschreibung		

Literatur:

- W. Yen, S. Shionoya, H. Yamamoto, Phosphor Handbook, The CRC Press laser and optical science and technology series, CRC Press/Taylor and Francis, 2007.
- B. Henderson und G. Imbusch, Optical spectroscopy of inorganic solids, Monographs on the Physics and Chemistry of Materials, Oxford University Press, 2006.
- A. Fox, Optical Properties of Solids, Oxford master series in condensed matter physics, Oxford University Press, 2001.
- weitere wird in der Vorlesung bekanntgegeben

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Photonische Materialien (Vorlesung)

Modulteil: Übung zu Photonische Materialien

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

SWS: 1

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Prüfung

Photonische Materialien

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0272: Funktionale und smarte makromolekulare Materialien <i>Functional and smart macromolecular materials</i>	6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: PD Dr. Klaus Ruhland	
Inhalte: (1) Elektro-aktive polymere Materialien <ul style="list-style-type: none"> • Intrinsisch elektrisch leitende Polymere (ICPs) • Wirkmechanismen von ICPs in ausgewählten Anwendungen • Red/Ox-responsive ICPs • Elektrochromismus • Elektroaktive Aktuatoren • Nicht elektrisch-leitende elektrisch funktionale Polymere • Ferroelektrische Polymere • Piezoelektrische Polymere • Dielektrische Elastomere (2) Thermo-aktive polymere Materialien <ul style="list-style-type: none"> • Abgrenzung Invertierbarkeit und Reversibilität • Pyro-elektrischer Effekt vs elektro-kalorischer Effekt • Hoch-Temperatur-stabile Polymere • Thermochrome Polymere (3) Mechano-aktive polymere Materialien <ul style="list-style-type: none"> • Shape-Memory-Polymere • Selbst-heilende Polymere (4) Photo-aktive polymere Materialien <ul style="list-style-type: none"> • Wichtige Chromophore und Schaltmechanismen • Photoschaltbare Polymerisationsinitiatoren und -katalysatoren (5) Smarte Polymer-Gele <ul style="list-style-type: none"> • Thermo-responsive Polymergele (LCST/UCST) • Elektrisch geladene Polymergele • pH-responsive Polymergele 	
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden erwerben die Kenntnis darüber, welche funktionalen und smarten Eigenschaften in makromolekulare Materialien eingebaut werden können und über welche externen Stimuli sie aktiviert werden können. Sie entwickeln die Fertigkeit zwischen unterschiedlichen Mechanismen, mit denen man smartes Verhalten in makromolekulare Materialien einbauen kann, zu unterscheiden und Abhängigkeiten zwischen externen Stimuli zu erkennen. Sie erhalten die Kompetenz, smarte, funktionale multi-responsive makromolekulare Materialien zu designen, die einen speziellen Anwendungsaspekt zeit- und ort-abhängig unterstützen. Beispiele für derartige Anwendungen werden präsentiert und besprochen.	
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 80 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium)	

60 Std. Vorlesung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	

Modulteile**Modulteil: Funktionale und smarte makromolekulare Materialien****Lehrformen:** Vorlesung**Sprache:** Deutsch**Lernziele:**

siehe Modulbeschreibung

Inhalte:

siehe Modulbeschreibung

Literatur:

Smart Polymers and their Applications; M. R. Aguilar, J. S. Roman (ISBN 978-0-85709-695-1)
 Functional Monomers and Polymers; K. Takemoto, R. M. Ottenbrite, M. Kamachi (ISBN 0-8247-9991-7)
 Biomedical Applications of Electroactive Polymer Actuators; F. Carpi, E. Smela (ISBN 978-0-470-77305-5)
 Smart Polymers; I. Galaev, B. Mattiasson (ISBN 978-0-8493-9161-3)
 Semiconducting and Metallic Polymers; A. J. Heeger, N. S. Sariciftci, E. B. Namdas (ISBN 978-0-19-852864-7)
 Polymers and Light; W. Schnabel (ISBN 978-3-527-31866-7)
 Shape Memory Polymers; J. Hu (ISBN 978-1-90903-050-3)
 Polymer Materials with Smart Properties; M. Bercea (ISBN 978-1-62808-876-2)
 Self-healing Materials; K. Ghosh (ISBN 978-3-527-31829-2)
 Self-Healing Polymers; W. H. Binder (ISBN 978-3-527-33439-1)
 High Performance Polymers; J. K. Fink (ISBN 978-0-8155-1580-7)
 Functional Coatings; S. K. Ghosh (ISBN 978-3-527-31296-2)
 Handbook of Stimuli-Responsive Materials; M. W. Urban (ISBN 978-3-527-32700-3)
 Renewable Resources for Functional Polymers and Biomaterials; P. A. Williams (ISBN 978-1-84973-245-1)
 Thermochromic and Thermotropic Materials; A. Seeboth, D. Löttsch (ISBN 978-981-4411-02-8)
 Thermochromic Phenomena in Polymers; A. Seeboth, D. Löttsch (ISBN 978-1-84735-112-8)
 Shape-Memory Polymers for Aerospace Applications; G. P. Tandon, A. J. W. McClung, J. W. Baur (ISBN 978-1-60595-118-8)
 Polymer Mechanochemistry; R. Boulatov (ISBN 978-3-319-22824-2)

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:**Funktionale und smarte makromolekulare Materialien** (Vorlesung)**Prüfung****Funktionale und smarte makromolekulare Materialien**

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0273: Metallorganische Chemie und Katalyse <i>Organometallic chemistry and catalysis</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Wolfgang Scherer		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Einführung in die metallorganische Chemie: Bindungsverhältnisse, Strukturchemie, Stoffklassen • Synthese und Charakterisierung mittels Infrarot-, Raman- und NMR-Spektroskopie • Metallorganische Chemie von Hauptgruppen- und Nebengruppenelementen inklusive Lanthanoide/Actinoide • Grundlagen der metallorganischen Katalyse • Industrielle Anwendungen 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • erlangen Grundkenntnisse in der Synthese und Charakterisierung metallorganischer Komplexe. • kennen die grundlegenden Konzepte (Molekülorbitaltheorie, Ligandenfeldtheorie, spektroskopische Methoden), die zum Verständnis der komplexen Bindungsverhältnisse und der Strukturchemie metallorganischer Komplexe notwendig sind. • erlangen im Falle großtechnischer homogener Katalyseverfahren einen vertieften Einblick in die zugrundeliegenden mikroskopischen Mechanismen. • erlernen grundlegende Strategien, um die elektronische Struktur metallorganischer Verbindungen für katalytische Anwendungen maßzuschneidern. Damit erwerben sie die Schlüsselqualifikation, sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen zur Lösung anwendungsorientierter Fragestellung, wie dem Design von homogenen Katalysatoren, umzusetzen. 		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 60 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Sommersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 2.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Metallorganische Chemie und Katalyse Lehrformen: Übung Sprache: Deutsch SWS: 1		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Modulteil: Metallorganische Chemie und Katalyse Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Inhalte:

siehe Modulbeschreibung

Lehr-/Lernmethoden:

Vorlesung, Beamerpräsentation, Tafelanschrieb

Literatur:

- D. Steinborn, *Grundlagen der metallorganischen Komplexkatalyse*, SpringerSpektrum, 3. Auflage, 2019.
- Ch. Elschenbroich, *Organometallics*, WILEY-VCH, 3rdEd., 2006.
- R.H. Crabtree, *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals*, John Wiley & Sons, Inc., 3rdEd., 2001.
- J. Hartwig, *Organotransition Metal Chemistry*, University Science Books, 1stEd., 2010.
- C. Janiak, H.-J. Meyer, D. Gudat, R. Alsfasser, *Moderne Anorganische Chemie*, 4. Auflage, De Gruyter, ebook, 2012.
- N. Wiberg, *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, Walter de Gruyter, ebook, 102. Auflage, 2007.

Prüfung

Metallorganische Chemie und Katalyse

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul MRM-0087: Nachhaltige Chemie der Materialien und Ressourcen - Reaktionen und Kreisläufe <i>Sustainable Chemistry of Materials and Resources - Chemical Reactions and Cycles</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe16) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Richard Wehrich		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Introduction: resources and materials • Demand of resources and materials: principles and megatrends • Sustainability, criticality and resource efficiency: principles and concepts • Mining, preparation, and processing of raw materials like Si, Fe, Cu, Al, Ga, Ag, Au, Pt • Methods of separation and purification of raw materials • Methods of synthesis and preparations of functional materials from solid, liquid, and gaseous phase • Thermodynamics, kinetics, and reversibility of chemical reactions • Recycling, and circular use of resources 		
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • The students know the basic terms and concepts of sustainability, criticality and use of materials and resources • The students know the basic terms and concepts of chemical processing of raw and functional materials • The students have the competence to explain chemical processes of purification and preparation and describe their specific use. • The students are able to describe need of resources and energy of relevant processes. • The students are able to classify materials and processes with respect to sustainability, demand of raw materials, and circularity. • The students acquire scientific skills to search for scientific literature and to evaluate scientific content. 		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std.		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 4.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: beliebig	
Modulteile		
Modulteil: Nachhaltige Chemie der Materialien und Ressourcen - Reaktionen und Kreisläufe Lehrformen: Vorlesung Sprache: Englisch / Deutsch SWS: 2		

Literatur:

- A. Reller, M. Marschall, S. Meißner, C. Schmid, Ressourcenstrategien, Eine Einführung in den nachhaltigen Umgang mit Ressourcen, wbg Academic in Wissenschaftliche Buchgesellschaft 2013, ISBN: 3534259149.
- U. Schubert, N. Hüsing, Synthesis of Inorganic Materials, 4. Aufl. 2019, Wiley-VCH, ISBN: # 3527344578;
- A. R. West, Solid State Chemistry and its Applications, 2nd Edition, Student Edition, ISBN: 978-1-119-94294-8, 584, 2014;
- A. R. West, Solid State Chemistry and its Applications, Wiley, 2022, ISBN: 1118447441.
- A. Wold, K. Dwight, Solid State Chemistry: Synthesis, Springer, 2009, ISBN 978-0412036217;
- T. E. Warner, Synthesis, Properties and Mineralogy of Important Inorganic Materials, Wiley, 2011, ISBN 978-0470746110;
- G. Kickelbick, Hybrid Materials: Synthesis, Characterisation and Applications, 2006, ISBN 978-3527312993;
- D. Vollath, Nanomaterials: An Introduction to Synthesis, Properties, and Applications, Wiley-VCH, 2013, 978-3527333790;
- M. Bertau, A. Müller, P. Fröhlich, M. Katzberg, Industrielle Anorg. Chemie, Wiley-VCH, 2013, ISBN 978-3527330195;

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Nachhaltige Chemie der Materialien und der Ressourcen – Reaktionen und Kreisläufe (Vorlesung)

Übung: Nachhaltige Chemie der Materialien und der Ressourcen – Reaktionen und Kreisläufe (Übung)

Prüfung

Nachhaltige Chemie der Materialien und Ressourcen - Reaktionen und Kreisläufe

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modulteile

Modulteil: Übung zu Nachhaltige Chemie der Materialien und Ressourcen - Reaktionen und Kreisläufe

Lehrformen: Übung

Sprache: Englisch / Deutsch

SWS: 2

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Nachhaltige Chemie der Materialien und der Ressourcen – Reaktionen und Kreisläufe (Vorlesung)

Übung: Nachhaltige Chemie der Materialien und der Ressourcen – Reaktionen und Kreisläufe (Übung)

Modul MRM-0141: Wasserstoff-Chemie und Technologie <i>Hydrogen - chemistry and technology</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe21) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Richard Wehrich		
Inhalte: Das Modul führt in die relevante Chemie und Technologie des Wasserstoffs ein. Ein Schwerpunkt liegt dabei einer anwendungsnahen Betrachtung von CO ₂ -freier oder –reduzierter Nutzung für Energie- und andere Einsatzgebiete. Die Vorlesung betrachtet chemische Grundlagen, Quellen und Prozesse der Gewinnung des Elements. Dann folgen Methoden von Speicherung und Transport inklusive Power-to-X-Konzepten. Konzepte der Anwendung beinhalten Energiewirtschaft für stationäre und mobile Anwendungen vom PKW bis zur Rakete, chemische und technische Prozesse mit Wasserstoff sowie Möglichkeiten der Sektorkopplung. Das letzte Kapitel bespricht Energie- und Ressourcen-Bilanzen: <ol style="list-style-type: none"> 1. Chemische und physikalische Eigenschaften des Wasserstoffs 2. Gewinnung von Wasserstoff, Elektrolyse, Hydrolyse, Pyrolyse 3. Speicherung und Transport von Wasserstoff mit Power-2-X-Konzepten 4. Energetische und nicht energetische Nutzung von Wasserstoff inkl. Brennstoffzelle 5. Sektorkopplung und E-Bilanzen 		
Lernziele/Kompetenzen: Kenntnisse: Die Studierenden verstehen Prinzipien und Konzepte zur Gewinnung, Speicherung und Nutzung von Wasserstoff. Fertigkeiten: Die Studierenden können die Konzepte, Prinzipien und Technologien erklären, Input- und Output-Stoffströme beschreiben und Energiebilanzen erstellen. Kompetenzen: Die Studierenden beherrschen die Beschreibung der Technologien und den Umgang mit Stoff- und Energieberechnungen. Damit können sie für verschiedene Anwendungsfälle Konzepte der Sektorkopplung erstellen, Material- und Energiebedarf berechnen. Sie beherrschen die Grundlagen für den Einstieg in die Forschung zu Wasserstoff-relevanten Materialien.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std.		
Voraussetzungen: Chemie 1		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Sommersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Wasserstoff-Chemie und Technologie Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 2		

Literatur:

- Th. Schmidt: Wasserstofftechnik, Hanser Verlag, 2020, ISBN: 3446460012
- L. M. Gand, Renewable Hydrogen Technologies, Elsevier, 2013, ISBN: 0444563520.
- A. Godula-Jopek, W. Jehle, J. Wellnitz, Hydrogen Storage Technologies New Materials, Transport and Infrastructure, 2012, ISBN: 978-3-527-32683-9.
- D. Stolten, B. Emonts, Hydrogen Science and Engineering, Wiley-Verlag, 2016, ISBN: 978-3-527-33238-0
- M. Hirscher, Handbook of Hydrogen Storage, Wiley, 2010, ISBN: 978-3-527-32273-2
- P. Kurzweil, Brennstoffzellentechnik: Grundlagen, Materialien, Anwendungen, Springer, 2016, 978-3658149345.
- J. Töpler, J. Lehmann, Wasserstoff und Brennstoffzellentechnik, 2017, ISBN 9 78-3662533598.

Prüfung

Wasserstoff-Chemie und Technologie (Klausur)

Klausur / Prüfungsdauer: 60 Minuten

Modulteile

Modulteil: Wasserstoff-Chemie und Technologie

Lehrformen: Seminar

Sprache: Deutsch

SWS: 2

Prüfung

Wasserstoff-Chemie und Technologie

Präsentation

Modul MRM-0149: Magnetische, nanoskalige und multifunktionale Materialien		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Richard Wehrich		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Einführung: nanostrukturierte Materialien • Nanoskalige 0D, 1D und 2D periodische Strukturen und chemische Bindungen • Synthese von Nanopartikeln • Größenabhängige isotrope und anisotrope Eigenschaften • Mechanische und Struktur-Eigenschaften • Magnetismus und magnetische Eigenschaften • Elektrische Eigenschaften • Multiferroica und multifunktionale Eigenschaften 		
Lernziele/Kompetenzen: Kenntnisse: Die Studierenden verstehen, was nano-, 1D- und 2D strukturierte Materialien sind. Fertigkeiten: Die Studierenden beherrschen die Beschreibung von Strukturen-Eigenschafts-Beziehungen, insbesondere mit Bezug auf nanoskalige und niedrigdimensionale Strukturen. Kompetenzen: Die Studierenden können die gewonnenen Fähigkeiten zum Verständnis neuer Materialien anwenden. Sie können komplexe Eigenschaften von Materialien verstehen und werden auf eigene Forschungs-Arbeiten auf verwandten Gebieten vorbereitet. Die Studierenden haben die Fähigkeit, relevante Fachliteratur selbst zu recherchieren.		
Bemerkung: Anmeldung über Digicampus erforderlich		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std.		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 3.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Magnetische, nanoskalige und multifunktionale Materialien Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch		
Lernziele: Siehe Modulbeschreibung		
Inhalte: Siehe Modulbeschreibung		

Literatur:

- D. Vollath, Nanomaterials: An Introduction to Synthesis, Properties, and Applications, Wiley-VCH, 2013, 978-3527333790;
- R. E. Newnham, Properties of Materials: Anisotropy, Symmetry, Structure, Oxford university press, 2005, ISBN: 019852076X
- W. D. Callister, D. G. Rethwisch, Callister's Materials Science and Engineering: Global Edition, Wiley, 2020, ISBN: # 1119453917
- G. A. Ozin, A. C. Arsenault, L Cademartiri, Nanochemistry: A Chemical Approach to Nanomaterials, Royal Society of Chemistry, 2009, ISBN: 978-1847558954.
- L. Cademartiri, G. A. Ozin, J.-M. Lehn, Concepts of Nanochemistry, 2009, ISBN: 978-3-527-32597-9.
- K. J. Klabude, G. B. Sergeev, Nanochemistry, Elsevier, 2013
- C. N. R. Rao, A. Müller, A. K. Cheetham. The Chemistry of Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications, Wiley, 2004, ISBN: 978-3-527-30686-2.
- R. Jelinek, Nanoparticles, De Gruyter, 2015, ISBN: 9783110330021.
- J. H. Wendorff, Nanotechnologie, De Gruyter, 2020, ISBN: 9783899496192.
- Q. Wang, Z. Zhong, Environmental Functional Nanomaterials, De Gruyter, 2020, ISBN: 9783110544183.
- T. Blachowicz, A. Ehrmann, Spintronics, Theory, Modelling, Devices, De Gruyter, 2020, ISBN: 9783110490633.
- M. D. Köhler, W. Fritsche, Nanotechnology: An Introduction to Nanostructuring Techniques, Second Edition, Wiley, 2007, ISBN:9783527318711.
- S. E. Hunyadi Murph, G. K. Larsen, K. J. Coopersmith, Anisotropic and Shape-Selective Nanomaterials, Springer, 2017, ISBN: 978-3-319-59662-4.
- S. Elliott, The Physics and Chemistry of Solids, Wiley-VCH, 1998, ISBN 978-0471981954;

Prüfung

Magnetische, nanoskalige und multifunktionale Materialien

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modulteile

Modulteil: Magnetische, nanoskalige und multifunktionale Materialien

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

Modul PHM-0274: Materialien unter extremen Bedingungen <i>Materials under extreme conditions</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Wolfgang Scherer		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Einführung in die Hochtemperatur- und Hochdruckchemie in Lösung und im Festkörper • Experimentelle Techniken zur Synthese und Charakterisierungen von Materialien unter extremen Bedingungen • Einfluss von Druck und Temperatur auf die Reaktionen anorganischer und organischer Verbindungen • Materialeigenschaften und physikalischen Eigenschaften von Festkörpern unter extremen Bedingungen • Anwendungen in der Hochdruckchemie und Design von Materialien 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • erlangen Grundkenntnisse in der Synthese und <i>in-situ</i> Charakterisierung von Festkörpern und molekularen Materialien bei hohem Druck und hohen Temperaturen. • kennen die grundlegenden Konzepte, die zum Verständnis der komplexen Bindungsverhältnisse, Strukturchemie und physikalischer Eigenschaften von Materialien unter extremen Bedingungen unabdingbar sind: <ul style="list-style-type: none"> - Molekülorbitaltheorie - Bandstrukturanalyse - Ligandenfeldtheorie - spektroskopische Methoden - Beugungsmethoden • erlangen die Fähigkeit strukturelle und physikalische Phasenübergänge in Abhängigkeit von Druck und Temperatur zu analysieren und interpretieren. • können grundlegende Strategien anwenden, um die elektronische Struktur von Festkörpern und damit die Materialeigenschaften in Abhängigkeit externer Kontrollparameter (Druck, Temperatur) maßzuschneidern. Damit erwerben sie die Schlüsselqualifikation, sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen zur Lösung anwendungsorientierter Fragestellungen, wie dem Design von Materialien mit maßgeschneiderten physikalischen Eigenschaften, umzusetzen. 		
Bemerkung: Das Modul kann in den Studiengängen Master "Materialchemie" und Master "Materials Science and Engineering" belegt werden.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 60 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 3.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	

Modulteile
Modulteil: Materialien unter extremen Bedingungen Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3
Lernziele: siehe Modulbeschreibung
Inhalte: siehe Modulbeschreibung
Lehr-/Lernmethoden: Vorlesung, Beamerpräsentation, Tafelanschrieb
Literatur: <ul style="list-style-type: none">• R. van Eldik, F.-G. Klärner, <i>High Pressure Chemistry: Synthetic, Mechanistic, and Supercritical Applications</i>, WILEY-VCH, 1st Ed., 2002• V.D. Blank, E.I. Estrin, <i>Phase Transitions in Solids Under High Pressure</i>, CRC Press, 1st Ed., 2014.• J. Gilman, <i>Electronic Basis of the Strength of Materials</i>, Cambridge, 1st Ed., 2014.• R. M. Hazen, R. T. Downs, <i>High-Temperature and High-Pressure Crystal Chemistry</i>, Mineralogical Society of America, 2000.• U. Schubert, N. Hüsing, <i>Synthesis of Inorganic Materials</i>, Wiley-VCH, 3rd Edition, 2012.• N. Wiberg, <i>Lehrbuch der Anorganischen Chemie</i>, Walter de Gruyter, ebook, 102. Auflage, 2007.
Modulteil: Übungen zu Materialien unter extremen Bedingungen Lehrformen: Übung Sprache: Deutsch SWS: 1
Lernziele: siehe Modulbeschreibung
Prüfung Materialien unter extremen Bedingungen Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0275: Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften <i>Modern Solid State NMR Methods in Materials Science</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Leo van Wüllen		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Grundlagen der NMR-Spektroskopie • Gepulste NMR-Methoden; Fourier-Transform-NMR • Interne Wechselwirkungen • Magic Angle Spinning • Einsatz moderner NMR-Strategien in den Materialwissenschaften – Aufklärung von Struktur und Dynamik in Materialien 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • kennen die grundlegenden Konzepte der modernen NMR-Spektroskopie • kennen neuere Methoden, um interne Wechselwirkungen (chem. Verschiebung, homo- und heteronukleare Dipolwechselwirkung, Quadrupolwechselwirkung) selektiv zu ermitteln • besitzen die Fertigkeit, um mit den erlernten Verfahren spezifische Informationen zur Struktur und Dynamik des untersuchten Materials zu erlangen • erwerben die Kompetenz, aus der Vielzahl der vorhandenen experimentellen Ansätze geeignete Methoden für eine spezifische Fragestellung selbständig auszuwählen • Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Fähigkeit sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen aktiv zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen anzuwenden 		
Bemerkung: Das Modul kann auch im Studiengang Master Materials Science and Engineering belegt werden.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 120 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften (Vorlesung) Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Inhalte: siehe Modulbeschreibung		

Literatur:

Levitt, M. (2008) Spin Dynamics (2nd edition). John Wiley & Sons, Ltd.

Duer, M. (2004) Introduction to Solid-State NMR Spectroscopy. Blackwell Publishin Ltd.

Keeler, J. (2010) Understanding NMR Spectroscopy (2nd edition). John Wiley & Sons, Ltd.

Friebolin, H. (2013) Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie (5. Auflage). Wiley-VCH Verlag GmbH

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften (Vorlesung) (Vorlesung)

Modulteil: Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften (Übung)

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

SWS: 1

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften (Übung) (Übung)

Prüfung

Moderne FK-NMR-Methoden in den Materialwissenschaften

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0276: Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften <i>Modern Diffraction Techniques in Materials Science</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Georg Eickerling		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Das Modell unabhängiger Atome in der Röntgendiffraktion • Statische und dynamische Strukturfaktoren • Grenzen und Zusammenbruch des Modells unabhängiger Atome • Der kappa-Formalismus zur Beschreibung des Atomformfaktors • Die Multipolentwicklung der Elektronendichte: Das Hansen-Coppens Modell • Ausblick: X-ray constrained wave functions • Anwendungen: Kombinierte experimentelle und theoretische Elektronendichtestudien 		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • Erwerben die grundlegenden Kompetenzen zur Rekonstruktion hochgenauer Elektronendichteverteilungen aus Röntgendiffraktionsdaten • Kennen die Grundlagen der Quantentheorie der Atome in Molekülen • Sind kompetent, unter Anleitung die Topologie der Elektronendichte zu analysieren und diese mit den chemischen Eigenschaften von Materialien zu korrelieren. 		
Bemerkung: In the winter term 2022/23 the module will be offered in English language.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 90 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 30 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Moduleile		
Modulteil: Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		
Lehr-/Lernmethoden: Tafelanschrieb, Beamerpräsentation		
Literatur: <ul style="list-style-type: none"> • C. Giacovazzo et al., Fundamentals of Crystallography, Oxford Univ. Press, 2011. • P. Popelier, Atoms in Molecules: An Introduction, Longman, 1999. • P. Coppens, X-ray Charge Densities and Chemical Bonding, Oxford Univ. Press, 1997. 		

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften (Vorlesung)

Modulteil: Übung zu Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

SWS: 1

Lehr-/Lernmethoden:

Tafelanschrieb, Beamerpräsentation, praktische Arbeiten am Computer

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Übung zu Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften (Übung)

Prüfung

Moderne Diffraktionsmethoden in den Materialwissenschaften

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0277: Grundzüge der Seltenerdchemie <i>Introduction to Rare-Earth Chemistry</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Henning Höppe		
Inhalte: <ul style="list-style-type: none"> • Einführung in grundlegende Konzepte • Reindarstellung der Elemente, Verfügbarkeit, Umweltaspekte, Ressourcenaspekte • Grundzüge der Stoffchemie der Seltenerdelemente • Lumineszierende Seltenerdverbindungen • Magnetisch bedeutsame Seltenerdverbindungen • Katalyse mit Seltenerdverbindungen • Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis 		
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden kennen die grundlegenden theoretischen Konzepte (wie Ligandenfeld- und Bändertheorie), die zur Beschreibung charakteristischer Bindungsverhältnisse in Festkörpern notwendig sind; sie sind vertraut mit den Ordnungsprinzipien in Festkörpern (Kristallographie und Gruppentheorie) und verfügen über Grundkenntnisse in Stoffchemie und Festkörpersynthesen • Die Studierenden können die chemischen und physikalischen Eigenschaften von Seltenerdverbindungen erklären und analysieren. • Sie erwerben die Kompetenz, ausgehend von bekannten Materialien die Eigenschaften neuer Verbindungen abzuschätzen und einen sinnvollen synthetisch-strategischen Zugang zu diesen Verbindungen zu erarbeiten. • Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Fähigkeit sich in ein naturwissenschaftliches Spezialgebiet einzuarbeiten und das erworbene Wissen aktiv zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen anzuwenden 		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 80 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 15 Std. Übung (Präsenzstudium) 45 Std. Vorlesung (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: keine		ECTS/LP-Bedingungen: Bestehen der Modulprüfung
Angebotshäufigkeit: jedes Sommersemester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Grundzüge der Seltenerdchemie Lehrformen: Vorlesung Sprache: Deutsch SWS: 3		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Inhalte: siehe Modulbeschreibung		

Literatur:

- A. F. Holleman, E. Wiberg und N. Wiberg, Lehrbuch der Anorganischen Chemie, de Gruyter, 102. Auflage, 2007.
- K. A. Gescheidner, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths
- weitere wird in der Vorlesung bekanntgegeben

Modulteil: Übung zu Grundzüge der Seltenerdchemie

Lehrformen: Übung

Sprache: Deutsch

SWS: 1

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Prüfung

Grundzüge der Seltenerdchemie

Klausur / Prüfungsdauer: 90 Minuten

Modul PHM-0278: Materialchemische Methoden <i>Methods in Materials Chemistry</i>	12 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Dirk Volkmer Prof. Dr. Henning Höppe, Prof. Dr. Wolfgang Scherer, Prof. Dr. Leo van Wüllen, PD Klaus Ruhland	
Inhalte: (1) Synthese, Charakterisierung und Anwendungen von porösen Funktionsmaterialien Laborversuche zur Synthese poröser Funktionsmaterialien: <ul style="list-style-type: none"> • Synthese und Charakterisierung der Linker (Organischen Chemie) • Synthese von porösen Funktionsmaterialien (Metall-organische Gerüstverbindungen) • Postsynthetische Modifikationen Charakterisierungsmethoden <ul style="list-style-type: none"> • IR- und NMR-Spektroskopie • Röntgen-Pulverdiffraktometrie (XRPD) • Thermoanalyse (TGA) • Adsorption (BET) • Untersuchung der Anwendungsmöglichkeiten der Materialien: z.B. Sorption und Stofftrennung, Photokatalyse (2) Synthese, Charakterisierung und Anwendungen photonischer Materialien Laborversuche zu optisch interessanten (oft silicat-analogen) Materialien: <ul style="list-style-type: none"> • Synthese und Charakterisierung der Materialien • Festkörper- und Fluxsynthese, solvothermale Umsetzungen • Schwingungsspektroskopie • Röntgen-Pulverdiffraktometrie • Reflexions- und Lumineszenzspektroskopie • Thermische Analyse (3) Synthese, Charakterisierung und Anwendungen von Steuerreagenzien Laborversuche zur Synthese von Steuerreagenzien (Initiatoren, Katalysatoren, Mediatoren): <ul style="list-style-type: none"> • Synthese und Charakterisierung organischer Liganden oder Substituentenprecursoren • Synthese von Übergangsmetallkomplexen oder Hauptgruppenverbindungen mit Steuerfunktion • Charakterisierung der synthetisierten Prekursoren und Steuerreagenzien • IR- und NMR-Spektroskopie • Röntgen-Einkristalldiffraktometrie • Untersuchung der Anwendungsmöglichkeiten der Steuerreagenzien: • Polymersynthese oder Einsatz in katalytischen Prozessen für molekulare Materialien (4) Bioaktive Gläser – Synthese, Struktur und Anwendungen Laborversuche zu Bio-Gläsern <ul style="list-style-type: none"> • Synthese oxidischer Biogläser (melt quench und Sol-Gel-Variante): • Charakterisierung der Strukturmerkmale dieser Gläser mittels Festkörper-NMR • Reaktivität und Löslichkeitsverhalten der Gläser in SBF (simulated body fluid) 	
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • lernen Aspekte der Arbeitssicherheit und der sicheren Reaktionsführung kennen • lernen die Präparation komplexer Verbindungen (Materialien) kennen • lernen wichtige Regeln der Protokollführung (Laborjournal) und der wissenschaftlichen Darstellung experimenteller Ergebnisse (Praktikumsbericht, Vortrag) • werden geschult in den Grundsätzen guter wissenschaftlicher Praxis 	

- können sich anhand der gegebenen Literatur selbstständig in ein Thema einarbeiten
- können Ergebnisse aus Experimenten auswerten und diese in Form einer wissenschaftlichen Notation darstellen
- erwerben einen Einblick in materialchemische Zusammenhänge und funktionale Prinzipien der Materialchemie
- erwerben Kenntnisse in der Handhabung luftempfindlicher Materialien
- wenden klassische und moderne Präparationstechniken wie beispielsweise Festkörperreaktionen, Polymersisationsreaktionen, Interkalationsreaktionen, chemische Transportreaktionen, Sol-Gel-Prozesse, Ausfällungen und Kristallisationen sowie Umsetzungen in Autoklaven und Silicaglasampullen an
- vertiefen ihr Wissen über die Charakterisierung von Materialien via chemischer Analytik, Beugungstechniken (Röntgen- und Neutronendiffraktion) und mittels spektroskopischer Methoden, insbesondere der Festkörper-NMR-Spektroskopie

Bemerkung:

Die vier Versuche finden jeweils als **einwöchige Blockveranstaltung** in der vorlesungsfreien Zeit von 9:00 – 16:00 statt.

Arbeitsaufwand:

Gesamt: 360 Std.

120 Std. laufende Vor- und Nachbereitung (Selbststudium)

120 Std. Praktikum (Präsenzstudium)

120 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes inkl. Prüfungsvorbereitung (Selbststudium)

Voraussetzungen:

Sicherheitsbelehrung über Gefahrstoffe

ECTS/LP-Bedingungen:

Praktische Arbeit, Befragung durch die Assistenten vor und im Verlauf der praktischen Arbeit an jedem Versuchstag, Protokoll, Vortrag am Ende

Angebotshäufigkeit: jedes Semester

Empfohlenes Fachsemester:

ab dem 1.

Minimale Dauer des Moduls:

2 Semester

SWS:

8

Wiederholbarkeit:

siehe PO des Studiengangs

Modulteile

Modulteil: Materialchemische Methoden

Lehrformen: Laborpraktikum, wissenschaftl. Blockpraktikum

Sprache: Deutsch

SWS: 8

Literatur:

- wird den Studierenden vor Beginn des Praktikums bereitgestellt

Zugeordnete Lehrveranstaltungen:

Materialchemische Methoden (Praktikum)

Prüfung

Materialchemische Methoden

Mündliche Prüfung, Einzel- oder Gruppenprüfung; 30 Minuten pro Prüfling zu jedem der vier Praktikumsteile

Modul PHM-0279: Forschungsprojekt <i>Research Project</i>		12 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Henning Höppe		
Inhalte: entsprechend dem gewählten Thema		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> • vertiefen Aspekte der Arbeitssicherheit und der sicheren Laborarbeit • sind mit einem aktuellen Forschungsthema und der zugehörigen Literatur vertraut, • sind in der Lage, ein Forschungsthema kritisch zu reflektieren und mit angemessener Medienunterstützung überzeugend darzustellen, • besitzen die Kompetenz, ein kleineres Forschungsprojekt unter Anleitung mit wissenschaftlichen Methoden zu bearbeiten. • Die Studierenden kennen die Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis und wenden diese an. Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Teamfähigkeit, eigenständiges Arbeiten, Präsentationstechniken, sowie die Fähigkeit, ein Thema in der Diskussion zu vertreten		
Bemerkung: In diesem Modul bearbeitet die Studentin/der Student in der Regel einen kleineren, genau definierten Teilaspekt der laufenden wissenschaftlichen Forschungen einer Arbeitsgruppe. Die thematische Wahl des Moduls Forschungsprojekt sollte im Hinblick auf das angestrebte Thema der Masterarbeit erfolgen.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 360 Std. 260 Std. Teilnahme an Lehrveranstaltungen (Präsenzstudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 20 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium) 60 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes Übung/Fallstudien (Selbststudium)		
Voraussetzungen: Sicherheitsbelehrung über Gefahrstoffe und über Umgang mit Röntgenstrahlung, weitere Voraussetzungen werden von der jeweiligen Betreuerin bzw. vom jeweiligen Betreuer bekannt gegeben		ECTS/LP-Bedingungen: Bericht
Angebotshäufigkeit: jedes Semester	Empfohlenes Fachsemester: 3.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 8	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Forschungsprojekt Lehrformen: Laborpraktikum Sprache: Deutsch		
Literatur: <ul style="list-style-type: none"> • wird von der jeweiligen Betreuerin bzw. vom jeweiligen Betreuer bereitgestellt 		
Prüfung Forschungsprojekt (Praktikumsbericht) Bericht		

Modul PHM-0280: Seminar Materialchemie <i>Seminar in Materials Chemistry</i>		6 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Wolfgang Scherer		
Inhalte: Aktuelle Forschungsergebnisse und fundamentale Studien auf dem Gebiet der Materialchemie sollen von den Studierenden zusammengefasst und in Form eines Vortrags vorgestellt werden. Dazu wird eine kurze Zusammenfassung der erarbeiteten Literatur als schriftliche Hausarbeit erstellt.		
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden erarbeiten sich Kenntnisse in der Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse anhand der Vorstellung aktueller Veröffentlichungen, • haben Fertigkeiten, komplexe experimentelle Forschungsergebnisse aufzuarbeiten und in kurzer, prägnanter Form in einem Vortrag und einer kurzen schriftlichen Zusammenfassung darzustellen, und • besitzen die Kompetenz, übergreifende Problemstellungen im Bereich der experimentellen oder theoretischen Materialchemie selbständig zu bearbeiten. • Integrierter Erwerb von Schlüsselkompetenzen: Erlernen des eigenständigen Arbeitens mit englischsprachiger Fachliteratur, Literaturrecherche mit wissenschaftlichen Datenbanken, Erlernen von Präsentationstechniken, kritische Reflexion experimenteller Ergebnisse im internationalen wissenschaftlichen Kontext, Präsentation eigener Ergebnisse auf wissenschaftlichen Konferenzen, Anwenden der Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis. 		
Bemerkung: Eine Themenauswahl wird von den Dozenten den Studenten zur Verfügung gestellt.		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 180 Std. 135 Std. Erbringung von Studienleistungen (Selbststudium) 45 Std. Teilnahme an Lehrveranstaltungen (Präsenzstudium)		
Voraussetzungen: Solide Kenntnisse der Grundlagen der Materialchemie (Synthese und Charakterisierung).		ECTS/LP-Bedingungen: Seminarvortrag (ca. 30 - 45 min), Hausarbeit
Angebotshäufigkeit: jedes Wintersemester	Empfohlenes Fachsemester: 1.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
SWS: 4	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Seminar Materialchemie Lehrformen: Seminar Sprache: Deutsch		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Literatur: wird teilweise von den Dozenten bekannt gegeben und durch selbstständige Literaturrecherche ergänzt		
Zugeordnete Lehrveranstaltungen: Seminar Materialchemie (Seminar)		

Prüfung

Seminar Materialchemie

Referat, ca. 30 - 45 Minuten pro Prüfling

Prüfung

Seminar Materialchemie

Hausarbeit/Seminararbeit

Modul PHM-0281: Masterarbeit <i>Master Thesis</i>		26 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Wolfgang Scherer		
Inhalte: Dem gewählten Thema und Forschungsziel entsprechend		
Lernziele/Kompetenzen: <ul style="list-style-type: none"> • Die Studierenden kennen den aktuellen Stand der Forschung in einem Spezialgebiet der Materialchemie sowie die entsprechende Literatur, • sind in der Lage, moderne experimentelle oder theoretische Methoden zur vertieften Bearbeitung einer Fragestellung der aktuellen Forschung einzusetzen und die Ergebnisse zu interpretieren, • besitzen die Kompetenz, ein materialchemisches Problem innerhalb einer vorgegebenen Frist selbständig mit wissenschaftlichen Methoden umfassend zu bearbeiten und die wissenschaftlichen Grundlagen des Problems sowie ihre Ergebnisse schriftlich darzustellen. • Integrierter Erwerb von Schlüsselqualifikationen: Teamfähigkeit, Durchhaltevermögen, Fähigkeit zur schriftlichen Dokumentation eigener wissenschaftlicher Ergebnisse, kritische Reflexion eigener Ergebnisse im internationalen wissenschaftlichen Kontext, Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis. • Die Studierenden besitzen Fach- und Methodenkompetenz sowie Kompetenz in Schlüsselqualifikationen entsprechend den allgemeinen Lernzielen des Studiengangs. 		
Bemerkung: Die Bearbeitungszeit von der Ausgabe des Themas bis zur Abgabe der Masterarbeit beträgt sechs Monate. Die Themenstellung und Betreuung der Masterarbeiten erfolgt durch die am Studiengang Materialchemie beteiligten Dozenten. Die Durchführung unter Betreuung anderer Dozenten der Universität Augsburg oder an einer Einrichtung außerhalb der Universität Augsburg ist mit Zustimmung des Prüfungsausschusses möglich. Die Masterarbeit muss in deutscher oder englischer Sprache abgefasst sein		
Arbeitsaufwand: Gesamt: 780 Std. 260 Std. Anfertigen von schriftlichen Arbeiten (Selbststudium) 260 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes durch Literatur (Selbststudium) 260 Std. Vor- und Nachbereitung des Stoffes anhand bereitgestellter Unterlagen (Selbststudium)		
Voraussetzungen: Voraussetzungen laut Prüfungsordnung: Die Masterarbeit kann frühestens nach dem erfolgreichen Abschluss des Moduls Forschungsprojekt sowie dem Erwerb von mindestens 78 Leistungspunkten begonnen werden. Sonstige Voraussetzungen werden vom jeweiligen Betreuer/von der jeweiligen Betreuerin bekannt gegeben.		ECTS/LP-Bedingungen: mindestens mit "ausreichend" bewertete schriftliche Abschlussarbeit.
Angebotshäufigkeit: jedes Semester	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 4.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Modulteile		
Modulteil: Masterarbeit Sprache: Deutsch / Englisch		

Lernziele:

siehe Modulbeschreibung

Literatur:

wird vom jeweiligen Betreuer/von der jeweiligen Betreuerin bekannt gegeben

Prüfung

Masterarbeit

Masterarbeit

Modul PHM-0282: Kolloquium <i>Colloquium</i>		4 ECTS/LP
Version 1.0.0 (seit SoSe22) Modulverantwortliche/r: Prof. Dr. Wolfgang Scherer		
Inhalte: Entsprechend dem gewählten Thema der Masterarbeit		
Lernziele/Kompetenzen: Die Studierenden sind in der Lage, ein aktuelles Forschungsthema, nämlich das Thema ihrer Masterarbeit, in sich geschlossen und überzeugend mündlich mit angemessener Medienunterstützung darzustellen sowie ihre Ergebnisse gegenüber den beiden Prüfern zu verteidigen.		
Bemerkung: Gegenstand des Kolloquiums ist der Themenkreis der Masterarbeit. Die Dauer des Kolloquiums soll 50 Minuten nicht unterschreiten und 70 Minuten nicht überschreiten. Das Kolloquium beginnt mit einem Vortrag über die Inhalte der Masterarbeit von etwa 20 Minuten Dauer.		
Arbeitsaufwand: 120 Std. Vorbereitung von Präsentationen (Selbststudium)		
Voraussetzungen: Das Kolloquium findet in der Regel in einem Zeitraum von vier bis sechs Wochen nach Abgabe der Masterarbeit statt.		ECTS/LP-Bedingungen: mindestens mit "ausreichend" bewertetes Kolloquium.
Angebotshäufigkeit: jedes Semester siehe Voraussetzungen	Empfohlenes Fachsemester: ab dem 4.	Minimale Dauer des Moduls: 1 Semester
	Wiederholbarkeit: siehe PO des Studiengangs	
Moduleile		
Modulteil: Kolloquium Sprache: Deutsch		
Lernziele: siehe Modulbeschreibung		
Literatur: wird vom jeweiligen Betreuer/von der jeweiligen Betreuerin bekannt gegeben		
Prüfung Kolloquium Mündliche Prüfung, Einzelprüfung ca. 60 Minuten Prüfungsdauer		