

CM-D-5 Struktur- und f-Element-Chemie / Structural and f-Element-Chemistry				
Wahlpflicht / Compulsory (optional)	Work load 240 h	Leistungspunkte / Credit points 8 CP	Studiensemester / Semester 1-3	Dauer / Duration 1 semester
1.	Lehrveranstaltungen / Lectures / courses:	Contact time	Self-study	Credit points
	Röntgenstrukturanalyse / Single crystal X-ray diffraction analysis (V)	28 h	62 h	3 CP
	Übung Röntgenstrukturanalyse / Exercise Single crystal X-ray structure analysis (Ü-kS)	14 h	16 h	1 CP
	Chemie der f-Block Elemente / Chemistry of the f-Block Elements (V)	28 h	62 h	3 CP
	Seminar Chemie der f-Block Elementes / Seminar Chemistry of the f-Block Elements (kS)	14 h	16 h	1 CP
2.	Qualifikationsziele und Inhalte / Qualification goals and contents <u>Qualifikationsziele / Qualification goals:</u> [DEU] Die Studierenden beherrschen die theoretischen Grundlagen der Röntgenstrukturanalyse von Einkristallen. Sie sind in der Lage, zu abstrahieren und mit komplexen mathematischen Fragestellungen umzugehen. Neben den physikalischen und mathematischen Grundlagen beherrschen die Studierenden die grundlegenden Techniken der experimentellen Planung und Durchführung sowie der Auswertung und Interpretation von Röntgenstrukturanalysen. Sie kennen die grundlegenden chemischen und physikalischen Eigenschaften der Elemente des f-Blocks und können diese klar von denen der Vertreter des s- und d-Blocks unterscheiden. Die Studierenden können die Struktur und Bindung in Metallkomplexen und deren Reaktivität kompetent beurteilen und diskutieren die Anwendungsmöglichkeiten von f-Block-Elementen in verschiedenen Bereichen wie Sensorik, Medizin und Katalyse. [ENG] Students are proficient in fundamental aspects of single crystal X-ray structure analysis. Students are able to abstract and deal with complex mathematical issues. In addition to the physical and mathematical fundamentals, students will have mastered the basic techniques of experimental planning and execution as well as the evaluation and interpretation of X-ray structure analyses. Students are familiar with the basic chemical and physical properties of the f-block elements and can clearly distinguish these from those of the s- and d-block representatives. Students competently evaluate the structure of and bonding in metal complexes and their reactivity and discuss the possible applications of f-block elements in different areas such as sensors, medicine and catalysis.			
	<u>Inhalt/Content:</u> <i>Vorlesung Röntgenstrukturanalyse:</i> Vertiefung der Grundbegriffe der Kristallographie und Diffraktometrie (Gitter, Symmetrie, IAM, Physik der Röntgenstreuung), Messtechniken und Probenpräparation, Datenreduktion (Indexierung, Rahmenskalierung, Absorptions-, LP-Korrektur), Matrixmethoden, Methoden der Strukturverfeinerung (Restraints, Constraints) und Lösung (Schweratom-Methode, direkte Methoden, Charge-Flipping/Dual-Space-Methoden), Zwillinge, modulierte Strukturen, Unordnung, ausgewählte Spezialaspekte der XRD (z. B. Pulvermethoden, Hochdruckmethoden, Elektronendichtebestimmung, invariante Verfeinerung, HART). / <i>Lecture Single crystal X-ray diffraction analysis:</i> in-depth study of the basic concepts of crystallography and diffractometry (lattice, symmetry, IAM, physics of X-ray scattering), measurement techniques and sample preparation, data reduction (indexing, frame scaling, absorption-, LP-correction), matrix methods, methods of structure refinement (restraints, constraints) and solution (heavy atom method, direct methods, charge-flipping/dual space methods), twins, modulated structures, disorder, selected special aspects of XRD (e.g. powder methods, high-pressure methods, electron density determination, invariome refinement, HART).			

	<i>Seminar Röntgenstrukturanalyse:</i> Bewertung und Lösung verschiedener Probleme der Röntgenstrukturanalyse, experimentelle Durchführung einer Kristallstrukturbestimmung. Präsentation in Diskussionsform. / <i>Seminar Single crystal X-ray diffraction analysis:</i> Evaluation and solution of various X-ray structure analysis related problems, experimental performance of a crystal structure determination. Presentation in discussion form. <i>Vorlesung Chemie der f-Block-Elemente:</i> Geschichte; Vorkommen und Abgrenzung; physikalische und chemische Eigenschaften; Abgrenzung zu d-Übergangsmetallen und s-Blockelementen; chemische Bindungen und die Rolle der f-Orbitale; Magnetismus; aktuelle Entwicklungen in der Koordinations- und Organometallchemie; Anwendungen in Technik, Medizin, organischer Synthese, Katalyse und der Aktivierung kleiner Moleküle. / <i>Lecture Chemistry of the f-Block Elements:</i> History; occurrence and separation; physical and chemical properties; differentiation from d-transition metals and s-block elements; chemical bonding and the role of f-orbitals; magnetism; current developments in coordination and organometallic chemistry; applications in different areas such as medicine, organic synthesis, catalysis and the activation of small molecules. <i>Seminar Chemie der f-Block Elemente:</i> Anwendung der Vorlesungsinhalte auf konkrete Beispiele und Übungen, Prüfungsvorbereitung. / <i>Seminar Chemistry of the f-Block Elements:</i> Application of the lecture content to specific examples and exercises, exam preparation.
3.	Verwendbarkeit des Moduls / application of the module: M.Sc. Chemie / M.Sc. Chemistry
4.	Teilnahmevoraussetzungen / prerequisites: Keine / none
5.	Lehr- und Lernformen / course type: Vorlesung (V), Übung (Ü-kS), Seminar (kS) / lecture (V), seminar (Ü-kS and kS)
6.	Voraussetzungen für die Vergabe von Leistungspunkten/Prüfungsmodalitäten / prerequisite for earning credits/type of assessment or examination: Mündliche Prüfung oder Klausur nach BPO §5 (3) Oral or written exam (PL) according to BPO §5 (3)
7.	Häufigkeit des Angebots / frequency of courses Jedes Sommersemester / every summer term
8.	Lehrende / lecturers: Kleeberg (Modulverantwortlicher), Walter, Baabe