Modulbeschreibung Einführung in die Verarbeitung und Darstellung Chemischer Daten

Studiengangstitel: M.Sc. Chemie

1)	1) Angaben zum Modul	
1a)	Modulkennziffer *Modulkennziffer des Fachbereichs - Dieses wird dem Modultitel voran gestellt und ist eine Kombination aus Buchstaben und/oder Zahlen (dabei handelt es sich nicht um die VAK).* module code *The Faculty's reference code is a combination of letters and/or numbers. The module code precedes the module title (not the EC).*	WDAT
1b)	Modultitel (deutscher Titel) module title (German title) *German module title can be omitted in an English study program.*	Verarbeitung und Darstellung Chemischer Daten
1c)	Englischer Modultitel Angabe wird für alle Studiengänge benötigt module title in English	Data Processing and Plotting in Chemistry
1d)	Modultyp (Pflichtmodul, Wahlpflichtmodul, Wahlmodul) type of module (compulsory module, compulsory elective module, elective module)	Wahlpflichtmodul
1e)	Modulnutzung *In welchen Studiengängen wird das Modul eingesetzt? Bitte vollständig, d.h. alle Studiengänge nennen inkl. Angabe Bachelor, Master, Weiterbildung.* programs using the module *In which study programs is the module offered? Please give the full title of all programs, including details whether Bachelor, Master or Continuing Education.*	Masterstudiengang Chemie (M.Sc.)
1f)	Anbietende Organisationseinheit *Angabe ist nur erforderlich, wenn das Modul aus einer anderen Organisationseinheit/Lehreinheit entnommen wird.* Organizational unit offering the module *Only to be completed if the module is taken from another organizational unit/ teaching unit.*	
1g)	Empfohlene inhaltliche Voraussetzungen content-related prior knowledge or skills	Grundkenntnisse in der Interpretation von Spektren (beispielsweise IR, NMR) sind wünschenswert. Es handelt sich um eine Einführungsveranstaltung, daher sind keine Vorkenntnisse in der Programmierung oder elektronischen Datenverarbeitung nötig.

		Basic knowledge about interpretation of measured spectra (e.g. IR, NMR) is helpful. Prior programming knowledge is not needed.
1h)	Lerninhalte *Nennung fachlicher, methodischer, fachpraktischer und ggfs. fachübergreifender Inhalte, die im Modul vermittelt werden.* Learning contents *Specify the subject-specific, methodological, subject-related practice and, where applicable, interdisciplinary contents taught in the module.*	Das Modul beinhaltet ein Seminar und einen Programmierkurs, in dem die folgenden Inhalte vermittelt werden sollen: • Grundlagen der Python-Programmierung • Chemische Datenbanken • Einlesen experimenteller Daten aus der organischen, anorganischen und physikalischen Chemie • Arbeiten mit großen Datenmengen • Datenverarbeitung (Linearisierung, Normierung) • Datentypen • Visualisierung mit Matplotlib (Bar plots, scatter plots, line plots) • Grafische Darstellung von experimentellen Daten (z.B. IR Spektren, XRD Patterns, NMR-Spektren, quantenchemische Rechnungen) The course will cover lectures about basics in Python programming together with hands-on programming sessions. • Overview of programming languages and plotting tools • Structural/ scientific data bases • Basics of Python programming: variables, lists, arrays; basic math; read/write; Functions/classes • Processing of larger data sets from organic, inorganic, and physical chemistry • Visualisation with Matplotlib • Graphical visualisation and interpretaion of experimental data (e.g. IR or NMR spectra, XRD data, quantum chemical calculations)
1i)	Lernergebnisse/Kompetenzen learning outcomes/competencies/targeted competencies	Die Studierenden lernen den Nutzen von computergestützter Datenverarbeitung im chemischen Kontext kennen und lernen die Grundzüge der Python-Programmierung. Darüber hinaus lernen die Studierenden, größere Mengen an Forschungsergebnissen auszuwerten und mithilfe des Python-Pakets Matplotlib ansprechend und in Publikationsqualität grafisch darzustellen. Die Studierenden erwerben Kompetenzen über den reinen Nutzen der Darstellung chemischer Experimente hinaus durch das Erlernen der Programmiersprache Python. The aim of the course is to learn how to process typical scientific data from chemical experiments and simulations. The students learn how to process their data with basic mathematical operations and how to plot and analyze the data at the level of scientific publishing. For this purpose the students will learn the basics of the programming language Python and how to plot data using Matplotlib.

1j)	Workloadberechnung (1 CP = 30 Stunden, siehe § 5 Absatz 6 AT BPO und MPO 2010) calculation of student workload (1 CP = 30 hours, see Art. 5 Section 6 AT BPO resp. MPO 2010)	Seminar: 28 Std. (2 SWS x 14 Wochen) Anwesenheit 44 Std. Vor-und Nachbereitung Computerpraktikum: 28 Std. (2 SWS x 14 Wochen) Anwesenheit 60 Std. Vor-und Nachbereitung, Praktikumsaufgaben 20 Std. Prüfungsvorbereitung Insgesamt 180 Arbeitsstunden. (= 6 CP)
1k)	Unterrichtsprache(n) Verschiedene Angaben sind möglich. language(s) of instruction *Different answers possible: German and/or English and/or another language*	☒ Deutsch/German ☐ Spanisch/Spanish ☒ Englisch/English ☐ Sonstige, und zwar/Other, namely this: ☐ Französisch/French
1l)	Modulverantwortliche(r) Responsible for the module	Dr. Wilke Dononelli
1m)	Häufigkeit (Turnus für Lehrangebot des Moduls) *z.B.: WS, jährl. oder SoSe, jährl. oder WS und SoSe etc.* frequency (regular cycle module is offered) *e.g.: winter semester, yearly or summer semester, yearly or each semester*	☐ WS, jährlich/yearly ☐ halbjährlich/half-yearly ☒ SoSe, jährlich/yearly ☐ jährlich/yearly ☐ jedes Semester/each semester ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this:
1n)	Dauer *1 Semester oder 2 Semester* duration	☒ Einsemestriges Modul/Module for one semester ☐ Zweisemestriges Modul/Module for two semesters ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this:
1o)	Credit Punkte credit points	6 CP
1p)	Dazugehörige Lehrveranstaltungen, Lehrveranstaltungsarten und SWS (= Semesterwochenstunden; Summe aller SWS im Modul)	Sum of SWS in this module: Type and number of courses in this module + SWS (total weekly hours per semester): ☐ Vorlesung/lecture: SWS

	Appertaining courses, course formats and total weekly hours per semester (SWS = weekly hours per semester) *Zum Beispiel: 2 Vorlesung: 4 SWS* *For example: 2 lecture: 4 SWS*	☐ Übung/exercise: SWS ☒ 2 Seminar/seminar: 2 SWS ☒ 2 Praktikum/laboratory: 2 SWS ☐ Exkursion/excursion: SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /*Other, namely this* with SWS ☐ Sonstiges, und zwar /Other, namely this with SWS Kann eine Studentin/ein Student im Modul aus verschiedenen Lehrveranstaltungen auswählen?/Can a student choose between different courses in the module? ☐ Ja/Yes ☒ Nein/No
2)	**Angaben zur Modulprüfung (information on the module examination) (siehe dazu auch AT § 5 Abs. 8)**	
2a)	Prüfungstyp type of examination *Modulprüfung (MP)* *exam with only one component* *Kombinationsprüfung (KP)* *exam with several components (administered by instructors)* *Teilprüfung (TP)* *exam with several components (administered by registrar)*	☐ Modulprüfung/Module examination (MP) ☒ Kombinationsprüfung/Combination examination (KP) ☐ Teilprüfung/Sub-examination (TP)
2b)	Leistungen (Benennung nach Art und Anzahl) exam components or prerequisites (type, number) PL = *Prüfungsleistung (benoteter Bestandteil einer MP/KP/TP)* *graded component of the examination* SL = *Studienleistung (unbenotete Leistung in einer Lehrveranstaltung bzw. einem Modul) ungraded component of the examination, coursework* PVL = *Prüfungsvorleistung (Studienleistung vor einer Modulprüfung, nach § 5 Abs. 10 AT BPO bzw. MPO 2010) prerequisite of the examination (see AT Art. 5 Section 10)*	☒ PL, Anzahl/number: 2 ☐ SL, Anzahl/number: ☐ PVL, Begründung/reason:
2c)	Nur bei Kombinationsprüfungen auszufüllen: Prozentualer Anteil der einzelnen Prüfungsleistungen an der Berechnung der Modulnote.	Programmieraufgabe (50%) Hausarbeit (50%)

	Complete for combination examinations only: Weights (in percentage) of component grades	
2d)	Prüfungsform(en) (s. § 8, 9 und 10 AT BPO bzw. AT MPO 2010) form of examination (see AT Art. 8, 9 and 10)	☒ Hausarbeit/Assignment ☐ Klausur/Written examination ☐ Mündliche Prüfung (Einzelprüfung) Oral examination (single) ☐ Gruppenprüfung, mündlich/ Group examination, oral ☐ Referat, mündlich/Presentation, oral ☐ Referat, schriftliche Ausarbeit/Presentation, written assignment ☐ Portfolio/Portfolio ☐ Praktikumsbericht/Internship report ☐ Projektbericht/Project report ☐ Bachelorarbeit/Bachelor thesis ☐ Kolloquium/Colloquium ☐ Masterarbeit/Master Thesis ☒ Sonstiges (Definition erfolgt in der Prüfungsordnung/Other (concrete definition is given in the examination regulations): Programmieraufgabe, gemäß Anlage 1.2b der Digitalprüfungsordnung
2e)	Prüfungssprache(n) language(s) of examination	☒ Deutsch/German ☐ Spanisch/Spanish ☒ Englisch/English ☐ Sonstige, und zwar/Other, namely this: ☐ Französisch/French
2f)	Literatur *Fakultativ* literature *optional*	