



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER  
GDCh-Studienkommission

Arbeitspapier

Ausarbeitungen Lehrblöcke für das Bachelorstudium; Stand: 10. Oktober 2014

	Oberbegriff/Lehrblock	Autoren
1	Allgemeine Chemie	Greiner, Weber, Scholz
2	Analytische Chemie	Hayen, Walther, Gauglitz
3	Elektrochemie	(M. Winter, P. Bieker)
4	Anorganische Festkörperchemie	Korber, Scholz, Albert
5	s. Anhang	Greiner, Lang, Griesar
6	Industrielle Chemie / / Chemische Technologie I + II	Griesar, Stöwe
7	Kinetik (Kinetik und Transportphänomene)	Engels, R. Winter
8	Koordinationschemie	Klüfers, Lang
9	Mathematik / Physik	alle ermitteln jeweiligen Bedarf
10	Quantenchemie	Engels, Engel
11	Reaktionsmechanismen / Reaktive Zwischenstufen	Lang, Klüfers, Thiele
12	Grundlagen der Molekülspektroskopie	Thiele, Hayen, R. Winter
13	Stereochemie (entfällt, z.T. in Kap. 14 + 16)	Thiele, König, Schmuck
14	Stoffliche Systeme (Chemie der Elemente)	Korber, Weber, Thiele, König, Schmuck
15	Charakterisierung Stofflicher Systeme	Albert, Thiele, Greiner
16	Symmetrie	Engels
17	Präparatives Arbeiten im Labor / Instrumentelle (physikalische-chemische) Methoden	Albert, Thiele, König, Schmuck / R. Winter
18	Theorie der chemischen Bindung (entfällt)	Engels
19	Klassische und Statistische Thermodynamik	Engels, Engel, R. Winter
20	Toxikologie und Rechtskunde	Engel, Lang, (Auel)
21	„Übermolekulare“ Chemie / Nicht-koordinative Verbindungen (entfällt)	Greiner, Weber
22	Versuchsplanung / Bewertung der Ergebnisse / Statistik (entfällt, -> in Kap. 2)	Hayen, Walther, Gauglitz
23	Biochemie	Schmitz
24	Makromolekulare Chemie	Greiner
	<b>Anhang</b>	
A1	Grundlagen wissenschaftlichen Arbeitens	
A2	Wirtschaftschemie	Griesar

1 Allgemeine Chemie			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen:	Konzepte:	Ist zum Beispiel Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:	
<p><b>Allg., AC:</b> keine <b>Analytik:</b> keine <b>OC:</b> keine <b>PC:</b> keine <b>Mathematik, Physik:</b> dekadischer Logarithmus, Dreisatz, Statistik</p>	<p><b>Konzepte:</b></p> <p>Grundprinzipien der Chemie: Stoffsystematik, spezifische Eigenschaften, Stoffumwandlung, Zustandsänderung, Aggregatzustände, Stoffe und Stofftrennung, chemische Grundgesetze, Energieumsatz chem. Reaktionen, Elemente, Verbindungen, Moleküle</p> <p>Chemische Grundgrößen, chem. Gleichgewicht: Elementarteilchen, Atommasse, Konzentrationen und Gehalte, Gleichgewichtskonstante, freie Reaktionsenthalpie, Reaktionsgeschwindigkeit</p> <p>Atombau: Welle-Teilchen-Dualismus, Quantelung der Energie, historische Atommodelle, Schrödinger-Gleichung, Atomorbitale, Quantenzahlen, Elektronenkonfiguration, atomare Terme, Atomradius, Ionenradius, Ionisierungsenergie, Elektronenaffinität, Elektronegativität</p> <p>Periodensystem der Elemente: Nomenklatur, Trends, Periodische Eigenschaften</p> <p>Verbindungsklassen: ionische Bindung (Polarität der chem. Bindung, Ionenbildung, Gitterenergie, Strukturtypen von Ionenverbänden, Hydratation, Solvatation), kovalente Bindung (VB-Theorie, MO-Theorie, Lewis-Formeln, <math>\sigma</math>-, <math>\pi</math>-Bindung, Bindungsordnung, Hybridisierung, VSEPR), Metallbindung (Metallcharakter, metallische Eigenschaften, Drude-Modell, Bändermodell, Leitfähigkeit, Kugelpackungen), dative (koordinative) Bindung.</p> <p>Reaktionstypen: Säure-Base-Konzepte (Definition Brønstedt, Lewis, Autoprotolyse Wasser, pH-Wert, Säure- und Basenkonstante, Titration von Säuren und Basen,</p>	<p>Alle nachfolgenden Chemievorlesungen</p> <p>Nebenfächer: Biochemie, Biologie, Physik, Geologie, Pharmazie, Materialwissenschaften, Medizin</p>	

	<p>Puffersysteme), Redoxreaktionen (Oxidation, Reduktion, Redox-Gleichungen, Elektrolyse-Zelle, Galvanisches Element, Elektromotorische Kraft, Standartpotentiale, Nernstsche Gleichung), Komplexbildungsreaktionen, Fällungsreaktion (Löslichkeitsprodukt, Löslichkeit), Gleichgewichte, Gleichgewichtskonstante, freie Reaktionsenthalpie</p> <p>Magnetismus: Paramagnetismus, Diamagnetismus, Ferro/Ferrimagnetismus</p> <p><b>Praktikum:</b> Säure-Base-Titration, Komplexometrie, Fällungstitration, Gravimetrie, Redoxtitration (Analytische Chemie)</p>	
--	--	--

2 Analytische Chemie		
<p><b>Benötigte Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b> Grundlegende Kenntnisse der allgemeinen Chemie (Atom- und Molekülbau sowie Stoffkenntnisse in den Bereichen <b>Anorganische und Organische Chemie</b> Grundlagen der Spektroskopie und Elektrochemie sowie zur Kinetik aus den Bereichen der <b>Physikalischen Chemie</b>, grundlegende Aspekte der</p>	<p><b>Konzept:</b> Basierend auf den Stoffkenntnissen aus der Anorganischen und der Organischen Chemie sowie auf den Grundlagen der Physikalischen Chemie steht bei der Vermittlung der Konzepte der Analytischen Chemie der analytische Prozess und insbesondere die Quantifizierung im Mittelpunkt (angepasst an die Vor-Ort-Schwerpunkte).</p> <p><b>Inhalte:</b> <b>Analytischer Gesamtprozess, Grundgedanke, Fragestellung, Grundbegriffe:</b> - Analytisches Problem von der Probennahme bis zur Auswertung (analytischer Prozess, Untersuchungsobjekt, Analysenprinzip, Analysenmethode, Plausibilitätskontrolle der analytischen Informationen, Experiment und Bewertung, Problem der geringen Menge, Miniaturisierung, Konzentrationsbereiche, Identifizierung und Quantifizierung in verschiedenen Matrices, Validierung, Qualitätssicherung) - Begriffe der quantitativen Analytik (Empfindlichkeit, Nachweisgrenze,</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> <b>OC:</b> Identifizierung von Substanzen, Trennung komplexer Gemische <b>AC:</b> Materialforschung, Katalyse <b>PC:</b> Materialcharakterisierung, Datenerfassung und – bewertung <b>Fachübergreifend:</b> Biochemie, Pharmazie, klinische Chemie,</p>

<p>Thermodynamik wie Gleichgewichtskonstante, Energieumsatz und Phasenübergänge</p> <p><b>Mathematik:</b> e-Funktion, Logarithmus, Differenzieren und Integrieren, Wahrscheinlichkeitsrechnung, Statistik, Verteilungsfunktion, Matrizenrechnung</p> <p><b>Physik:</b> Elektrizitätslehre, Optik, Mechanik, Messtechnik</p>	<p>Detektionsgrenze, Bestimmungsgrenze, Selektivität/ Spezifität, Auflösung, Reproduzierbarkeit, Signaltypen, Rauschen)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Probenahme und Probenvorbereitung bei Gasen, Flüssigkeiten und Festkörpern</li> </ul> <p><b>Trenn- und Anreicherungsverfahren:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Aufschlussverfahren, Extraktionsverfahren, Spurenanreicherung, Matrixeffekte</li> <li>- GC, HPLC, DC, IC, CE, SFC</li> </ul> <p><b>Bestimmungsmethoden:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Gravimetrie, Maßanalyse</li> <li>- Elektroanalytische Verfahren (Leitfähigkeit, Potentiometrie, Voltammetrie, Cyclovoltammetrie, Polarographie)</li> <li>- Molekülspektroskopie (UV-VIS, Fluoreszenz, IR, Raman)</li> <li>- Massenspektrometrie (anorg. und org. MS, Aufbau, Ionisierung, Fragmentierung, Detektion, Kopplungstechniken)</li> <li>- Atomspektroskopie (AAS, AES, ICP, XRF)</li> <li>- Bioanalytik (Assaytypen, Affinitäten, Gelelektrophorese, Polymerase-Kettenreaktion)</li> <li>- Sensorik (Optische Sensoren, elektrochemische Sensoren)</li> <li>- Radioanalytische Methoden</li> </ul> <p><b>Chemometrische Auswerteverfahren:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- statistische Bewertung von Daten</li> <li>- Modellierung, Datenanalyse, Objekte, Muster, Merkmale, Polardiagramm, Clusteranalyse, Hauptkomponentenanalyse</li> <li>- Kalibrierverfahren, kleinste Fehlerquadrate, lineare Regression, Vertrauensbereich aus univariater Modellierung, Korrelationskoeffizient, Regressionskoeffizient</li> </ul> <p><b>Praktikum:</b></p> <p>Versuche aus den Bereichen der qualitativen und quantitativen Analyse insbesondere der Probenvorbereitung, der Trennverfahren, der Spektroskopie,</p>	<p>Biologie, Bioinformatik, Medizin, Medizintechnik und Umweltwissenschaften</p> <p><b>Master</b></p> <p>Im Bachelorstudium werden die Grundlagen und die Breite des modernen instrumentellen Methodenspektrums für eine Vertiefung und Erweiterung des Wahlpflichtfachs Analytische Chemie im Masterstudiengang geschaffen.</p>
---	--	--

	<p>der Massenspektrometrie, der Elektrochemie und der Sensorik. Erlernen der selbständigen Einschätzung der Leistungsfähigkeit und der Einsatzbereiche der Methoden</p> <p><b>Anmerkungen:</b></p> <p>Die Analytische Chemie beinhaltet die mehr methodisch orientierten Lehrgebiete. Die stofflich dominierten Gebiete der Analytischen Chemie verbleiben in der Anorganischen bzw. Organischen Chemie (z.B. spektroskopische Strukturaufklärung).</p> <p>Die physikalischen und quantenmechanischen Grundlagen der Spektroskopie werden von der Physikalischen bzw. Theoretischen Chemie angeboten. Hier müssen die Anteile abgestimmt werden.</p>	
--	--	--

3 Elektrochemie		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b> Allg., AC: sollte vorhanden sein <b>Mathematik, Physik:</b> dekadischer Logarithmus, Dreisatz, Integral und Differentialrechnung.</p>	<p><b>Konzepte:</b> Konzepte: Grundlage der Physikalischen Chemie Grundlagen der chemischen Thermodynamik und Elektrochemie: makroskopische Beschreibung (Hauptsätze, Zustandsfunktionen, Potentiale) und mikroskopische Modellierung (kinetische Gastheorie) von Gleichgewichtszuständen, chemischen Reaktionen und Transportvorgängen. Dieses Modul vermittelt die Grundlagen und Konzepte zur physikalisch-chemischen Beschreibung makroskopischer Zustände und chemischer Prozesse.</p> <p><b>Erworbene Kompetenzen:</b> Durch Verknüpfung der im Modul „Allgemeine Chemie“ gesammelten Erkenntnisse zur chemischen Bindung und Reaktivität mit mathematischen Methoden soll eine quantitative</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> Alle nachfolgenden PC Veranstaltungen Vorbereitung auf das Energy Master Modul im Masterstudiengang Vorbereitung auf die</p>

	<p>Beschreibung zur Bilanzierung (und Vorhersage) von Stoff- und Energieumsätzen entwickelt werden. Die Studierenden lernen die Bedeutung physikalisch-chemischer Themen für weite Bereiche der Chemie kennen. Ziel ist das Verständnis chemischer Vorgänge auf der Basis physikalisch-chemischer Anschauungen.</p> <p><b>Konzepte:</b> Physikalische und technische Chemie</p> <p>Aufbauend auf die im Modul „Physikalische Chemie“ vermittelten Konzepte sollen die Studierenden in industriell relevante Aspekte der Physikalischen Chemie und der Materialforschung eingeführt werden. Dieses beinhaltet das theoretische Verständnis und die Optimierung von physikalischen Materialeigenschaften, von chemischer Reaktivität und technischer Reaktionsführung. Der Inhalt des Moduls umfasst die Grundlagen der statistischen Theorie der Materie, physikalische Materialeigenschaften, komplexe Transportprozesse, Analyse und Modellierung chemischer Reaktoren, Adsorption und heterogene Katalyse.</p> <p><b>Methoden/Praktikum:</b></p> <p>Grundlagen zur Funktionsweise einer Brennstoffzelle, verschiedene Arten von Brennstoffzellen, U-I-Kennlinie einer Brennstoffzelleneinheit mit Polymerelektrolytmembranen, verschiedene Arten der Überspannung (Restüberspannung, Durchtritts- oder Aktivierungsüberspannung, Ohmsche Überspannung, Konzentrationsüber-spannung), Austauschstromdichten, Butler-Volmer-Gleichung, Tafel-Gleichung, Nernstsche Diffusionsschicht, Grenzstromdichte, Wirkungsgrade (Spannungswirkungsgrad, thermodynamischer Wirkungsgrad, elektrischer Wirkungsgrad, Umsatzwirkungsgrad, Betriebswirkungsgrad, Gesamtwirkungsgrad), Einfluss der Temperatur auf Überspannungen und Wirkungsgrade, Bestimmung thermodynamischer Reaktionsgrößen aus T-abhängigen EMK-Messungen.</p> <p>EMK- Messungen an wässrigen Lösungen und Bestimmung thermodynamischer Größen</p>	Vorlesung: Theoretische Grundlagen der Chemie
--	--	--

		aus der Temperaturabhängigkeit der EMK Ionenleitung in wässrigen Lösungen Reaktionsgeschwindigkeit der Esterverseifung		
--	--	--	--	--

4 Anorganische Festkörperchemie		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b></p> <p><b>Allg., AC:</b> Periodensystem, Stoffchemie der Haupt- und Nebengruppen-elemente, Chemische Bindung, Koordinations-polyeder, Ionenkristalle</p> <p><b>Analytik:</b> Potentiometrie.</p> <p><b>OC:</b> keine.</p> <p><b>PC:</b> Kinetik, Thermodynamik, Phasengleichgewichte, Phasengrenzen.</p> <p><b>Mathematik, Physik:</b> Gruppentheorie</p>	<p><b>Konzepte:</b></p> <p>Festkörpersynthese: Festkörperreaktionen und Kristallisation (Diffusion, Keimbildung- und Wachstum, Kristallwachstum, thermische Aktivierung, Mechanochemie, chemische Aktivierung, Precursor-Methoden, Sol-Gel-Verfahren); Kristallisation aus flüssiger Phase (Tiegel- und Ampullenmaterialien, Kristallzucht, Hydro-, Solvothermalsynthesen); Abscheidung aus der Gasphase (physikalische und chemische Gasphasenabscheidung; chemischer Gasphasentransport)</p> <p>Beschreibung von Kristallstrukturen: Elementarzelle, Translationssymmetrie, Metallatompakungen, Lückenbesetzung, einfache Strukturtypen binärer und ternärer Verbindungen</p> <p>Zustandsdiagramme, Polymorphie, Phasenumwandlungen, thermische Analyse</p> <p>Kovalente Bindungen: Strukturen von Halb- und Nichtmetallen, Druck-Koordinationsregel, Druck-Abstands-Paradoxon, Grimm-Sommerfeld-Regel</p> <p>Ionenkristalle: Born-Haber-Kreisprozess, Gitterenergie, Pauling-Regeln</p> <p>Partiell- und nichtkristalline Feststoffe: Gläser, mikro-, meso-, nanostrukturierte Materialien, Komposit-Materialien</p> <p>Elektronische Struktur: Bändertheorie, Bandstruktur, Zustandsdichten</p> <p>Metalle und Legierungen, Metallographie</p> <p>Elektrische Eigenschaften: Halbleiter, Ferroelektrika, Ionenleiter, Defektchemie, Supraleiter</p> <p>Kooperative Phänomene: Ferro-, Antiferro- und Ferrimagnetismus</p> <p>Optische Eigenschaften und Pigmente</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b></p> <p>Materialchemie</p> <p>Spezielle Stoffklassen: (z.B. Zintl- und Laves-Phasen, Keramiken, Wolframbronzen)</p> <p>Thermodynamik der Phasenbildung</p> <p>Kristallstrukturbestimmung</p> <p>Anorganische Strukturchemie: Symmetrie-Eigenschaftsbeziehungen, Strukturverwandtschaften/ Gruppe-Untergruppe Formalismus</p> <p>Quantentheoretische Festkörperchemie</p>

(Symmetrieelementen und -operationen, -gruppen, -klassen).	Strukturanalytik: Röntgen- und Neutronenbeugung (Symmetrieelemente und -operationen, Punktgruppen, Kristallsysteme, Bravais-Gitter, Raumgruppen, Bragg-Gleichung, Indizierung von Diffraktogrammen), Elektronenmikroskopie, Röntgenspektroskopie  <b>Methoden und Praxis:</b> Anwendung der Strukturanalytik, Bestimmung von Materialeigenschaften Praktikum: Festkörpersynthesen, Strukturanalytik, Materialeigenschaften	
--	--	--

## 5 Grundlagen Wissenschaftlichen Arbeitens -> s. Anhang A1

6/I Industrielle Chemie			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :	Konzepte:		Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:
Allgemeine Chemie (Atombau, Orbitale, Nomenklatur, PSE ) AC: (Verbindungsklassen in der Hauptgruppenchemie, Säure-Base Konzepte) OC: (organische Verbindungsklassen, grundlegende Reaktionen und	<p><b>Konzepte:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Chemische Industrie, Verfahrensentwicklung</li> <li>• Energie, Rohstoffe, Technologie</li> <li>• Ökonomische und ökologische Betrachtungen, Stoffflüsse und Stoffkreisläufe, Grundwasseraufbereitung</li> <li>• Basischemikalien-Herstellung (Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Chlor, Ammoniak, Schwefeldioxid, etc.), Luftzerlegung</li> <li>• Anorganische Endprodukte, z.B. Anorganische Säuren, Herstellung und Verwendung; Düngemittel; Bauchemie (Zement, Pigmente); Zeolithe; Stahl und Metalle; Siliziumherstellung, Silikone</li> <li>• Petrochemie: Verfahrensabläufe, Produktspektrum</li> <li>• Organische Zwischen- und Endprodukte: C<sub>1-3</sub>-Chemie, Alkohole, Aromaten, Halogenderivate; Polymere: PE, PP, Polyamide, Polyester</li> <li>• Nachwachsende Rohstoffe</li> </ul>		Wirtschaftschemie, Nachhaltige Produktionsprozesse, Vertiefungsvorlesungen Technische Chemie

Reaktionsmechanismen) PC: (Thermodynamik: Gleichgewichtkonstante und freie Reaktionsenthalpie; Entropie; Gibbs- Helmholtz Gleichung)	<b>Methoden/Praktikum.</b>		
--	----------------------------	--	--

<b>6/II Chemische Technologie</b>			
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :</b>	<b>Konzepte:</b>		<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b>
Allgemeine Chemie (Atombau, Orbitale, Nomenklatur, PSE ) AC: (Verbindungsklassen in der Hauptgruppenchemie, Säure-Base Konzepte) OC: (organische Verbindungsklassen, grundlegende Reaktionen und Reaktionsmechanismen) PC: (Thermodynamik: Gleichgewichtkonstante	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Chemische Industrie, Verfahrensentwicklung, Katalyse</li> <li>• Chemische Produktionsanlagen: Aufbau, Fließbilder, Up- und Downstream-Prozesse</li> <li>• Chemische Thermodynamik und Kinetik: Umsatz, Ausbeute und Selektivität</li> <li>• Chemische Reaktionstechnik: Grundlagen, ideale Reaktoren, Reaktoren mit realem Verhalten, Stoff- und Wärmebilanzen, Verweilzeit, Verweilzeitverhalten idealer und realer Reaktoren, Reaktormodellierung, Reaktorsicherheit, Ausführungsformen von Reaktoren</li> <li>• Kinetik heterogen katalysierter Reaktionen, Makro- und Mikrokinetik, Massentransportlimitation, Katalysatornutzungsgrad, homogene Katalyse</li> <li>• Thermische und mechanische Grundoperationen in Up- und Downstream-Prozessen: Grundlagen des Wärme- und Stofftransports, Strömungsmechanik, Ähnlichkeitstheorie, Beispiele [Destillation/Rektifikation, Adsorption, Absorption, Ionenaustausch, Extraktion, (Membran-)Filtration, Sedimentation, Zentrifugation, Mahlen, Rühren, Mischen]</li> <li>• Rohstoffe und Produkte der Chemischen Industrie, Umwelt- und</li> </ul>		Wirtschaftschemie, Nachhaltige Produktionsprozesse, Vertiefungsvorlesungen Technische Chemie

<p>und freie Reaktionsenthalpie; Entropie; Gibbs-Helmholtz-Gleichung; Kinetik: Reaktionsgeschwindigkeit, Zeitgesetze homogener Reaktionen)</p>	<p>Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen, Nachhaltigkeit, Nachwachsende Rohstoffe</p> <p><b>Methoden/Praktikum.</b></p>		
--	--	--	--

<b>7 Kinetik und Transportphänomene</b>			
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b> Mathematik (Lineare Algebra, Differential- und Integralrechnung, Differentialgleichungen), Allgemeine Chemie	<b>Modul</b> <p>Dieses Modul vermittelt die Grundlagen und Konzepte zur physikalisch-chemischen Beschreibung der Kinetik chemischer Reaktionen und Prozesse sowie komplexer Transportprozesse, wie sie für die Analyse und Modellierung chemischer Reaktionen erforderlich sind. Die Chemische Kinetik beschäftigt sich mit dem Umsatz, der Geschwindigkeitskonstanten, der Reaktionsordnung, der Struktur von Zwischenstufen und dem Mechanismus einer Reaktion. Des Weiteren werden die Einflüsse der Temperatur, des Drucks, des Lösungsmittels und die von Katalysatoren untersucht.</p> <b>Konzepte</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Transportphänomene: Diffusion, Viskosität, Ionentransport in Elektrolytlösungen und Festkörpern, Überführungszahlen, elektrokinetische Erscheinungen</li> <li>• Formale Reaktionskinetik, Geschwindigkeitsgesetze, komplexe Reaktionen</li> <li>• Experimentelle Methoden und die Auswertung kinetischer Messungen, schnelle Reaktionen</li> <li>• Theorien von Elementarreaktionen</li> <li>• Untersuchung von Reaktionsmechanismen</li> </ul>		<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> Technische Chemie

		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kinetik von Reaktionen in Lösung</li> <li>• Biochemische Reaktionen</li> <li>• Kinetik heterogener Reaktionen, Katalyse</li> <li>• Kinetik von Elektrodenprozessen</li> </ul>		
--	--	--	--	--

<b>8 Koordinationschemie</b>				
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b></p> <p>Allg., AC: Atombau, Quantenzahlen, Orbitale, atomare Terme; kovalente, polare und ionische Bindung, normale und dative (koordinative), Symmetrie, Koordinationsfiguren in Salzstrukturen, Verbindungsklassen in der Hauptgruppenchemie, Nomenklatur.</p> <p><b>Analytik:</b> Protolyse, Säure-Base-Titrationen,</p>	<p><b>Konzepte:</b></p> <p>Räumlicher Aufbau von Koordinationsverbindungen (Koordinationszahlen und Polyeder), Isomeriearten (Konstitutionsisomere, <i>cis/trans</i>, <i>fac/mer</i>, Enantiomere, ambidente Liganden). Thermodynamik (Beständigkeitskonstanten, Speziesverteilung, Chelateffekt) und Kinetik (inerte und labile Komplexe, assoziative und dissoziative Ligandsubstitution, inner- und outer-sphere Redoxreaktionen) von Komplexbildungsreaktionen.</p> <p>Eigenschaften von Liganden (Modulation von Acidität und Elektrophilie)</p> <p>Bindungsmodelle: MO-Schema eines oktaedrischen Komplexes, Kristallfeldmodell als Beschreibung des Grenzorbitalbereichs; Elektronenspektrum und Elektronenstruktur, spektroskopische Auswahlregeln, Jahn-Teller-Verzerrung. Paramagnetische und diamagnetische Komplexe, Spin-only-Formel, ferro- und antiferromagnetische Spinkopplung, Superaustausch.</p> <p>Stark- und Schwachfeldliganden, <math>\sigma</math>-Donor-, <math>\pi</math>-Donor- und <math>\pi</math>-Akzeptorliganden, spektrochemische Reihe, Metallbeitrag zur Feldaufspaltung, Spinzustände (high-, low-spin), Spin-Crossover. Starkfeldliganden: Carbonyl-, Nitrosyl- und Cyanido-Komplexe, 18-e-Regel, Metall-Metall-</p>		<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b></p> <p>Materialien: Sensoren, molekulare Schalter, molekulare Magnete, metallorganische Netzwerke, Design von Spin-Crossover-Verbindungen, Nanotechnologie.</p> <p>Biokatalyse: Elektronentransfer und Aktivierung kleiner Moleküle in Metalloenzymzentren, biologische Wasserspaltung,</p>	

<p>Komplexometrie. <b>OC:</b> Chiralität, funktionelle Gruppen, Biomolekülklassen. <b>PC:</b> Gleichgewichtkonstante und freie Reaktionsenthalpie; Standardpotentiale, Nernstsche Gleichung, Grundlagen spektroskopischer Methoden. <b>Mathematik, Physik:</b> Gruppentheorie (Symmetriegerationen und -gruppen, Rassen), Licht, Farbe und Energie, Absorption.</p>	<p>Bindungen, Cluster, Isolobalbeziehung. Bindungskonzepte der metallorganischen Chemie, Grundtypen organometallchemischer Liganden, (Halb-)Sandwich-Verbindungen, Elementarschritte der Organometallchemie [oxidative Addition, reduktive Eliminierung, nukleophiler Angriff auf den Liganden („Insertion“), <math>\beta</math>-H-Eliminierung].</p> <p><b>Methoden/Praktikum:</b> Substanzcharakterisierung und Strukturaufklärung anhand klassischer und moderner Methoden wie z.B. UV/Vis-, NMR- und IR-Spektroskopie, anaerobe Arbeitstechniken (<b>Schlenktechnik</b>), Literaturrecherche und Einführung in den Umgang mit online-Datenbanken, Syntheseplanung, spezielle Substanzklassen aus den Bereichen der metallorganischen und der Koordinationschemie</p> <p>Im Rahmen des Praktikums erwerben die Studierenden die Kompetenz zur Beurteilung von Synthesestrategien unter Einbeziehung gezielter Literaturrecherche. Sie erlernen den Einsatz anspruchsvoller präparativer Methoden, die bei der mehrstufigen Synthese metallorganischer und koordinationschemischer Produkte eingesetzt werden. Sie sind in der Lage, die Syntheseziele durch Reinigung, Reinheitskontrolle und Strukturaufklärung zu erreichen und die Produkte anhand spektroskopischer Methoden zu charakterisieren. Die Studierenden erlernen den sorgfältigen Umgang mit kleinen Substanzmengen und können Verfahren der nasschemischen Trennung sicher anwenden.</p>	<p>Photosynthese, <math>N_2</math>- und <math>H_2</math>-Aktivierung. Technische Katalyse: Carbonylierungen (Synthesegasnutzung, Essigsäuresynthese), ... (nach Belieben alles mögliche). Energiegewinnung und -speicherung: Methanisierung, biomimetische Wasserspaltung. Computerchemie: DFT-Behandlung offen- und geschlossenschaliger Metallkomplexe.</p>
---	---	---

9 Mathematik / Physik			
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr-</b>	<b>Konzepte (Mathematik)</b> Mengen, Körper, Koordinatensysteme, lineare Algebra, vollständige Induktion, Binomischer Lehrsatz, Funktionen, Stetigkeit, Differentiation, Taylorreihen,		<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b>

<b>veranstaltungen :</b> Grundwissen in Mathematik aus der Schule	Umkehrfunktionen, Integration, Vektorrechnung, Matrizen, Lineare Gleichungssysteme, Permutationen, Determinanten sowie gewöhnliche Differentialgleichungen, Wahrscheinlichkeitsrechnungen, Operatoren, imaginäre Zahlen, e-Funktionen, Logarithmen, trigonometr. Funktionen		Physik, Physikalische Chemie, Theoretische Chemie
Mathematik	<p><b>Methoden/Übungen</b> Übungsstunden mit Aufgaben</p> <p><b>Konzepte (Physik)</b> Methodik der Physik, Maßeinheiten, Mechanik, Hydrostatik, Hydrodynamik, Schwingungs- und Wellenlehre, Wärmelehre, spezielle Relativitätstheorie, Optik, Kern- und Teilchenphysik, Elektrizitätslehre</p> <p><b>Methoden/Praktikum</b> Ausgewählte Experimente aus den Bereichen Mechanik, Wellen, Elektrodynamik, Thermodynamik, Optik sowie Atom- und Kernphysik.</p>		Spektroskopie, Thermodynamik, Theoretische Chemie, etc.

10 Quantenchemie			
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :</b> Mathematik (Funktionen, Stetigkeit, Differentiation, Taylorreihen, Umkehrfunktionen,	<p><b>Quantenchemie I</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>I. Lösung der Schrödingergleichung am Beispiel des <i>Teilchens im Kasten</i> (Lösung einer Differentialgleichung, Bestimmung von Integralen)</li> <li>II. Postulate der Quantenmechanik           <ul style="list-style-type: none"> <li>1. Bedeutung Wellenfunktion + ihres Quadrats</li> <li>2. Observablen und die zugehörigen linearen, hermitesche Operatoren</li> <li>3. Eigenwertgleichung, Eigenwert und Eigenfunktion</li> <li>4. Superposition von Zuständen, die Heisenberg'sche Unschärferelation, Varianz und Standardabweichung sowie kommutierende Operatoren</li> </ul> </li> </ul>		<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> Wellenfunktion, Schrödinger- Gleichung, Spektroskopie

<p>Integration, Vektorrechnung, Matrizen, Lineare Gleichungssysteme, Permutationen, Determinanten sowie gewöhnliche Differentialgleichungen) Physik (Schwingungs- und Wellenlehre) Atomaufbau</p> <p>Quantenchemie Mathematik (Funktionen, Stetigkeit, Differentiation, Taylorreihen, Umkehrfunktionen, Integration, Vektorrechnung, Matrizen, Lineare Gleichungssysteme, Permutationen, Determinanten sowie gewöhnliche Differentialgleichungen) Physik (Schwingungs- und Wellenlehre) Atomaufbau</p>	<p>5. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung: Anwendung auf reine Zustände und Superpositionen</p> <p>III. Vielelektronensysteme</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Der Spin: Eine kurze Einführung, Raum- und Spinorbitale</li> <li>2. Pauli-Prinzip</li> <li>3. Determinanten als einfachste Mehrelektronenwellenfunktion</li> <li>4. Paardichten</li> <li>5. Multiplizitäten</li> </ol> <p>IV. Energie- und Eigenschaftserwartungswerte von Determinanten</p> <p>V. Das Hartree-Fock-Verfahren</p> <p>VI. Matrixelemente zwischen Determinanten (Biradikale)</p> <p>VII. Basissatzentwicklung zur näherungsweisen Lösung der Schrödinger-Gleichung (LCAO / Variationsprinzip)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Überführung der Schrödinger-Gleichung in eine Matrixgleichung</li> <li>2. Operator- vs. Matrixeigenschaften</li> </ol> <p>(Lösung einer Differentialgleichung durch Basissatzentwicklung)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Die Born-Oppenheimer Näherung</li> <li>• Die chemische Bindung im <math>H_2^+</math>-Molekül-Ion (Ruedenberg-Bild) im Rahmen des LCAO-Ansatzes <ul style="list-style-type: none"> <li>◦ Beiträge zur Bindung durch: Das reduzierte Resonanzintegral <math>\beta</math>; quasiklassisch vs. quantenmechanisch; potentielle vs. kinetische Beiträge zu <math>\beta</math>; Einfluss der Hybridisierung</li> </ul> </li> <li>• Das <math>H_2</math>-Molekül <ul style="list-style-type: none"> <li>◦ Übergang von einer Ein- zur Mehrelektronenwellenfunktion; Fehler des LCAO-Eindeterminanten-Ansatzes (Hartree-Fock) für <math>H_2</math>; Korrelation von Elektronen im Rahmen der Konfigurationswechselwirkungsmethode; VB vs. MO-Theorie</li> </ul> </li> <li>• Der quantenchemische Ausdruck für die Bindungsenergie eines beliebigen</li> </ul>	
--	--	--

Quantenmechanik		Moleküls in der MO-LCAO-Näherung und seine physikalische Interpretation <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aufbau MOs aus Fragmentorbitalen: Lineare <math>AH_2</math> Systeme, gewinkelte <math>AH_2</math> Systeme, <math>A_2</math> Moleküle; Aufbau komplexer Moleküle (Kohlenwasserstoffe, Formaldhyd): delokalisierte vs. lokalisierte MOs, Photoelektronenspektroskopie,</li> <li>• Orbitalkorrelationendiagramme: Walshdiagramme, Grenzfälle kovalenter und ionogener Bindung, Veränderungen Orbitalenergien und resultierende Trends, als Beispiel für Reaktionsdiagramme</li> </ul>		
-----------------	--	---	--	--

11 Reaktionsmechanismen / Reaktive Zwischenstufen		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b></p> <p>Metallorganische Chemie, Koordinationschemie, Stereochemie, Anorganische / Organische Chemie</p>	<p><b>Konzept(e):</b></p> <p>Aktivierungsparameter anorganischer, organischer und metallorganischer Reaktionen; Substitution, oxidative Addition, reduktive Eliminierung, Intermolekulare Insertionsreaktionen, Intramolekulare Insertionsreaktion, Reaktionen am Liganden,</p> <p>Elektronenübertragungsreaktionen</p> <p>Radikale (Herstellung, Struktur, Stabilität, Reaktionen), Carbenium-Ionen (Herstellung, Struktur, Stabilität, Reaktionen), Carbanionen (Herstellung, Struktur, Stabilität, Reaktionen), Carben, Nitren, Konjugation Isotopenmarkierung, Abfang von Zwischenstufen, Hammond Postulat, (zeitauflöste Spektroskopie), grundlegende stereoelektronische Konzepte mit Orbitaldarstellung</p> <p>Radikalkettenreaktionen, nucleophile Substitution, elektrophile Addition, Eliminierung, aromatische Substitution (elektrophil und nucleophil), Heterozyklen, Carbonylreaktionen (inkl. Enol(ate)), Oxidation und Reduktion, einige wichtige Umlagerungen</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b></p> <p>Katalyse: Homogene und heterogene Katalyse (technische Katalysecyclen, Vertiefung Chemie der homogenen und heterogenen Katalyse), Technische industrielle Prozesse, ...</p> <p>Materialien: Nanotechnologie, Molekulare Elektronik (molekulare Drähte etc.), Metallorganische / Komplexchemische Netzwerke, Spezialpolymere, Selbstorganisationsprinzipien, Molekulare Motoren, Funktionsmaterialien, Hybridmaterialien, Gasphasenabscheidungsprozesse, ...</p>

	<p><b>Zu vermittelnde Kompetenzen:</b> Einfache Reaktionsmechanismen chemisch korrekt vorschlagen und formulieren; Experimente zur Überprüfung von postulierten Mechanismen vorschlagen</p>	<p>Biokatalyse: Elektronentransfer und Aktivierung kleiner Moleküle in Metalloenzymzentren, ... Energiegewinnung, Energiespeicherung, Energietransport, ...  Syntheseplanung</p>
--	---	--

12 Grundlagen der Molekülspektroskopie			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :	Modul	Konzepte	Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:
Mathematik (Lineare Algebra, Differential- und Integralrechnung), Allgemeine Chemie, Physik (Mechanik, Elektrizitätslehre, Optik, Atom- und Molekülaufbau), Grundlagen der Quantenmechanik	<p>Mit der Molekülspektroskopie steht uns ein Mittel zur Verfügung, das uns neben der Identifizierung von Molekülen die Bestimmung von Molekülgeometrien, elektrischen und magnetischen Moleküleigenschaften sowie von Bindungsstärken ermöglicht. Ihren experimentellen Methoden liegt zugrunde, dass Moleküle elektromagnetische Strahlung absorbieren und emittieren. Dabei ändern sich in Abhängigkeit von der Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung die Bewegungszustände der Moleküle, (Rotation, Schwingung, Elektronen- und Kernzustand). Hier sollen die wichtigsten Grundlagen der spektroskopischen Methoden vermittelt werden.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Elektromagnetische Strahlung, elektrische und magnetische Eigenschaften der Materie</li> <li>• Wechselwirkung von Licht mit Molekülen, Lambert-Beer'sches Gesetz, Übergangsdipolmoment, optische Aktivität</li> <li>• Rotations-, Schwingungs- und Raman-Spektroskopie</li> <li>• Elektronenschwingungsspektren</li> <li>• Fluoreszenz-Spektroskopie, moderne Verfahren der Fluoreszenzmikroskopie</li> </ul>	Analytik: Identifizierung von Substanzen, Strukturaufklärung, Bioanalytik

		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Photoelektronenspektroskopie</li> <li>• NMR- und ESR-Spektroskopie</li> </ul>		
--	--	--	--	--

## 13 Stereochemie -> entfällt als eigenes Kapitel

14 Stoffliche Systeme (Chemie der Elemente)		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b></p> <p>Allg., AC: Atombau, Quantenzahlen, Orbitale, atomare Terme; kovalente, polare und ionische Bindung, normale und dative (koordinative) Bindung,</p> <p><b>Analytik:</b> Protolyse, Säure-Base-Titrationen, Komplexometrie.</p> <p><b>OC:</b> keine.</p> <p><b>PC:</b> Bindungsmodelle, chemisches Gleichgewicht, Beeinflussung des Gleichgewichts,</p>	<p><b>Konzepte:</b></p> <p>Chemie der Elemente: Hauptgruppen + Nebengruppen, (Vorkommen, Darstellung, physikalische und chemische Eigenschaften, Verwendung, wichtige Verbindungen (mit H, O und X)).</p> <p>Wasserstoff (<b>Isootope, Hydride, Brennstoffzelle</b>), Sauerstoff (<b>Allotrope, Wasserhärte, H-Brücken, Hydratation</b>), Edelgase (Linde-Verfahren), Halogene (Charge-Transfer-Komplexe, Chloralkalielektrolyse), Chalkogene (Schwefelsäuredarstellung), Pniktide (HNO<sub>3</sub>-Darstellung, Haber-Bosch-Verfahren, Ostwald-Verfahren), Kohlenstoffgruppe (<b>Elementmodifikationen, Boudard-Gleichgewicht, Si-Einkristallzüchtung, Dotierung, Silicate</b>), Borgruppe (Drei-Zentren-Bindung, amphotere Verbindungen, <b>Spinell</b>), Alkali- und Erdalkalimetalle (<b>Solvay-Verfahren, Gips, Mörtel</b>).</p> <p><b>Herstellungsverfahren Metalle (Schmelzflusselektrolyse: Al, Carbothermisch: Fe, Metallothermisch: Ti, Kupfergewinnung, nasse Elektrolyse, Cyanidlaugerei, chemischer Transport)</b>, Stoffchemie der d-Elemente (Vorkommen, Verwendung, wichtige Verbindungen)</p> <p>Bindungsverhältnisse in organischen Verbindungen (Hybridisierungsmodell, Bindungstypen und lokale Bindungsgeometrie, konjugierte Bindungssysteme (z.B. 1,3-Diene, Aromaten), Funktionelle Gruppen und Stoffklassen, Nomenklatur organischer Verbindungen, Stereochemie organischer Verbindungen: Konstitution, Konfiguration, Konformation (incl.</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b></p> <p>Koordinationschemie/Metallorganik.</p> <p>Festkörperchemie:..</p> <p>Anorg. Molekulchemie:..</p> <p>Reaktionsmechanismen/ reaktive Zwischenstufen</p> <p>Syntheseplanung</p> <p>Makromolekulare Chemie</p> <p>Spektroskopie</p>

<p>Gleichgewichtkonstante und freie Reaktionsenthalpie; Standardpotentiale, Nernstsche Gleichung.</p> <p><b>Mathematik, Physik:</b> Atombau, Bindung, Logarithmus, Dreisatz, Integrieren, Differenzieren</p>	<p>Torsionspotentiale), Isomerie-Stammbaum, Stereosiomere (Enantiomere, Diastereomere, optische Aktivität, verschiedene Nomenklaturen zur Bezeichnung der absoluten und relativen Konfiguration), cyclische Verbindungen</p> <p>Vorstellung verschiedener grundlegender Stoffklassen der organischen Chemie mit deren typischen Strukturelementen, Reaktivitäten und Synthesemethoden: Alkane, Alkene, Alkine, Halogenalkane, Aromaten, Heteroaromaten, Alkohole, Ether, Thiole; Thioether, Amine, Carbonylverbindungen (inkl. Carbonsäurederivate), Aminosäuren, Peptide, Kohlehydrate, Nucleinsäuren, Proteine, Polymere</p> <p>Abgangsgruppen/Nucleophile/Elekrophile/Basizität Delokalisierung/Mesomerie/Konjugation/Aromatizität Nomenklatur organischer Verbindungen Struktur/Stereochemie/Konformation ggf hier hin ?</p> <p><b>Methoden:</b> Qualitative Analyse, Trennungsgang; OC: Siehe Praktikumsausarbeitung</p>	
--	---	--

15 Charakterisierung Stofflicher Systeme		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen :</b> Grundlegende Stoffkenntnisse in den Bereichen <b>Anorganische und Organische Chemie</b></p>	<p><b>Ziel: Anwendung der folgenden Techniken zur Aufklärung von Molekülstrukturen</b></p> <p><b>Konzepte:</b> <i>Massenspektrometrie</i>: Fragmentierungsmechanismen organischer Verbindungen (z.B. alpha-Spaltung, McLafferty), Detektion, Kopplungstechniken <i>Molekülspektroskopie</i>: UV-VIS, IR und Raman; Strukturabhängigkeit der Bandenlage, Symmetrie</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> OC: Identifizierung von Substanzen, Beurteilung des Syntheseerfolges, Trennung komplexer Gemische AC: Strukturbeschreibung in der Festkörper- und Materialchemie</p>

<p>Grundlagen der Spektroskopie und Elektrochemie sowie zur Kinetik aus den Bereichen der <b>Physikalischen Chemie</b>, grundlegende Aspekte der Thermodynamik wie Gleichgewichtskonstante, Energieumsatz und Phasenübergänge; aus der Allgemeinen und Anorganischen Chemie: Kugelpackungen, Symmetrielehre</p> <p><b>Mathematik:</b> e-Funktion, Logarithmus, Differenzieren und Integrieren; Gruppentheorie</p> <p><b>Physik:</b> Elektrizitätslehre, Optik, Mechanik, Messtechnik, Atom- und Molekülbau</p>	<p><b>NMR-Spektroskopie:</b> Spektrenparameter <math>^1\text{H}</math> und <math>^{13}\text{C}</math> (Anzahl Signale, chemische Verschiebung, Integrale, Multiplizität, Kopplungskonstanten) und deren Strukturabhängigkeit (inkl. räumliche Struktur), Grundlagen der Auswertung mehrdimensionaler NMR-Spektren (COSY, HS/MQC, HMBC, NOESY, TOCSY), Symmetrie und Topizität, Linienbreite und Dynamik</p> <p><b>Beugungsmethoden:</b> Translationssymmetrie, Elementarzellenkonzept, Punkt- und Raumgruppen, Beugung am Gitter, Röntgen-, Elektronen und Neutronenstrahlung, reziprokes Gitter, Strukturbestimmung und – verfeinerung, Strukturbeschreibung</p> <p><b>Elektronenmikroskopie:</b> Raster- und Transmissionselektronenmikroskopie, Kopplung zur energiedispersiven Röntgenspektroskopie und Elektronenenergieverlustspektroskopie</p> <p><b>Elektronenspinzustände:</b> Magnetismus (Magnetwaagen und Magnetometer, Feld- und Temperaturabhängigkeit des magnetischen Momentes), Mößbauerspektroskopie und ESR-Spektroskopie</p> <p><b>Verschiedenes:</b> Datenbanken, Spektrenbibliotheken, Programmpakete zur Strukturbestimmung</p> <p><b>Ziel:</b> Kombination oben genannter Methoden zur Reinheitsüberprüfung/Gemischanalyse und Strukturaufklärung, vollständige Zuordnung aller relevanten Banden(IR), Fragmente(MS), Reflexe (Röntgenstrukturanalyse) und Signale (NMR); Abschätzung der Relevanz der Methode für die Fragestellung; Strukturbeweise von Syntheseprodukten</p> <p><b>Praktikum:</b></p>	<p><b>Fachübergreifend:</b> Struktur-Eigenschaftsbeziehungen in Biochemie, Pharmazie, klinischer Chemie, Biologie, Materialchemie, Bioinformatik, Medizin und Medizintechnik</p> <p><b>Master</b></p> <p>Im Bachelorstudium werden die Grundlagen und die Breite des modernen instrumentellen Methodenspektrums für eine Vertiefung und Erweiterung im Masterstudiengang geschaffen</p> <p><b>Bedeutung für die berufl. Praxis</b></p> <p>Struktur-Analytik in Forschung, Entwicklung und Qualitätsmanagement in der chemischen und pharmazeutischen Industrie, Forschungsinstituten, Untersuchungsanstalten/Behörden, Kontrolllabor, Analytiklabors in allen Industriezweigen</p>
--	--	--

	<p>Ggf. Versuche aus den Bereichen der Spektroskopie: z.B. Vermessung einer Substanz mit verschiedenen Methoden mit dem Ziel der Strukturaufklärung aus der Kombination der Informationen.</p> <p>Mindestens jedoch: Interpretation von Spektren aus Syntheseprodukten aus Praktika organische u. anorganische Chemie</p> <p><b>Seminar:</b> Strukturaufklärung anhand konkreter Fallbeispiele. Komplementarität der Methoden.</p> <p><b>Anmerkungen:</b> Die physikalischen und quantenmechanischen Grundlagen der Spektroskopie werden von der Physikalischen bzw. Theoretischen Chemie angeboten. Hier müssen die Anteile abgestimmt werden.</p>	
--	---	--

16 Symmetrie			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :			Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:

17/I Präparatives Arbeiten im Labor			
Benötigt Voraussetzungen aus	Konzepte:	Exotherme irreversible Reaktion; Gleichgewichtsverschiebung (z.B. Wasserabscheider);	Voraussetzung für nachfolgende

<b>anderen Lehrveranstaltungen :</b>  <b>Allg.:</b> Stöchiometrie, Molarität, Nomenklatur; grundlegende Laboratoriumspraxis  <b>AC:</b> Reaktionstypen, Qualitative und quantitative Analysemethoden, grundlegende Stoffkenntnisse  <b>Analytik:</b> Spektroskopie (IR, UV, NMR, MS), Schmelzpunkt, Brechungsindex.  <b>OC:</b> Funktionelle Gruppen, grundlegende Reaktionsmechanismen; wichtige Lösemittel, Reagenzien..  <b>PC:</b> Reaktionskinetik, Thermodynamik.  <b>Pharmakologie:</b> Toxizität	<p>Säure- oder Basenkatalyse; Metall- und Organokatalyse. Typische Reaktionen wichtiger Stoffklassen: Radikalkettenreaktionen, nucleophile Substitution, Eliminierung, Addition, aromatische Substitution, Carbonylreaktionen, Stereoselektive / Stereospezifische Reaktionen; Umlagerungen, Orbitalkontrollierte Reaktionen</p> <p>Reaktionen in/aus Lösung (Komplexbildung, Säure-Base-Reaktionen, Fällungsreaktionen, Redoxreaktionen), Hochtemperatur-Präparation aus Schmelzen und im Festkörper, Tiegelmaterialien, Arbeiten im Vakuum und unter Schutzgas, Arbeiten mit kondensierten Gasen</p> <p><b>Methoden:</b> Übertragung einer allgemeinen Synthesevorschrift in konkreten Laboratoriumsansatz vorgegebenen Maßstabs; Zeitplanung</p> <p>Durchführung von Reaktionen im Makro-, Halbmikro- und Mikromaßstab</p> <p>Reaktionsumsatz im „Batch“ Verfahren unter Erhitzen oder Kühlen</p> <p>Gleichgewichtsverschiebung, kontinuierliche Extraktion</p> <p>Grundoperationen: Filtrieren, Zentrifugieren, Extrahieren</p> <p>Ausgangsmaterialien oder Produkte reinigen durch</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Destillation bei Normaldruck und im Vakuum</li> <li>- Umkristallisation</li> <li>- Chromatographische Trennung (Säulen/Flash/präp.DC)</li> <li>- Sublimation</li> </ul> <p>Trocknen und Entgasen von Lösemitteln, Reaktionsdurchführung unter Wasser-</p>	<b>Spezialgebiete:</b>  Weiterführende Synthesepraktika im Master of Science Chemie  Präparative Bachelorarbeiten  Forschungspraktika in Organischer und Anorganischer Chemie
--	--	---

chemischer Verbindungen	<p>und/oder Sauerstoffausschluss</p> <p>Herstellung und Nutzung von Organometallverbindungen (z.B. Grignard)</p> <p>Reaktionen mit Gasen (z.B. Hydrierung)</p> <p>Reaktionen bei tiefen Temperaturen</p> <p>Mehrstufige Reaktionen, Verwendung von Schutzgruppen</p> <p>Anwendung der UV/Vis-, IR-, MS- und NMR-Spektroskopie</p> <p>Spezielle Techniken: kontinuierliche Reaktionsführung im Mikroreaktor, photochemische Reaktion, Feststoffreaktion, Autoklavenreaktion,</p>		
----------------------------	---	--	--

<b>17/II Instrumentelle (physikalische-chemische) Methoden</b>			
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :</b>	<b>Modul</b>  In den Praktika sollen die Studierenden grundlegende physikalisch-chemische Arbeitstechniken kennenlernen und den Stoff der Vorlesungen Physikalische Chemie in die experimentelle Praxis erfolgreich umsetzen. Die Studierenden sollen außerdem moderne Verfahren und Apparaturen kennenlernen, die zur quantitativen Beschreibung chemischer Prozesse dienen.	<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b>	
Grundvorlesungen der Physikalischen Chemie	<b>Konzepte</b>  Es sollen insgesamt ca. 20 Versuche (verteilt auf 2 Semester) zur Thermodynamik, Elektrochemie, Kinetik, Struktur der Materie und Quantentheorie Spektroskopie,		

	<p>Mikroskopie, Grenzflächenchemie sowie computergestützte Simulationen durchgeführt werden.</p> <p><u>Beispiele:</u></p> <p>Gaskinetik/Transportphänomene: Diffusion, Viskosität (Molmassenbestimmung).</p> <p>Thermodynamik: Dampfdruck von Flüssigkeiten, spezifische Wärme, Entropie, Zustandsgleichungen, Hess'scher Wärmesatz, Mischphasenthermodynamik.</p> <p>Grenzflächen: Adsorption, Grenzflächenspannung, Gleichgewichte an Membranen.</p> <p>Elektrochemie: Ionentransport, Leitfähigkeit von Elektrolytlösungen, Überführungszahlen, EMK, Aktivitätskoeffizienten.</p> <p>Kinetik: Kinetik 1. Ordnung, Arrhenius-Gesetz, Kinetik mit gekoppeltem Gleichgewicht, Bestimmung von Teilordnungen, Einfluss der Ionenstärke.</p> <p>Struktur der Materie: Elektrische und magnetische Eigenschaften von Flüssigkeiten, Dipolmoment, Suszeptibilität, Rotations-Schwingungsspektroskopie, Elektronen-Schwingungsspektroskopie, Grundlagen der Computerchemie, computergestützte Simulationen.</p> <p>Begleitendes Seminar:</p> <p>Sicherheitsbelehrung, Verhalten im Labor, grundlegende Auswertemethoden, Fehlerrechnung, Einführung in Computerprogramme (z.B. Excel, Origin, Mathcad).</p>	
--	---	--

## 18 Theorie der Chemischen Bindung -> Kapitel komplett gestrichen

19 Klassische und Statistische Thermodynamik			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :	Konzepte	Dieses Modul vermittelt die Grundlagen und Konzepte zur physikalisch-chemischen Beschreibung makroskopischer Zustände und chemischer Prozesse. Durch Verknüpfung der im Modul „Allgemeine Chemie“ gesammelten Erkenntnisse zur chemischen Bindung	Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:

Mathematik (Lineare Algebra, Differential- und Integralrechnung), Allgemeine Chemie, Grundlagen der Quantenmechanik und Spektroskopie	<p>und Reaktivität soll eine quantitative Beschreibung zur Bilanzierung und Vorhersage von Stoff- und Energieumsätzen entwickelt werden. Die praktische Bedeutung für die Chemie liegt in der Möglichkeit, aufgrund von Messdaten Energieänderungen und damit verknüpfte Gleichgewichtsänderungen bei Phasenumwandlungen und chemischen Reaktionen berechnen und vorhersagen zu können. Die Statistische Thermodynamik ist das Bindeglied zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Thermodynamik. Wichtige Größen der Thermodynamik können mit Hilfe der Statistischen Thermodynamik direkt aus quantenmechanischen Größen abgeleitet werden. Dies gilt insbesondere für ideale Gase.</p> <p><b>Klassische Thermodynamik</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aggregatzustände und zwischenmolekulare Wechselwirkung</li> <li>• Ideale und reale Gase, kinetische Gastheorie, Flüssigkeiten und Festkörper</li> <li>• Die Grundgleichungen der Thermodynamik, Zustandsgrößen, thermodynamische Potenziale, Hauptsätze, Fundamentalgleichungen</li> <li>• Thermochemie, Kalorimetrie</li> <li>• Phasenübergänge, Phasengleichgewichte, Mischphasen (chemisches Potenzial)</li> <li>• Kolligative Eigenschaften, Osmose</li> <li>• Das chemische Gleichgewicht (Temperatur- und Druckabhängigkeit)</li> <li>• Elektrochemische Gleichgewichte (Elektrodenpotenziale, Nernstsche Glg. elektrochemisches Potenzial, Galvanische Zellen, Elektroysezellen)</li> <li>• Grenzflächenerscheinungen, Adsorptionsphänomene, Kolloide</li> </ul> <p><b>Statistische Thermodynamik</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundlagen der klassischen statistischen Mechanik: Ensembles, Maxwell-Boltzmann-Statistik, Zustandssummen, Zusammenhang mit thermodynamischen Größen</li> <li>• Grundlagen der Quantenstatistik: Systeme aus ununterscheidbaren Teilchen, Fermi-Dirac-, Bose-Einstein- und Maxwell-Boltzmann-Statistik</li> </ul>	Materialwissenschaften Technische Chemie Kolloidchemie
--	---	--

		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Anwendungen der statistischen Thermodynamik: Berechnung chemischer Gleichgewichte idealer Gase, Absolutberechnung von Reaktionsgeschwindigkeiten, reale Gase und Flüssigkeiten, Festkörper (Wärmekapazitäten), makromolekulare und biomolekulare Systeme</li> <li>• Computersimulationsmethoden (Molekular-dynamik- und Monte Carlo-Verfahren)</li> </ul>		
--	--	--	--	--

<b>20 Toxikologie und Rechtskunde</b>				
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :</b> <b>keine</b>	<b>Konzepte Toxikologie</b>  Aufgaben und Definition der Toxikologie; Grundlagen der Toxikologie (Toxikokinetik (Resorption, Distribution, Elimination), Toxikodynamik, Fremdstoffmetabolismus), Akut und chronisch toxische Wirkungen ausgewählter Substanzen, Organtoxizität, Umweltgifte, toxikologische Testmethoden (Akute und chronische Toxizitätstests, Mutagenität und Cancerogenität); Prüfmethoden der Toxikologie, Risikoermittlung und Risikobewertung (Grenzwerte); Arbeitsschutz(?)  krebszeugende, erb-gutverändernde, fortpflanzungsgefährdende und fruchtschädigende Stoffe; toxische Wirkungen von Atemgiften, Metallen, Lösemitteln, Kunststoffen, polyzyklischen Kohlenwasserstoffen (PAK, Dioxine, PCB), Nitro- und Nitrosoverbindungen, sowie aromatischen Aminen; Biozide und Ökotoxikologie; Vergiftungsbehandlung: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Toxizität von Umweltpartikeln</li> <li>• Grundlagen der Toxikokinetik/-dynamik</li> <li>• Fremdstoffmetabolismus</li> <li>• Toxische Wirkungen</li> <li>• Mutagenese und DNS-Reparatur</li> <li>• Kanzerogenese</li> <li>• Metalle und metallorg. Verbindungen</li> </ul>	<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> <b>Überall</b>		

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rauchen und Passivrauchen</li> <li>• Lösungsmittel und Atemgifte</li> <li>• Biozide</li> <li>• Biogene Gifte</li> </ul> <p><b>Konzepte Rechtskunde</b> Vermittlung wichtiger rechtlicher Aspekte im Hinblick auf die Laborarbeit als Chemiker; jeweils geltende deutsche und europarechtliche Vorschriften des Chemikalien- und Gefahrstoffrechtes; Sanktionen bei Rechtsverstößen (Einstufungs-/Kennzeichnungspflichten, Verbote, Erlaubnis- und Anzeigepflichten, Arbeitsschutz)</p>		
--	---	--	--

**21 „Übermolekulare“ Chemie / Nicht-koordinative Verbindungen -> Kapitel komplett gestrichen**

**22 Versuchsplanung / Bewertung der Ergebnisse / Statistik -> in Kapitel 2 übernommen**

<b>23 Biochemie</b>		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :</b> <b>Allg., AC:</b> kovalente, polare und ionische Bindung, nicht-kovalente Wechselwirkungen <b>Analytik:</b> Protolyse, Säure-Base-Titrationen, Puffer, Komplexometrie, Chromatographie <b>OC:</b> Chiralität,</p>	<p><b>Konzepte:</b> Aufbau der Zelle (Organellen in Tier und Pflanzenzellen, Bedeutung der Kompartimentierung) Proteine (Aminosäuren, Peptidbindung, Ramachandran-Plot, Proteinfaltung und Strukturmotive, Proteinreinigung, Eigenschaften von Proteinen) Nukleinsäuren (Nukleotide, Watson-Crick-Basenpaarung, Polymerase-Kettenreaktion, Sequenziermethoden, der genetische Code) Enzyme (Beschreibung der Enzymkinetik, grundlegende enzymatische Mechanismen, Cofaktoren, Regulation und Inhibition von Enzymaktivität) Membranen (Mizellen und Vesikel, Aufbau biologischer Membranen, Permeabilität, Fluidität von Membranen, Fluid-Mosaik-Modell, Flip-Flop) Oligosaccharide (Zucker, glykosidische Bindung, Nomenklatur von</p>	<p><b>Voraussetzung für nach- folgende Spezialgebiete:</b> <b>Biomakromoleküle:</b> Replikation, Transkription, Translation, Splicing, RNAi, Myosin und Kinesin, Signaltransduktion <b>Biokatalyse:</b> Einsatz von Enzymen in industriellen Anwendungen, Racematspaltung, Optimierung von Enzymen <b>Antikörper:</b> Funktion <i>in vivo</i>, Herstellung (polyklonal, monoklonal), gelenkte Evolution,</p>

<p>funktionelle Gruppen und ihre Reaktivität (insb. Carbonylverbindungen), Nucleophilie/Elektrophilie, Biomolekülklassen.</p> <p><b>PC:</b> Gleichgewichtskonstante und freie Reaktionsenthalpie; Standardpotentiale, Nernstsche Gleichung</p> <p><b>Physik:</b> Licht, Farbe und Energie, Absorption, Fluoreszenz</p>	<p>Oligosacchariden, Glykosylierung, Zell-Zell-Erkennung) Grundlegende Stoffwechselwege (z.B. Glykolyse (aerob, anaerob), Zitratzyklus, Atmungskette, <math>\beta</math>-Oxidation von Fettsäuren, Gluconeogenese, Aminosäurebiosynthese; Photosynthese; Gemeinsamkeiten biochemischer Reaktionsfolgen, Regulation von Stoffwechselwegen)</p> <p><b>Analytik:</b> Gelelektrophorese (Proteine, DNA), Isoelektrische Fokussierung, HPLC, Schmelzpunkte von DNA und Membranen, DNA-Sequenzierung, Grundlagen der Proteinstrukturaufklärung</p> <p><b>Praktikum:</b> Transformation und Selektion von Bakterien, Proteinexpression und Proteinanalyse durch SDS-PAGE, Proteinbestimmung, PCR und Gelelektrophorese, Enzymkinetik</p>	<p>rekombinante Antikörper</p> <p><b>Proteinchemie:</b> Expressions-systeme, Reinigungsstrategien, Analytik, Modifikation von Proteinen, Proteinligation</p> <p><b>Chemie der Nukleinsäuren:</b> DNA-Festphasensynthese, Mutagenese, Photoreaktionen von DNA, Ribozyme, Aptamere</p>
--	---	--

24 Makromolekulare Chemie		
<p><b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr-veranstaltungen :</b></p> <p>Bachelorvorlesungen AC, OC, PC, Analytische Chemie</p>	<p><b>Konzepte:</b></p> <p><b>Allgemein:</b> Grundbegriffe der Makromolekularen Chemie, Nomenklatur, Systematik der Makromolekularen Chemie nach Reaktionstypen und Polymerklassen, makromolekulare Strukturprinzipien, Strukturen in Lösung und im Festkörper.</p> <p><b>Synthesen von Makromolekülen:</b> Radikalische, kationische, anionische und koordinative Polymerisation, Polykondensation, Polyaddition, kontrollierte radikalische Polymerisationen, spezielle Reaktionstechniken (Emulsions-, Suspensions-, Fällungs-, Lösungs-, und Grenzflächenpolymerisation).</p> <p><b>Analyse von Polymeren:</b> Molekulargewichtsanalyse, thermische und strukturelle</p>	<p><b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b></p> <p>Makromolekulare Chemie im Master Materialwissenschaften Technische Chemie</p>

	<p>Analyse im Festkörper, mechanische Eigenschaften, Rheologie in Lösung und in Schmelzen, Oberflächeneigenschaften, Stabilität kolloidaler Systeme.</p> <p><b>Makromolekulare Stoffchemie:</b> Polyolefine, Polyester, Polyamide, Polyharnstoffe, Polyurethane, thermoplastische Elastomere, Elastomere, Duromere, Biopolymere, biologisch abbaubare Polymere, elektrisch leitfähige Polymere, transparente Polymere, Additive für Polymere.</p> <p><b>Verarbeitung von Polymeren:</b> Film- und Faserherstellung, Schmelzextrusion, Spitzgießen, Blasformen, Schäumen, Verbundwerkstoffe.</p>	
--	---	--

## Anhang

A1 Grundlagen Wissenschaftlichen Arbeitens		
<b>Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehrveranstaltungen:</b> keine	<p><b>Konzepte:</b></p> <p><b>Allgemein:</b> Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis (DFG Standard), Ethik der Wissenschaften, Zeitmanagement, wissenschaftliche Methodiken</p> <p><b>Aufbau wissenschaftlicher Vorgehensweise:</b> Thema, Motivation, Hypothese, Konzept, Arbeitsplan, Ergebnisse, Diskussion, Schlussfolgerung, Ausblick</p> <p><b>Recherchieren:</b> Literaturrecherche, Quellen- und Datenrecherche, sekundärliteratur via Science Finder, Qualitätssicherung insbesondere bei Internetstudien (<a href="#">Googlen</a>), Lesen wissenschaftlicher Texte, Interpretation wiss. Texte, Fernleihe, Umgang mit wiss. Literatur.</p> <p><b>Schriftliches Verfassen von wissenschaftlichen Arbeitens:</b> Aufbau, Gliederung und</p>	<b>Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:</b> Bachelorarbeit, Masterstudium, Dissertation

	<p>Formatierung einer wiss. Arbeit; Literaturverzeichnis; korrekt zitieren; Schreiben eines wiss. Antrages; Exposee-Erstellung; Erstellung eines Posters; Anfertigen eines Protokolls; Korrektur; Bewertungskriterien für wiss. Arbeit (schriftlicher Form, mündl. Prüfungen / Kollegs); Erstellen von Patenten; wiss. Sprache</p> <p><b>Präsentieren:</b> Präsentationsformen; Präsentationsvorbereitung; Phasen und vor allem Inhalte einer Präsentation (Checkliste); Bewertungskriterien eines Vortrages, Diskussion; Nachbereitung; Ziele, Anforderungen und technische Hilfsmittel einer Visualisierung; wie vermeide ich Nervosität? Sprache (mit Übungen); wiss. Sprache.</p>		
--	---	--	--

A2 Wirtschaftschemie (Wirtschaftswissenschaftliche Module)			
Benötigt Voraussetzungen aus anderen Lehr- veranstaltungen :	Konzepte:	Voraussetzung für nachfolgende Spezialgebiete:	
Gute Mathematikkenntnisse, insbesondere Differenzial- und Integralrechnung	<p><b>Konzepte:</b></p> <p>Prinzipiell existieren zwei verschiedene Modelle, nach denen das Studienfach Wirtschaftschemie studiert werden kann: Auf der einen Seite existiert das <b>Bändermodell</b> (Chemie und Wirtschaftswissenschaften werden sowohl im Bachelor- als auch im Masterstudium gelehrt und auf der anderen Seite das <b>konsekutive Modell</b> (Grundlagenvermittlung der Chemie mit anschließender Vertiefung der Chemie und der Betriebswirtschaft).</p> <p>Im Falle des konsekutiven Modelles sollten im Bachelorstudium die folgenden wirtschaftswissenschaftlichen Module angeboten werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Internes Rechnungswesen und Controlling (gegebenenfalls in Verbindung mit Investitionsrechnung)</li> <li>• Externes Rechnungswesen</li> </ul>	Wirtschaftschemie, Nachhaltige Produktionsprozesse, Vertiefungsvorlesungen Technische Chemie	

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Marketing</li> <li>• Strategie und Unternehmensführung</li> <li>• Makroökonomie</li> <li>• Mikroökonomie</li> </ul> <p>Die ersten vier der genannten Module könnten auch Gegenstand eines übergreifenden Modules „Einführung in die Betriebswirtschaftslehre“ sein, Makro- und Mikroökonomie könnten zu einem übergreifenden Modul „Einführung in die Volkswirtschaftslehre“ zusammengefasst werden</p> <p>Möglicherweise könnten auch optional die folgenden Module bereits im Bachelorstudium angeboten werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Recht (ggf. Patentrecht)</li> <li>• Innovationsmanagement (gegebenenfalls in Verbindung mit Projektmanagement)</li> <li>• Marketing (mit einem Schwerpunkt auf B2B-Marketing)</li> <li>• Produkt und Prozessmanagement</li> </ul> <p>Da üblicherweise die inhaltliche und konzeptionelle Ausgestaltung der aufgeführten Module den wirtschaftswissenschaftlichen Fakultäten unterliegt, können hier nur bedingt Empfehlungen hinsichtlich konkreten Konzepten und Inhalten ausgesprochen werden.</p>	
--	--	--