



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



Empfehlungen der GDCh-Studienkommission

zum
Bachelorstudium Chemie
an Universitäten

Herausgeber / Redaktion

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh)
 Varrentrappstraße 40-42
 60486 Frankfurt am Main
 www.gdch.de

Geschäftsführer: Prof. Dr. Wolfram Koch
 Registernummer beim Vereinsregister: VR 4453
 Registergericht: Frankfurt am Main

Kontakt:

Dr. Hans-Georg Weinig
 Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
 Email: h.weinig@gdch.de

Layout und Satz

PM-GrafikDesign
 Peter Mück, Wächtersbach

Druck

Seltersdruck Vertriebs- und Service GmbH & Co KG
 Selters

August 2021

Bildnachweis:
 Titelbild: © Blue Planet Studio - stock.adobe.com; Seite 4: © NDABCREATIVITY - stock.adobe.com

| | | |
|----------|--|----|
| 1 | Einleitung | 5 |
| 2 | Kerncurriculum des Bachelorstudiums Chemie (4 Semester) | 14 |
| 2.1 | Vorlesungen, Seminare und die Bedeutung von Übungen | 14 |
| 2.2 | Ausbildung im Experimentieren, Messen und Auswerten: Sinn und Stellenwert der zahlreichen Laborpraktika | 15 |
| 2.3 | Vier Semester Bachelorstudium nach Themengebieten | 16 |
| 2.3.1 | Allgemeine Chemie | 16 |
| 2.3.2 | Grundlagen, Konzepte und Stoffe in der Anorganischen Chemie | 18 |
| 2.3.3 | Analytische Chemie | 20 |
| 2.3.4 | Koordinationschemie | 22 |
| 2.3.5 | Grundlagen und Stoffwelt der Organischen Chemie | 24 |
| 2.3.6 | Reaktionsmechanismen der Organischen Chemie und Grundpraktikum Organische Chemie | 26 |
| 2.3.7 | Thermodynamik | 28 |
| 2.3.8 | Elektrochemie | 30 |
| 2.3.9 | Kinetik und Transport | 32 |
| 2.3.10 | Molekülspektroskopie und Molekülsymmetrie | 34 |
| 2.3.11 | Theoretische Chemie | 36 |
| 2.3.12 | Physik | 38 |
| 2.3.13 | Mathematik/Statistik und Datenwissenschaft | 40 |
| 2.3.14 | Toxikologie und Rechtskunde | 42 |
| 2.3.15 | Grundlagen wissenschaftlichen Arbeitens | 44 |
| 3 | Profilcurriculum des Bachelorstudiums Chemie (2 Semester) | 45 |
| 3.1 | Anorganische Festkörperchemie | 46 |
| 3.2 | Organische Chemie für Fortgeschrittene | 48 |
| 3.3 | Statistische Thermodynamik | 50 |
| 3.4 | Technische Chemie/Chemische Technologie | 52 |
| 3.5 | Industrielle Chemie | 54 |
| 3.6 | Makromolekulare Chemie | 55 |
| 3.7 | Biochemie | 56 |
| 3.8 | Umweltchemie | 58 |
| 3.9 | Betriebswirtschaftslehre (BWL) | 59 |
| | Anhang | 60 |
| | Mitglieder der GDCh-Studienkommission | 60 |
| | Literaturverzeichnis | 62 |



Abstract

Mit diesem Themenkatalog nimmt die Studienkommission Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) eine Bestandsaufnahme zum sechssemestrigen Studiengang Bachelor Chemie an Universitäten vor und zeigt Zukunftsperspektiven auf. Sie gliedert diesen Studiumsabschnitt in ein „Kerncurriculum“ im Umfang von etwa vier Semestern und in ein „Profilcurriculum“ im Umfang von etwa zwei Semestern; das Letztere könnte abhängig von den Ausrichtungen bzw. dem Vorhandensein entsprechender Professuren ggfs. aus dem Bachelorstudium ins Masterstudium verlegt oder auch gar nicht angeboten werden. Der Themenkatalog trifft nicht durchgängig Zuordnungen zu den chemischen Fachgebieten, auch wenn man davon ausgeht, dass weiterhin vor allem in der klassischen Einteilung Anorganische, Organische, Physikalische Chemie usw. gelehrt wird.

Die nachfolgende Zusammenstellung stellt eine Überarbeitung, Fortschreibung und Aktualisierung der Empfehlungen einer früheren GDCh-Studienkommission zum Bachelorstudium Chemie an Universitäten dar, die im Jahr 2015 verfasst wurden. Aktuell wurden Aspekte zu digitaler Lehre, Forschungsdatenmanagement und Nachhaltigkeit neu berücksichtigt.

1 Einleitung

HINTERGRUND

Studienreformkommissionen der GDCh haben 1998 und 2004 Empfehlungen^{1,2} für das «Basisstudium Chemie» an Universitäten herausgegeben, die zur erfolgreichen Umstellung der Diplom-Studiengänge auf Bachelor- und Masterstudiengänge in Deutschland beigetragen haben. Die Umstellung sollte so erfolgen, dass die Inhalte und Standards, die das Chemiestudium in Deutschland kennzeichnen und sein hohes Niveau bedingen, erhalten und sinnvoll mit den im Bologna-Prozess geforderten Neuerungen kombiniert werden konnten. In diesen früheren Empfehlungen wurden den einzelnen Fachgebieten bestimmte Anteile am Gesamtumfang des Studiums zugewiesen, eine Aufteilung, die weitgehend einheitlich an Universitäten in Deutschland realisiert wurde.

Nach der erfolgreichen Einführung der Bachelor- und Masterstudiengänge Chemie hat im Jahr 2014 erneut eine fachgebietsübergreifende Studienkommission der GDCh Inhalte und Merkmale der gelebten Chemiestudiengänge analysiert und aktualisierte Empfehlungen für die zukünftige Ausgestaltung und Weiterentwicklung des Bachelorstudiengangs Chemie vorgelegt. Dabei sollte das Chemiestudium jedoch nicht neu zwischen den verschiedenen Fachgebieten aufgeteilt werden. Grundlage dieser Arbeit waren auch die geänderten normativen und studienkonzeptionellen Randbedingungen, also der Wegfall der Rahmenprüfungsordnungen und die stärkere Hinwendung zur Lernergebnisorientierung. Die zugehörigen Empfehlungen wurden 2015 veröffentlicht.³ 2020/21 wurden diese Empfehlungen von einer vierten GDCh-Studienkommission überarbeitet, wobei Aspekte zur digitalen Lehre, zum Forschungsdatenmanagement und zur Nachhaltigkeit neu berücksichtigt wurden. Dieses Papier fasst die Ergebnisse der Arbeit dieser Kommission zusammen.

BETONUNG VON INHALTEN, ABER KEINE ZUORDNUNGEN ZU MODULN ODER KONKRETEN LEHRVERANSTALTUNGEN

In Fortführung der Empfehlungen aus dem Jahr 2015 geht es auch den neuen Empfehlungen vorrangig um eine Katalogisierung von essentiellen wissenschaftlichen Inhalten und Kenntnissen, die nach Ansicht der Kommission in allen universitären Bachelorstudiengängen Chemie vermittelt werden sollten. Der hier fortgeschriebene Themenkatalog soll dazu beitragen, deutschlandweit auch weiterhin eine hohe Qualität des Chemiestudiums zu gewährleisten. Die Kommission weist darauf hin, dass ihr Themenkatalog insgesamt keinen Minimalanspruch darstellt, sondern eher zu umfangreich ist, um vollständig umgesetzt zu werden. Er enthält auch eine ganze Reihe

von Optionen, die einzelne Hochschulstandorte im Rahmen ihrer spezifischen Schwerpunktsetzung bedenken, auswählen, oder verwerfen sollen; gewisse damit einhergehenden Profilbildungen sind natürlich möglich. Als Optionen gedachte Themen dieser Art sind in Kapitel 2 eigens gekennzeichnet bzw. finden sich als Kapitel 3 ausgliedert.

Zu der 2020/21 tätigen Studienkommission der GDCh gehörten auch Angehörige der Konferenz der Fachbereiche Chemie (KFC), der Arbeitsgemeinschaft Deutscher Universitätsprofessoren und -professorinnen für Chemie (ADUC), der Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie (DBG), der Dechema, des Verbandes der Chemischen Industrie (VCI), der AG Theoretische Chemie, des Jungchemikerforums (JCF) und der Fachgruppen der GDCh.

Aspekte universitärer Bachelorstudiengänge Chemie, denen in den Erörterungen dieser Studienkommission eine große Bedeutung über die konkreten Einzelthemen hinaus zuerkannt wurden, waren folgende:

Laborerfahrung besonders wichtig

- » Ein wichtiges Kennzeichen der Chemie-Studiengänge ist die ausgeprägte zeitliche und inhaltliche Verschränkung von theoretischer und laborpraktischer Ausbildung. Es ist von essentieller Bedeutung für die spätere Berufsbefähigung der Chemie-Studierenden, dass ihre Fähigkeiten zum theoriegeleiteten Experimentieren, zum Beobachten und zum Beurteilen von Versuchsergebnissen in einem großzügigen zeitlichen und inhaltlichen Format gefördert werden. Die stetige Zunahme von Detailwissen und der hohe Grad an Ausdifferenzierung, den unsere Bachelorstudiengänge bereits erreicht haben, dürfen nicht dazu führen, dass ein auf Konzepte und Theorie Rezeption ausgerichtetes Studium in Vorlesungen, Übungen, Seminaren und Kursen die praktische Laborausbildung zurückdrängt. Digitale Lehrmedien ergänzen das moderne Chemiestudium, können die praktische Ausbildung aber keinesfalls ersetzen. Der Anteil der praktischen Arbeiten im Chemiestudium beträgt etwa 35-50 Prozent. Diese Zahlen beruhen auf einer Umfrage unter den Kommissionsmitgliedern im Juni 2021, bei der die ECTS als Berechnungsgrundlage verwendet wurden.

Fachgebietsunabhängige, verschränkte Darstellung von Inhalten

- » In diesen Empfehlungen wurde häufig darauf verzichtet, einzelne Veranstaltungen zu spezifizieren und diese wie üblich mit Fachgebietsbezeichnungen zu belegen (beispielsweise „Physikalische Chemie“). Daher finden sich möglicherweise bestimmte Inhalte, die für das Bachelor-Chemiestudium von der Mehrzahl der Lehrenden als besonders wichtig erachtet werden, erst auf den zweiten Blick oder verteilt auf mehrere Kapitel.

Gliederung der Themenblöcke

- » Die in diesen Empfehlungen aufgelisteten Themenblöcke sind unterteilt in „Konzept“, „Inhalte“ (Kerninhalte/optionale Inhalte) und „Praktikum/Theoretikum“. Eine Unterscheidung in Vorlesung, Seminar oder Übung bzw. Labor-, Kurs- oder Forschungspraktikum erfolgt im Allgemeinen nicht. Die Kommission empfiehlt jedoch, den Lehrstoff von Vorlesungen und Praktika durch Seminare und Übungen zu vertiefen.

Masterstudium Chemie und Promotion folgen auf Bachelorstudium Chemie

- » Für das Regelstudium Chemie empfiehlt die Studienkommission der GDCh die Beibehaltung des sechssemestrigen Bachelorstudiums, das eine Bachelorarbeit (Thesis) einschließt. Es ist anzustreben, dass das Bachelorstudium ein Zeitfenster aufweist, welches eine erhöhte Mobilität der Studierenden (z.B. für Auslandsaufenthalt, Industriepraktikum) erleichtert. Laut GDCh-Statistik⁴ zu den Chemiestudiengängen in Deutschland (2020) beginnen 98% der Bachelorabsolvent/-innen ein Masterstudium, 87% der Masterabsolvent/-innen starten eine Promotion. Wir gehen daher wie bisher davon aus, dass dem Bachelorstudium Chemie im Regelfall ein Masterstudium Chemie folgt, bevor die weitaus meisten Absolventinnen und Absolventen sich mit der Anfertigung einer Promotionsarbeit auf einem nochmals höheren Niveau auf einen (endgültigen) Eintritt ins Berufsleben vorbereiten.

SCHLUSSBEMERKUNG

Die erarbeiteten inhaltlichen Charakteristika finden sich im Hauptteil dieser Publikation.

Über die detaillierten, inhaltlichen Charakteristika hinaus gibt es selbstverständlich auch *allgemeine, fachspezifische* Kompetenzen, deren erfolgreiche Vermittlung Qualitätskriterium für die Bachelorstudiengänge Chemie ist. Hier folgt die Kommission prinzipiell den Empfehlungen zum Eurobachelor⁵ bzw. den „Fachspezifisch ergänzenden Hinweisen“ des Fachausschusses Chemie der ASIIN (Stand 29.03.2019)⁶ (siehe Kasten).

Allgemeiner fachspezifischer Kompetenzerwerb

Absolventinnen und Absolventen von Bachelorstudiengängen im Bereich der Chemie haben

- **mathematische-naturwissenschaftliche Grundkenntnisse** und chemische **Methodenkompetenz**,
- fundierte Kenntnisse in den **chemischen Kernfächern** Anorganische, Organische und Physikalische Chemie sowie in der Analytischen Chemie,
- zusätzliche Kenntnisse in weiteren Chemie-Fachgebieten, z.B. Biochemie, Makromolekulare Chemie etc.,
- Handlungskompetenzen bei **chemisch-praktischen Arbeiten** und sicherem, selbständigem Umgang mit Chemikalien,
- Kenntnisse von **Sicherheits- und Umweltbelangen** und den rechtlichen Grundlagen.

Solche Absolventinnen und Absolventen können

- relevante wissenschaftliche und technische **Daten erarbeiten, interpretieren und bewerten**,
- selbständig wissenschaftliche/anwendungsorientierte **Problemstellungen lösen** und die Ergebnisse darstellen sowie
- **lebenslang lernen**

Überfachliche Kompetenzen

Absolventinnen und Absolventen von Bachelorstudiengängen im Bereich der Chemie können

- über Inhalte und Probleme der Chemie sowohl mit Personen innerhalb als auch außerhalb ihres Fachs **kommunizieren**, auch fremdsprachlich/international,
- im Bewusstsein ihrer gesellschaftlichen und ethischen **Verantwortung** und unter Berücksichtigung berufsethischer Grundsätze und Normen der Chemie handeln⁷,
- sowohl einzeln als auch im Team **arbeiten** und **Projekte** durchführen,
- durch den **Praxisbezug** das Gelernte in ihrer weiteren Bildungsbiographie (Masterstudium/Promotion) und im späteren Berufsleben anwenden,
- **zusätzliche Kenntnisse** und Fertigkeiten erworben haben, z.B. aus der Ökonomie, Ethik, Philosophie oder in einer weiteren Fremdsprache.

Nachhaltige Chemie

Die in 2015 im Rahmen des Pariser Klimaabkommens definierten UN-Nachhaltigkeitsziele fassen die Bestrebungen für eine nachhaltige Zukunft in 17 Kategorien zusammen. Die zentrale Bedeutung vieler dieser Inhalte für den Chemiesektor und die Industrie sowie die politische und gesellschaftliche Diskussion erfordern eine Fortentwicklung des Curriculums. Inhalte im Sinne der nachhaltigen Entwicklung sollten in bestehende Lehrveranstaltungen integriert oder in neuen vermittelt werden. Um ein Bewusstsein für den ethischen (vgl. hier auch die "Haager Ethik-Leitlinien", <https://www.opcw.org/hague-ethical-guidelines>⁷), verantwortungsvollen Umgang mit (Roh-)stoffen, Methoden und Abfällen zu schaffen, sollten die Studierenden mit Grundsätzen der Grünen Chemie und ressourcenschonender Produktion (Atomeffizienz, Kreislaufwirtschaft, nachhaltige Wertschöpfungsketten) genauso vertraut gemacht werden wie mit den zentralen Konzepten Katalyse, (Umwelt-)toxikologie und Biotechnologie.

Inhalte

Beispiele für Inhalte, die in **bestehende Module** oder **Übungen** integriert werden können, sind:

- Die 12 Prinzipien der Grünen Chemie
- Verfügbarkeit der Elemente (EuChemS Periodensystem zur Kritikalität der Elemente, <https://www.euchems.eu/euchems-periodic-table>, alternative Kohlenstoffquellen, Biomassewertschöpfung)
- Thermo-, Photo- und Elektrokatalyse
- Vergleich historischer und neuartiger chemischer Prozesse (Effizienzverbesserung durch Katalysatorentwicklung, Energiebilanz, Lebenszyklusanalyse),
- Biotechnologie (Biokatalyse & Biotransformation)
- Mobilität (Verbrennungsprozesse, alternative Kraftstoffe, Batterietechnik, Wasserstoffwirtschaft, Brennstoffzellen)
- Bewusstsein für Nachhaltigkeit in Praktika (Aufklärung über Abfallentsorgung, Redestillieren von Lösungsmitteln, Versuche aus der Grünen Chemie)

Digitalisierung

Die digitale Transformation von Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft erfordert in modernen Chemie-Studiengängen bereits auf Bachelor-Niveau die Abbildung von Kompetenzen im Umgang mit Daten und mit der Digitalisierung von Lehrinhalten. Aufbauend auf der Datenstrategie der Bundesregierung vom November 2019 hat der Stifterverband gemeinsam mit Partnern und unterstützt durch eine Reihe von namhaften Institutionen im Januar 2021 die "Data-Literacy-Charta" verabschiedet, in der die Bedeutung von Datenkompetenz ("Data Literacy") und deren Vermittlung zusammengefasst werden (<https://www.stifterverband.org/charta-data-literacy>). Die darin dargelegten Grundprinzipien können als Leitlinien für die daten- und digitalisierungsorientierte Ausbildung der Chemiestudierenden dienen und unterstreichen die Notwendigkeit, Methodenkompetenz, insbesondere datenwissenschaftliche Ausbildungsinhalte mit der Anwendung auf reale chemische Probleme zu verbinden.

Gleichzeitig wächst die Bedeutung von Forschungsdatenmanagement als eine der Säulen datenwissenschaftlicher Konzepte auf allen Ebenen von Forschung und Lehre. Durch die umfangreiche öffentliche Förderung zum Aufbau einer "nationalen Forschungsdateninfrastruktur" (NFDI, <https://www.nfdi.de>) wird die Bedeutung von gut strukturierten und "auffindbaren", qualitativ hochwertigen Daten für die Wissenschaft untermauert. Die Relevanz für die Chemie wird durch die bereits bewilligte Förderung der Konsortien NFDI4Chem, NFDI4Cat, NFDI4Ing, DA-PHNE4NFDI und FairMat dokumentiert.

In der Konsequenz erfordern die Leitlinien die Anpassung insbesondere der mathematisch-statistischen Grundlagenausbildung (z.B. vor dem praktischen Hintergrund statistischer Versuchsplanung und experimentellen Designs) sowie die Ergänzung der Lehrinhalte um datenwissenschaftliche Instrumente einschließlich chemieinformatischer Grundlagen. Dies folgt aus der gesellschaftlich-politischen Forderung nach Ausnutzung des Potentials von Forschungsdaten sowie aus dem Bedarf der Industrie an entsprechend ausgebildeten Absolventinnen und Absolventen. Konkrete Lehrinhalte im Bereich der Datenwissenschaften und ihrer mathematisch/statistischen sowie informatischen Grundlagen können in Anlehnung an das Arbeitspapier „Data Science: Lern- und Ausbildungsinhalte“ der Gesellschaft für Informatik formuliert werden (<https://gi.de/themen/beitrag/data-science-lern-und-ausbildungsinhalte>), das sich gezielt an den Masterbereich richtet. Darin werden die erforderlichen Kompetenzen nach fachlichem Hintergrund der Studierenden (aus der „Domäne“, z.B. Chemie, oder mit Herkunft aus Mathematik/Informatik) differenziert betrachtet. Die dort ausgearbeiteten Themen werden im

Abschnitt 2.3.13 „Mathematik/Statistik und Datenwissenschaft“ auf die für das Bachelorstudium in Chemie relevanten Basisinhalte konzentriert.

E-Learning

In der Lehre gewinnt die Digitalisierung sowohl als Lerngegenstand als auch auf der Ebene der Lehrgestaltung zunehmend an Bedeutung. Neue digitale Werkzeuge ermöglichen veranstaltungsformübergreifend, nicht nur im Praktikumskontext, deutlich stärker kompetenzorientierte Lehr- und Lernszenarien, welche die (idealerweise individuellen) Lern- und Unterstützungsbedarfe der Studierenden stärker in den Blick nehmen. Mit Lehr-Lern-Videos und digitalen Medien wird asynchrone Lehre realisierbar. Laborvideos machen Chemie (be-)greifbarer und können die Effektivität von Laborpraktika steigern, ohne dabei jedoch die notwendige praktische Laborerfahrung ersetzen zu können. Interaktive Simulationen machen chemische Prozesse auf molekularer Ebene sichtbar. Digitale Lernplattformen erlauben es Lehrenden darüber hinaus, individuelle Lernprozesse in Echtzeit zu beobachten und zeitnah mit persönlichen oder zunehmend automatisierten Rückmeldungen zu unterstützen. Mit Classroom-Response-Systemen können Lehrende auch in Vorlesungsveranstaltungen mit großen Studierendengruppen interagieren. Insgesamt bieten die digitalen Werkzeuge neue Möglichkeiten zur Weiterentwicklung von Lehrveranstaltungsformen, beispielsweise in Blended-Learning- oder Inverted-Classroom-Formaten, dabei werden die Grenzen zwischen formellem und informellem Lernen unschärfer.

Mit der universellen Verfügbarkeit von (chemischem) Wissen verschiebt sich der Fokus allgemein mehr vom „Was?“ hin zum „Wie?“ des in einer zunehmend dynamischen Welt stärker lebenslang ausgelegten Lernens. Dank immer komplexerer und stärker individualisierter, elektronisch angereicherter Lehr-Lern-Szenarien können Lehrangebote dabei auch in der Chemie inklusiver gestaltet werden. Digitale Lehre kann somit allgemein mehr Studierenden einen niederschweligen Zugang zur Chemie ermöglichen.

Digitale Lehrmedien und -konzepte im chemischen Kontext zu erstellen, erfordert auch vor diesem Hintergrund nicht zu unterschätzende Ressourcen. Sie können gleichzeitig besonders leicht zwischen Lehrenden ausgetauscht bzw. von diesen gemeinsam, beispielsweise in Form offener Bildungsmaterialien (open educational resources, OER), entwickelt werden. Die Förderung von OER-Konzepten kann damit insgesamt die Digitalisierung der Lehre beschleunigen.

Wissenschaftskommunikation

Erfolgreiche Wissenschaftskommunikation innerhalb sowie außerhalb der chemischen Fachgemeinschaft basiert einerseits auf den gleichen Grundsätzen der guten wissenschaftlichen Praxis, verlangt aber gleichzeitig auch die Fähigkeit Sachverhalte an das jeweilige Auditorium zu adaptieren. Letzteres ist nur unter zwei Voraussetzungen möglich. Erstens, wenn der Sachverstand ausreichend geschult ist, um insbesondere für Fachfremde komplexe Sachverhalte zu vereinfachen und zu veranschaulichen, ohne sie zu verfälschen. Diesen Sachverstand in einer entsprechenden Breite zu vermitteln, ist natürlich das Kernanliegen des Bachelorstudiums Chemie.

Zweitens, neben den Kenntnissen des fachlichen Wissensstandes der Zuhörerschaft sollte die gelungene Adaption der zu präsentierenden Inhalte an die Zuhörerschaft auch die gesellschaftliche Konnotation der jeweiligen chemischen Thematik berücksichtigen.

Diese Aspekte sind wünschenswerterweise im Rahmen der jeweiligen Lehrveranstaltung zu adressieren, indem Vernetzungen und Bezüge zu gesellschaftlichen Fragen und Alltagsaspekten angebracht werden. Diese Vernetzung von Sachthemen mit dem gesellschaftlichen Kontext sensibilisiert im umfassenden Maße die Studierenden für mögliche Probleme und Lösungen durch die Chemie, wie es z.B. detailliert im Bereich Nachhaltigkeit aufgezeigt wurde, und fördert im Allgemeinen die faktenorientierte Kommunikation.

Notwendige Ergänzung, die innerhalb der Seminare und Übungen der einzelnen Fachrichtungen ganz selbstverständlich eingebaut werden kann, ist das Training im Präsentieren an sich, d.h. das Sprechen vor einer Gruppe unter Nutzung der verschiedenen Techniken und Medien.

2 Kerncurriculum des Bachelorstudiums Chemie (4 Semester)

2.1 Vorlesungen, Seminare und die Bedeutung von Übungen

Viele Inhalte universitärer Chemie-Studiengänge lassen sich in Büchern zusammenhängend nachlesen. Viel Einzelwissen universitärer Chemie-Studiengänge findet sich bei WIKIPEDIA aufbereitet, wenn auch eher isoliert. Ungeachtet des großen Wertes solcher Informationsquellen glaubt die hinter dem vorliegenden Schriftstück stehende Kommission in ihrer Mehrheit, dass auch in den vor uns liegenden Jahren die klassischen Lehrformen von der größten Wichtigkeit für die universitäre Wissensvermittlung im Fach Chemie bleiben werden; das meint akademische Lehre durch – und in – Vorlesungen, Seminaren und Übungen.

Nichts kann neues Wissen studienaltersangepasst derart gut mit zuvor Gelehrtem korrelieren wie eine sorgfältig aufgebaute Vorlesung. Naturwissenschaftliches Analysieren und Schlussfolgern wird insbesondere durch die Interaktionen eines Seminarstils befördert. Wöchentlich abgehaltene Übungen – am besten zu jeder Vorlesung und ab dem Tag eines Chemie-Studiums angeboten – und deren Bearbeitung leisten einen unersetzlichen Beitrag zur Umwandlung passiv gehörten Wissens in aktiv einsetzbare Problemlösekompetenz. Nur die Letztere befähigt dazu, die Chemie zu verstehen.

Zum Zeitpunkt des Verfassens dieser Empfehlungen lag hinter jedem Kommissionsmitglied ein Jahr Corona-bedingter Erfahrung mit digitaler Lehre. Studentisches Feedback dazu lobte oft die Existenz von „Stop“- , „Replay“- und „Play Later“-Tasten. Diese Assets betrafen Aspekte, über die keine Vorlesung im Präsenzformat verfügt. Niemand könnte heute ausschließen, dass auch in Nach-Corona-Zeiten Vorlesungen zu Lernzwecken gefilmt und im Universitätsnetz nachverfolgbar gemacht werden. Das beträfe nach der mehrheitlichen Überzeugung der o. g. Kommission wohl nur live-Vorlesungen. Letztere wirken ja nicht nur stark, wenn sie Experimentalvorlesungen sind (die zu pflegen die Kommission übrigens ermuntert); eine Vorlesung wirkt vielmehr auch dann, wenn sie ohne Experimente, aber doch mit Esprit vorgetragen wird.

2.2 Ausbildung im Experimentieren, Messen und Auswerten: Sinn und Stellenwert der zahlreichen Laborpraktika

Die universitären Chemie-Studiengänge in Deutschland beinhalten ein großes Volumen praktischer Arbeiten. Tatsächlich beginnen diese i. d. R. im ersten Semester, setzen bis zum Ende des Studiums nicht mehr aus und beanspruchen insofern einen erheblichen Teil der Studienzeit. Die Praxis der Chemie wird typischerweise in Gruppen-Praktika gelehrt und fast ausschließlich in den Ausbildungslaboratorien der Universität durchgeführt. Solche Laboratorien und deren Betrieb sind ausgesprochen kostenintensiv. Das liegt auch an den zunehmenden Anforderungen der einschlägigen Arbeitssicherheits-Richtlinien und Gesundheitsschutz-Verordnungen.

Das Lehrziel der Gesamtheit aller Chemie-Praktika ist es, die Studierenden in den Stand zu versetzen, die „graue Theorie“ auf den Ursprung fast aller Erkenntnisse der exakten Naturwissenschaften zurückführen zu können: auf reproduzierbare und eindeutig interpretierbare Experimente. Nichts besitzt in der Chemie Wert oder hat Bestand, was nicht realiter nachweisbar und überprüfbar wäre. An diesem überaus harten „nachweisbar & überprüfbar“-Kriterium werden sich natürlich auch sämtliche in der Zukunft zu erarbeitende Chemie-Erkenntnisse zu messen haben.

Studierende darauf vorzubereiten, eines Tages realistisch einen Chemieerberuf ergreifen zu können, impliziert vor diesem Hintergrund, sie im Studienverlauf beständig und mit wachsenden manuellen und/oder intellektuellen Ansprüchen zu gekonntem und verstehendem Experimentieren anzuleiten. Die Hauptcharakteristika von Chemie-Praktika sind dementsprechend der schiere Umfang („Übung macht den Meister“), eine Spannweite über sämtliche Chemie-Disziplinen hinweg (wobei das Fach Theoretische Chemie ein „Theoretikum“ als konzeptionelles Äquivalent eines Praktikums anbietet) und eine ausgeprägte Verzahnung mit den dazugehörigen Themen aus Vorlesungen, Seminaren und Übungen. Eine perfekte Korrelation der praktischen mit der theoretischen Ausbildung wird erreicht, wenn Praktika an eine „Begleitvorlesung“ oder ein „Begleitseminar“ von jeweils wochengenauem Parallelgang gekoppelt werden.

Die vorstehend umrissene Ausbildung von Chemie-Studierenden zu verstehendem Experimentieren umfasst auch das Anleiten zu verstehendem Beobachten, verstehendem Beschreiben und verstehendem Interpretieren. Diese Ziele kann allerdings nur erreichen, wer die unentbehrlichen (deutsch-)sprachlichen und mathematischen Voraussetzungen aus der Schulzeit mit sich bringt.

2.3 Vier Semester Bachelorstudium nach Themengebieten

2.3.1 Allgemeine Chemie

Konzept:

Es werden die allgemeinen Grundlagen und Konzepte der Chemie vermittelt, die für das Verständnis der weiterführenden Studieninhalte benötigt werden. Dafür werden Grundprinzipien und chemische Grundgrößen besprochen. Der Atombau und die wichtigsten Verbindungs- und Reaktionstypen werden besprochen. Bereits vorhandenes Schulwissen wird vertieft und ergänzt.

Kerninhalte:

- Grundprinzipien der Chemie: Stoffsystematik, spezifische Eigenschaften, Stoffumwandlung, Zustandsänderung, Aggregatzustände, Stoffe und Stofftrennung, chemische Grundgesetze, Energieumsatz chemischer Reaktionen, Atome, Moleküle, Verbindungen, Elemente
- Chemische Grundgrößen, chemisches Gleichgewicht: Elementarteilchen, Atommasse, Konzentration und Gehalt, Gleichgewichtskonstante, freie Reaktionsenthalpie, Reaktionsgeschwindigkeit
- Atombau: Historische Entwicklung der Atommodelle und ihrer Leistungen, Bestimmung der Ordnungszahl über Röntgenemission (Moseley-Gesetz), Elektronenstruktur der Atome ausgehend vom atomaren Wasserstoff und seinem diskreten Emissions-Spektrum: Quantelung der Energie, Welle-Teilchen-Dualismus des Elektrons (Materiewellenkonzept), wellenmechanisches Atommodell, Atomorbitale, Quantenzahlen, Elektronenkonfiguration inkl. Edelgaskonfiguration, Aufbauprinzip inkl. Hundsche Regel und Pauli-Verbot, Lewis-Schreibweise, Wertigkeit
- Periodensystem der Elemente: Nomenklatur, Trends (Atomradius, Ionenradius, Ionisierungsenergie, Elektronenaffinität, Elektronegativität), periodische Eigenschaften
- Verbindungsklassen: Metallbindung (Metallcharakter, metallische Eigenschaften, Drude-Modell, Bändermodell im Direktraum, Leitfähigkeit, Kugelpackungen), ionische Bindung [Polarität, Ionenbildung, Gitterenergie (Born-Haber-Kreisprozess), Strukturtypen von Ionenverbänden, Solvatation], kovalente Bindung (VB-Theorie, MO-Theorie, σ -, π -Bindung, Bindungsordnung, Hybridisierung), dative (koordinative) Bindung

- Reaktionstypen: Säure-Base-Konzepte (Brønsted, Lewis, Autoprotolyse, pH-Wert, Säure- und Basenkonstanten, Titration von Säuren und Basen, Puffersysteme), Redoxreaktionen (Oxidation, Reduktion, Redox-Gleichungen, Elektrolyse-Zelle, Galvanisches Element, Elektromotorische Kraft, Standardpotentiale, Nernstsche Gleichung), Komplexbildungsreaktionen, Fällungsreaktion (Löslichkeitsprodukt, Löslichkeit), Gleichgewichte, Gleichgewichtskonstante, freie Reaktionsenthalpie, Ionenaktivität
- Magnetismus: Paramagnetismus, Diamagnetismus

Praktikum:

Die Grundlagen des chemischen Arbeitens werden am Beispiel von analytischen und präparativen Fragestellungen erlernt. Dazu gehören Säure-Base-Reaktionen, Komplexometrie, Fällungsreaktionen, Gravimetrie und Redoxreaktionen. Weiterhin vermittelt werden Kenntnisse zum Verhalten im Labor, der Laborsicherheit sowie grundlegende Auswertemethoden. [Vgl. 2.3.2/2.3.3]

2.3.2 Grundlagen, Konzepte und Stoffe in der Anorganischen Chemie

Konzept:

Die Elemente des Periodensystems und ihre anorganischen Verbindungen werden vorgestellt und bezüglich ihrer Vorkommen, Gewinnung, Verwendung und stofflichen Charakteristika diskutiert. Zu den Charakteristika gehören Elektronenstruktur, Molekül- und Festkörperstrukturen, physikalische Eigenschaften und chemische Reaktivität. Trends im Periodensystem werden aufgezeigt, insbesondere im Hinblick auf Bindungssituationen. Konzepte der Molekül- und Festkörperchemie werden vermittelt.

Kerninhalte:

Systematische Diskussion der Elemente und der Stoffchemie anhand der Haupt- und Nebengruppen im Periodensystem, Herausarbeiten von Gemeinsamkeiten, Unterschieden und Trends. Diskussion von Allotropie sowie metallischen und nichtmetallischen Bindungscharakteristika, ausgehend von der Elektronenstruktur der Atome. Vorstellung von Konzepten zur Beschreibung kovalenter, koordinativer, ionischer und metallischer Bindungen (auch Mehrzentrenbindungen). Betrachtung des Einflusses von Atom- und Ionenradien, Elektronegativitäten, Elektronenkonfigurationen, Redoxpotentialen, Koordinationszahlen etc. auf Existenz und Einordnung von chemischen Substanzen. Beschreibung von Struktur und Eigenschaften von Molekülen (z.B. Cl_2 , P_4 , B_2H_6 , P_4O_{10}), kovalenten Netzwerken (z.B. C, BN, As, SiO_2), Ionenkristallen (z.B. NaCl, CaF_2 , Li_3N) und Metallen (z.B. Na, Cu, WC). Diskussion von Reaktivität, Stabilität und Gleichgewicht. Chemie in Lösungsmitteln, Schmelzen und Festkörpern (z.B. Säure-Base-Konzepte, elektrochemische Spannungsreihe). Vorstellung von ausgewählten technischen Prozessen und Wertschöpfungsketten (z.B. Siliciumdioxid \rightarrow techn. Silicium \rightarrow Trichlorsilan \rightarrow ultrareines Silicium) und Anwendungsfeldern (z.B. Katalyse, Elektrochemie, Elektronikmaterialien). Bedeutung ausgewählter anorganisch-chemischer Produkte aus industrieller Herstellung (z.B. NH_3 , H_2SO_4). Einführung in die Fachgebiete Komplexchemie, Organometallchemie, Hauptgruppenelement-Molekülchemie, Festkörperchemie und Materialchemie.

Praktikum:

- Exemplarische Anwendung der Stoffchemie der Elemente
- Analytische Trennung (Trennungsgänge), Qualitative und Quantitative Analysen
- Trennung von Stoffen aus Stoffgemischen, z.B. Erzen oder technischen Zwischenprodukten

- Herstellung von Elementen und einfachen ionischen Verbindungen, Reinigung durch z.B. Umkristallisation oder Sublimation
- Bezug zu Recycling, Urban Mining
- Festkörperchemische Synthesen, z.B. Durchführung von Hochtemperatur-Reaktionen von Festkörpern und in Schmelzen
- Arbeiten mit Gasen, auch mit brennbaren, korrosiven oder giftigen Gasen. Anwendung einfacher Gasgesetze zur Dosierung, Kondensation/Destillation zur Reinigung.
- *Optional: Druckreaktionen*
- Herstellung und Isolierung molekularer Stoffe (z.B. BBr_3 , TiCl_4) sowie Koordinationsverbindungen (z.B. Thiomolybdate, Ammin-Komplexe)
- Arbeiten mit luftempfindlichen Stoffen unter Inertbedingungen. Vollständige Trocknung von Lösungsmitteln, Herstellung von und Umgang mit metallorganischen Verbindungen
- Charakterisierung der Produkte durch instrumentelle Methoden, z.B. (Heterokern-) NMR, Schwingungsspektroskopie, Röntgenbeugung

Optionale Inhalte:

- Standortsspezifische Schwerpunktsetzung
- Legierungen, Intermetallische Verbindungen, Interhalogene, Verbindungs-Halbleiter, Nano-Materialien
- Umgang mit computerbasierten Methoden, ggfs. KI-basiert. Umgang mit Stoff-, Reaktions- und Spektren-Datenbanken
- Relevanz kleiner Moleküle und von Partikeln auf die Umwelt (Treibhauseffekt, Ozonschicht, Toxizitäten, Auswirkungen auf Kondensat-Bildung)

2.3.3 Analytische Chemie

Konzept:

In der Analytischen Chemie stehen der analytische Prozess, insbesondere die Identifizierung und Quantifizierung sowie Methoden der instrumentellen Analytik im Mittelpunkt (angepasst an die Vor-Ort-Schwerpunkte). Die Beurteilung des gesamten analytischen Prozesses und der Leistungsfähigkeit der Methoden wird anhand z. B. von Selektivität und Validierung an Beispielen erlernt und im Praktikum vertieft. Ziel ist der Erwerb von grundlegenden Kenntnissen und Fähigkeiten der Analytischen Chemie sowie die selbstständige Bearbeitung analytischer Fragen mit der problemorientierten Auswahl geeigneter Verfahren.

Kerninhalte:

- Analytischer Gesamtprozess: Grundgedanke, Fragestellung, Grundbegriffe: Analytisches Problem von der Probennahme bis zur Auswertung (Untersuchungsobjekt, Analysenprinzip, Analysenmethode, Plausibilitätskontrolle der analytischen Informationen, Experiment und Bewertung, Problem der geringen Menge, Miniaturisierung, Konzentrationsbereiche, Validierung, Qualitätssicherung)
- Begriffe der quantitativen Analytik (Empfindlichkeit, Nachweisgrenze, Detektionsgrenze, Bestimmungsgrenze, Selektivität/Spezifität, Auflösung, Reproduzierbarkeit, Signaltypen, Rauschen)
- Probenahme und Probenvorbereitung bei Gasen, Flüssigkeiten und Festkörpern
- Trenn- und Anreicherungsverfahren: Aufschluss, Extraktion, Anreicherung, Matrixeffekte, Chromatographie (GC, HPLC, DC)
- Bestimmungsmethoden: Gravimetrie, Maßanalyse, Molekülspektroskopie (UV-VIS, Fluoreszenz, IR, Raman), Massenspektrometrie [Aufbau, Ionisierung, Fragmentierung, Detektion, Kopplungstechniken; (LA) ICP MS, (D)ESI MS], Atomspektroskopie (AAS, AES, ICP)
- Chemometrie: Versuchsplanung, statistische Bewertung von Daten, Modellierung, Datenanalyse, Kalibrierverfahren, kleinste Fehlerquadrate, lineare Regression, Vertrauensbereich aus univariater Modellierung, Korrelationskoeffizient, Regressionskoeffizient

Optionale Inhalte:

- Identifizierung und Quantifizierung in verschiedenen Matrices
- Trenn- und Anreicherungsverfahren: IC, CE, SFC, Festphasenextraktion
- Massenspektrometrie: TIMS, SIMS, MALDI
- Atomspektroskopie: XRF
- Elektroanalytische Verfahren: Voltammetrie, Cyclovoltammetrie, Polarographie
- Umwelt- und Schadstoffanalytik
- Bioanalytik: Assaytypen, Affinitäten, Gelelektrophorese, Polymerase-Kettenreaktion
- Sensorik: Optische Sensoren, elektrochemische Sensoren
- Radioanalytische Methoden (alpha-, beta-, gamma-Spektroskopie)
- Chemometrie: Objekte, Muster, Merkmale, Polardiagramm, Clusteranalyse, Hauptkomponentenanalyse

Praktikum:

- Versuche aus den Bereichen der qualitativen und quantitativen Analyse, insbesondere zu Probenvorbereitung, Trennverfahren, Spektroskopie/Spektrometrie und Elektroanalytik

2.3.4 Koordinationschemie

Konzept:

Es werden grundlegende Kenntnisse der Koordinationschemie und der metallorganischen Chemie vermittelt. Verschiedene Modelle zur Erklärung der Struktur, Stabilität und Reaktivität von Komplex- und metallorganischen Verbindungen werden vorgestellt. Des Weiteren werden Synthesewege und Reaktionsverhalten besprochen, um diese im Labor selbstständig einsetzen zu können. Einsatzgebiete der Komplexe in z. B. der chemischen Synthese, Medizin, Katalyse und Relevanz für die Bioorganische Chemie werden diskutiert.

Kerninhalte:

- Räumlicher Aufbau und Nomenklatur von Koordinationsverbindungen (Koordinationszahlen und Polyeder), Isomeriearten (Konstitutionsisomere, cis/trans, fac/mer, Enantiomere, ambidente Liganden). Thermodynamik (Beständigkeitskonstanten, Speziesverteilung, Chelateffekt) und Kinetik (inerte und labile Komplexe, assoziative und dissoziative Ligandsubstitution) von Komplexbildungsreaktionen
- Eigenschaften von Liganden (Modulation von Acidität und Elektrophilie) Bindungsmodelle: MO-Schema eines oktaedrischen Komplexes, Kristallfeldmodell als Beschreibung des Grenzoritalbereichs; Jahn-Teller-Verzerrung. Paramagnetische und diamagnetische Komplexe
- Stark- und Schwachfeldliganden, σ -Donor-, π -Donor- und π -Akzeptorliganden, spektrochemische Reihe, Metallbeitrag zur Feldaufspaltung, Spinzustände (high-, low-spin). Starkfeldliganden: Carbonyl-, Nitrosyl- und Cyanido-Komplexe, 18-e-Regel, spektroskopische Auswahlregeln

Optionale Inhalte:

- inner- und outer-sphere Redoxreaktionen
- Elektronenspektrum und Elektronenstruktur
- Spin-only-Formel, ferro- und antiferromagnetische Spinkopplung, Superaustausch
- Spin-Crossover
- Metall-Metall-Bindungen, Cluster, Isolobalbeziehung
- Grundtypen organometallchemischer Liganden, (Halb-)Sandwich-Verbindungen, Elementarschritte der Organometallchemie (oxidative Addition, reduktive Eliminierung, nukleophiler Angriff auf den Liganden („Insertion“), β -H-Eliminierung)

Praktikum:

Synthese, Substanzcharakterisierung und Strukturaufklärung anhand klassischer und moderner Methoden wie z.B. UV/VIS-, NMR- und IR-Spektroskopie, Literaturrecherche und Einführung in den Umgang mit online-Datenbanken, Synthesepaltung, spezielle Substanzklassen aus den Bereichen der metallorganischen und der Koordinationschemie

Optionale Inhalte:

- Schutzgastechiken (Schlenktechnik) [Vgl. 3.1]

2.3.5 Grundlagen und Stoffwelt der Organischen Chemie

Konzept:

Die Stoffvielfalt der Organischen Chemie (mehr als 150 Millionen Vertreter) wird anhand eines Gangs durch die Verbindungsklassen der Organischen Chemie (es sind, je nach Zählweise, ca. 25) erschlossen. Sie sind durch das Fehlen funktioneller Gruppen, durch die Anwesenheit und Art einer funktionellen Gruppe oder durch Art, Zahl und Abstand mehrerer funktioneller Gruppen charakterisiert. Die Mitglieder einer Verbindungsklasse besitzen ausgeprägte Ähnlichkeiten. Das betrifft ihre physikalischen Eigenschaften (Aggregatzustand, Schmelzpunkt, Siedepunkt, Löslichkeiten) und die Reaktionsweisen, mit denen man sie typischerweise (!) synthetisieren oder umwandeln kann. Fast jede Substanzklasse enthält zudem Anschauungsmaterial für wissenschaftliche „Chemieanwendungen im täglichen Leben“.

Sofern die personellen und räumlichen Verhältnisse es ermöglichen, wird als Lehrformat eine Experimentalvorlesung empfohlen.

Kerninhalte:

- Strukturprinzipien und Strukturvielfalt organisch-chemischer Verbindungen (Konzept der funktionellen Gruppe; Strukturisomerie; IUPAC-Nomenklatur; Stereoisomerie; *cis/trans*-, *E/Z*-, *R/S*- und *D/L*-Nomenklatur)
- Strukturermittlung organisch-chemischer Verbindungen [Verbrennungsanalyse; Massenspektrometrie; ¹H-NMR- (chem. Verschiebung, Integral, Hyperfeinstruktur), IR- und UV/VIS-Spektroskopie]
- Reinigungs- und Isoliermethoden organisch-chemischer Verbindungen (Destillation bei normalem oder erniedrigtem Druck; Gas- und Flüssigchromatographie; Extraktion aus Naturstoffen oder Reaktionsgemischen)
- Petrochemie; Verbrennung von Kohlenwasserstoffen; Energiestufendiagramme; Reaktions-, Bildungs-, Dissoziations- und Bindungsenthalpie; Energieprofilauflauftragung entlang einer Reaktionskoordinate; Reaktionsmechanismus; Katalyse; Reaktionsgeschwindigkeit; Arrhenius-Gesetz und Eyring-Gleichung; Geschwindigkeitsgesetze; Bodenstein-Prinzip
- Konformations- und Stabilitätsanalyse von unverzweigten und verzweigten Alkanen (bevorzugt gestaffelt statt ekliptisch, *anti* statt *gauche* und, sofern *gauche*, ohne *syn*-Pentan-Spannung) und von Cycloalkanen (Winkel- und Pitzerspannung sowie transannuläre Abstoßung); Reformieren von Rohbenzin

- Bindungskonzepte für organisch-chemische Verbindungen; MO- und VB-Beschreibung; Konjugation und Resonanz; Hückel-Aromatizität; Stabilisierung von Elektronenpaaren, Radikalzentren und Ladungen; induktive und mesomere Substituenteneffekte; Acidität von Alkoholen, Thiolen, Aminen, Phenolen, Carbonsäuren und C,H-Säuren; Basizität von Aminen, Anilinen und Guanidin; Erklärung von Reaktivitäten und Reaktivitätsabstufungen
- Grundlegende Verbindungsklassen der Organischen Chemie (jeweils inkl. Nomenklatur, physikalischen Eigenschaften, Synthesemöglichkeiten, exemplarische Reaktionsweisen, Anwendungen „im täglichen Leben“): Alkane, Halogenalkane, Lithiumorganyle und Grignard-Verbindungen, Alkohole, Ester anorganischer Säuren (und verwandter Verbindungen wie Sulfon- und Phosphonsäuren), Thiole, Ether inkl. Epoxide, Thioether, Amine, Olefine, Polymere, konjugierte Diene und Polyene, Alkine, Aromaten, Aldehyde und Ketone, Carbonsäuren und Carboxylate, Carbonsäureester, Carbonsäurechloride und -anhydride, Carbonsäureamide, Nitrile, Organische Derivate der Kohlensäure inkl. Heterocumulene, inkl. Polyester, Polyamide, Polycarbonate, Polyurethane, Hydroxycarbonsäuren, Aldosen, Oligo- und Polysaccharide, α -Aminosäuren, Oligo- und Polypeptide. – Die Anteile der Einzelthemen an einer ausgewogenen Gesamtbesprechung unterscheiden sich um bis zu mehr als das Zehnfache. Die Aromaten verdienen die ausführlichste Behandlung.

Optionale Inhalte:

- Cracken
- Klimawirkung flüchtiger Halogenalkane und Treibhausgase
- Sulfonamide, Nitramine
- Beschreibung von Methan mit Mehrzentrenbindungen
- Kautschuke; Kunststoffe und Umweltschutz
- Frost-Musulin-Ableitung der HMO-Energien linear oder monocyclisch konjugierter π -Elektronensysteme
- Molekulare Grundlagen des Sehvorgangs
- Triarylmethanfarbstoffe
- pH-Indikatoren
- Festphasensynthese von Peptiden (Merrifield-Synthese)
- Festphasensynthese von Peptidgemischen (Kombinatorische Synthese)
- Einführung in die Retrosynthese („Wie findet man planvoll Synthesemöglichkeiten für eine beliebige organische Verbindung?“)

2.3.6 Reaktionsmechanismen der Organischen Chemie und Grundpraktikum Organische Chemie

Konzept:

Sich in der überwältigenden Stoffvielfalt der Organischen Chemie [vgl. 2.3.5] zu orientieren, ist einfacher, als man meinen könnte. Das liegt insbesondere an zwei Tatsachen. Erstens finden die meisten (im Rahmen eines Bachelorstudiums: alle) Reaktionen mit einer Funktionellen Gruppe oder direkt neben ihr statt. Zweitens verleiht eine gegebene Funktionelle Gruppe jeder Verbindung ein und dasselbe Reaktivitätsprofil. Diese Feststellung wird lediglich in Verbindungen häufig, die mehrere Funktionelle Gruppen enthalten und diese einen Abstand voneinander aufweisen, der eine neue Reaktivität in Ergänzung oder anstelle der Summe der Einzelreaktivitäten hervorruft. Die wichtigsten Reaktionsweisen von und direkt neben den Funktionellen Gruppen der Organischen Chemie kennenzulernen, befähigt daher dazu, die (Grund-)Reaktivitäten organisch-chemischer Verbindungen verstehen und sogar vorhersagen zu können. Am besten erreicht man dieses Verständnis und das damit einhergehende Extrapoliervermögen, indem man die Reaktionen der Organischen Chemie anhand ihrer Mechanismen systematisiert.

Senecas Prinzip „lang ist der Weg durch Lehren, kurz und wirksam durch Beispiele“ beherzigt man im hiesigen Zusammenhang, indem die skizzierte Vorlesung parallel zum organisch-chemischen Bachelor-Praktikum angeboten wird. Solch ein Praktikum würde überdies von einem Begleitseminar profitieren, das lehrt, wie man organisch-chemische Strukturen aus eindimensionalen ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren ableitet.

Kerninhalte:

- Radikalische Substitutionen am gesättigten C-Atom
- Nucleophile Substitutionen am gesättigten C-Atom
- Additionen an die olefinische Doppelbindung
- β -Eliminierungen, die zu Olefinen führen
- Substitutionen am Aromaten (Ar-S_{E} -Reaktionen über Wheland-Komplexe oder mit Arylmetallverbindungen; Ar-S_{N} -Reaktionen)
- Nucleophile Substitutionen in Carbonsäure(derivate)n oder Kohlensäurederivaten
- Carbonsäuren bzw. Carbonsäureamide, Nitrile und deren Umwandlungen ineinander
- Kohlensäurederivate, Heterocumulene und deren Umwandlungen ineinander

- Additionen von Heteroatom-Nucleophilen an Aldehyde oder Ketone gefolgt von einer $\text{S}_{\text{N}}1$ -Reaktion (\rightarrow Acetal) oder $\text{E}1$ -Reaktion [\rightarrow Enolether, Imin(derivat) oder Enamin]
- Additionen von H-Nucleophilen und Metallorganen an Aldehyde oder Ketone
- Umsetzungen von Heteroatom-stabilisierten C-Nucleophilen mit Aldehyden oder Ketonen im Sinne von C=C-bildenden Kondensationen
- Chemie von Aldehyd- und Ketonenolen, von analogen Enaminen und von Carbonsäure(derivat)enolen
- Chemie von Aldehyd-, Keton- und Esterenolaten
- Oxidationen
- Reduktionen
- Umlagerungen

Optionale Inhalte:

- Nucleophile Additionen an Imine oder Immonium-Ionen
- Pericyclische Reaktionen jenseits von Diels-Alder-Reaktionen und [1,2]-Umlagerungen

(Organisch-chemisches Grund-)Praktikum samt Strukturaufklärungs-Begleitseminar:

Praktische Umsetzung von Reaktionsbeispielen zu den o. g. Reaktionsmechanismen der o. g. Vorlesung. Sofern (idealerweise) begleitend angeboten, sollte die Praxis der Theorie folgen. Das lässt sich am einfachsten mit einstufigen Präparaten realisieren. Unter derselben Prämisse eines Vorlaufs der Theorie gegenüber der Praxis sind prinzipiell aber auch zwei- oder sogar dreistufige Praktikumspräparate darstellbar. Sie veranschaulichen noch eindrucksvoller, wie (stark) man eine organisch-chemische Anfangsstruktur verändern kann.

Befruchtend ist ein zum Praktikum gehörendes Seminar, das lehrt, wie man organisch-chemische Strukturen aus eindimensionalen ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren ableitet. Solch ein Seminar gestattet den Praktikant/innen ab einem frühen Zeitpunkt des Praktikums, die eigenen Präparate NMR-spektroskopisch zu analysieren. Es sollte überdies dazu anregen bzw. befähigen, möglichst kernspezifische Zuordnungen aller Resonanzen vorzunehmen.

2.3.7 Thermodynamik

Konzept:

Die praktische Bedeutung der Thermodynamik 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. Dabei wird an im Themenblock "Allgemeine Chemie" [Vgl. 2.3.1] gesammelten Erkenntnissen zum chemischen Gleichgewicht und zu Energiebilanzen chemischer Reaktionen angeknüpft. Die anschauliche mikroskopisch-molekulare Darstellung der Energiespeicherung in Molekülen wird hierbei mit der makroskopisch-phänomenologischen Darstellung verknüpft.

Kerninhalte:

- Die Eigenschaften von Gasen: SI-Basiseinheiten, abgeleitete Größen und Einheiten, intensive und extensive Größen, Zustandsgleichung idealer Gase, Aggregatzustände und zwischenmolekulare Wechselwirkungen, van der Waals-Gleichung, Gesetz der korrespondierenden Zustände
- Kinetische Gastheorie und Einführung in die Statistische Thermodynamik: Boltzmann-Faktor, kanonische Zustandssumme, Verteilungsfunktion und mittlere Energie sowie Freiheitsgrade und Bewegungsformen eines Moleküls inkl. Zustandssummen, davon abgeleiteter thermodynamischer Größen, Wärmekapazität, Anwendung der Boltzmann-Statistik auf Teilchengeschwindigkeiten
- Die Hauptsätze der Thermodynamik: System, Temperatur, Arbeit und Wärme, Zustandsgrößen und -funktionen, innere Energie und Enthalpie sowie deren Ableitung nach der Temperatur, Bildungsenthalpien, Thermochemie, Kalorimetrie und Heß'scher Satz, Carnot'scher Kreisprozess, Joule-Thomson-Effekt; Richtung und Freiwilligkeit chemischer Prozesse, statistische Interpretation der Entropie, Nernst-Theorem
- Helmholtz- und Gibbs-Energie: Rollen für die Vorhersage der Richtung spontaner Prozesse, Gibbs-Helmholtz-Gleichung, thermodynamische Potenziale, Gibbs'sche Fundamentalgleichung, Grundgleichungen der Thermodynamik, charakteristische Funktionen und Maxwell-Relationen
- Phasengleichgewichte und Mischphasen: Phasengleichgewichte, Phasenübergänge, Gibb'sche Phasenregel, partielle molare Größen, Gibbs-Duhem'sche Gleichung, Gibbs'sche Fundamentalgleichung, das chemische Potenzial, Aktivitäten, Dampfdruckerniedrigung, kolligative Eigenschaften, osmotischer Druck, Siedepunktserhöhung, Gefrierpunktserniedrigung, Debye-Hückel-Theorie

- Thermodynamik von Festkörpern; Grenzflächen; Wärmekapazitäten: Vergleich mit Gasen, experimentelle Werte und Berechnung mit Hilfe der Zustandssummen, Fermi-Dirac-Statistik; Grenzflächengleichgewichte, Grenzflächenspannung, Adsorption, Benetzung, Oberflächenspannung, Grenzflächenerscheinungen, Adsorptionsphänomene an Festkörpern

Praktikum:

- Typischerweise 2-3 Versuche aus den Blöcken "thermodynamische Größen" (z.B. Van-der-Waals-Kurve und kritischer Punkt), "Thermochemie" (z.B. Verbrennungswärme) und "Phasengleichgewichte" (z.B. Siedediagramm).

2.3.8 Elektrochemie

Konzept:

Im Zentrum der Elektrochemie als Querschnittsdisziplin stehen elektrochemische Reaktionen, die Grundlage zahlreicher analytischer und technischer Anwendungen sind. An den Elektroden/Elektrolyt-Grenzflächen findet Ladungstrennung, Ladungstransfer sowie Massentransport statt.

Kerninhalte:

- Charakteristika elektrochemischer Reaktionen: Phasengrenzen und geladene Teilchen, Aufbau elektrochemische Zelle, Elektrodenreaktionen und Zellreaktion, Elektrolyse und Galvanische Zelle, Faraday-Gesetze, heterogene Reaktionsgeschwindigkeit; Elektrodentypen
- Thermodynamik elektrochemischer Reaktionen (Gleichgewichts-Elektrochemie): Zell- und Standardzellspannung, Standard-Elektroden-Potenziale, elektrochemische Spannungsreihe; EMK und Gleichgewichtskonstante, elektrochemisches Potential der Phase, Nernst-Gleichung, Aktivitätskoeffizienten, Abhängigkeit von Zustandsgrößen
- Ladungstrennung an Grenzflächen: Halbzelle mit Galvani-Spannung; Zellen mit und ohne Überführung, Diffusionsspannung; Zellspannungsmessungen und Nutzung galvanischer Zellen: Referenzelektroden, Bestimmung thermodynamischer Größen inkl. von Standard-Potenzialen
- Kinetik elektrochemischer Reaktionen: Ladungsdurchtritt: Ladungstransfer an der Elektrode; Elementarschritte bei Elektrodenreaktionen, Kinetik des Ladungstransferschritts (Butler-Volmer-Gleichung)
- Massentransport und Randschichten an der elektrochemischen Grenzfläche: (Migration: Zusammenhang Ionenbeweglichkeit und Leitfähigkeit; in der Ionenleiter-Phase: starke vs. schwache Elektrolyte inkl. Konzentrationsabhängigkeit molarer Leitfähigkeiten, Festelektrolyte und ionische Flüssigkeiten; Gesetz der unabhängigen Ionenwanderung, Überführungszahlen, Leitfähigkeitskoeffizienten, Grenzleitfähigkeit, Debye-Hückel-Theorie; elektrochemische Doppelschicht; Stabilität kolloidaler Dispersionen/Zeta-Potential; Diffusion und Diffusionsschichten (Ficksche Gesetze; vgl. Kinetik und Transport)

- Experimentelle Methoden: 3-Elektroden-Aufbau, potentio/galvanostatische Verfahren, Cyclovoltammetrie (CV)
- Anwendungen: Elektroanalytik: Gehaltsbestimmung mit Potentiometrie und Voltammetrie/Sensoren, pH-Wert-Messung; Batterien und Brennstoffzellen (Elektrokatalyse); Galvanik; Korrosion und Korrosionsschutz; elektrochemische Produktionsverfahren,
- *Optional Elektrosynthese; Power-to-X (Speicherung von Stromüberschüssen)*

Praktikum:

- EMK und thermodynamische Größen, Leitfähigkeit schwacher und starker Elektrolyte, Cyclovoltammetrie

2.3.9 Kinetik und Transport

Konzept:

Dieser Themenblock vermittelt die Grundlagen und Konzepte zur physikalisch-chemischen Beschreibung der Kinetik chemischer Reaktionen und Transportprozesse. 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. Neben experimentellen Methoden zur Bestimmung von Konzentration-Zeit-Profilen werden auch Theorien zur Berechnung von Geschwindigkeitskonstanten chemischer Reaktionen vorgestellt. Verknüpfungen aber auch Abgrenzungen der Kinetik/des Transports mit der Thermodynamik als auch der Elektrochemie werden hergestellt.

Kerninhalte:

- Grundbegriffe der chemischen Reaktionskinetik: Abgrenzung Kinetik vs. Thermodynamik (Edukte/Produkte und Übergangszustand auf der Potentialhyperfläche/Schnittfläche, Bedeutung der Reaktionskoordinate, thermodynamische vs. kinetische Kontrolle), Konzentrations-Zeit-Profile, Reaktionsgeschwindigkeit, Elementarreaktion und Molekularität
- Formale Kinetik von Elementarschritten: Reaktionsgeschwindigkeit vs. Geschwindigkeitskonstante, Reaktionsordnung, differentielle und integrierte Geschwindigkeitsgesetze für 0./1./2. und pseudo-Ordnung, graphische Auswertungen/linearisierte Auftragungen, Halbwertszeit inkl. Ausdrücke für verschiedene Reaktionsordnungen, Elementarreaktion vs. Bruttoreaktionsgleichung, Beispiele für verschiedene Reaktionsordnungen: unimolekulare Reaktionen, Gleichgewichtsreaktionen, Folgereaktionen, Katalyse
- Kinetik komplexerer Reaktionen und Katalyse: Parallele und konsekutive Reaktionen, Quasistationarität, Kettenreaktion (radikalisch, z.B. Knallgasreaktion) und Explosion (Explosionsgrenzen), *Photoreaktionen*; Adsorption an Festkörperoberflächen (Langmuir-Hinshelwood)
- Experimentelle Methoden zur Reaktionsverfolgung: Spektroskopie, Stopped-Flow, Blitzlichtphotolyse, Relaxationsmethoden, Molekularstrahlen

- Theorien zur Berechnung von Geschwindigkeitskonstanten: Grundzüge der Stoßtheorie: Stoßzahlen und mittlere freie Weglänge, Stoßquerschnitte; Theorie des Übergangszustands (Eyring)
- Transport: Gradient und Transportphänomene (Viskosität, Wärmeleitung und Diffusion) inkl. allg. Transportgleichung, Fick'sche Gesetze und Diffusion [Vgl. 2.3.8], Unterschiede von Reaktionen in Gasen und Flüssigkeiten, diffusionskontrollierte Reaktionen

Praktikum:

- Viskosität von Gasen, Geschwindigkeit von Gasmolekülen, Zerfallsreaktion, Geschwindigkeitskonstante pseudo-erster-Ordnung, Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten

2.3.10 Molekülspektroskopie und Molekülsymmetrie

Konzept:

In der Molekülspektroskopie beschränkt man sich auf eine klassische Beschreibung von elektromagnetischer Strahlung, behandelt die Moleküle aber quantenmechanisch. Um einen Überblick über die verschiedenen molekülspektroskopischen Techniken zu bekommen, betrachtet man das gesamte elektromagnetische Spektrum einschließlich der dort auftretenden Wechselwirkungsarten mit Materie und insbesondere mit Molekülen. Über die Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie erlaubt die Molekülspektroskopie neben der Identifizierung von Molekülen vor allem auch die Bestimmung von Molekülstrukturen und Bindungsstärken als auch von elektrischen und magnetischen Moleküleigenschaften. Mit Hilfe quantenmechanischer Modelle [Vgl. 2.3.11] für die verschiedenen Bewegungsformen (Rotation, Schwingung, Rotations-Schwingungs-Kopplung) lassen sich die jeweiligen experimentellen Spektren quantitativ beschreiben und damit interpretieren. Am Beispiel des Wassermoleküls werden die Grundlagen der Molekülsymmetrie und Gruppentheorie erläutert. Neben stationären Experimenten der Molekülspektroskopie in der Frequenz- oder der Zeitdomäne wird auch das Konzept zeitaufgelöster Anrege/Abfrage-Experimente eingeführt.

Kerninhalte:

- Quantenphysik: Experimentelle Grundlagen der Quantenphysik, Wahrscheinlichkeitswellen beim Licht, Wahrscheinlichkeitswellen bei Elektronen, Quantenphysik und klassische Physik
- Das elektromagnetische Spektrum: Elektromagnetische Strahlung (Welle, Teilchen, Dualismus, Entstehung von Strahlung, Strahlungsausbreitung, Kohärenz, Interferenz, Phase, Polarisation); Zusammenhang von Frequenz, Wellenlänge und Lichtgeschwindigkeit sowie die Abhängigkeit der Energie von diesen Größen; verschiedene Spektralbereiche und Arten der Anregungen; Informationen eines Spektrums: Position, Intensität, Linienbreite und Form einer Bande; Frequenz- vs. Zeit-Domäne und Fourier-Transformation (Lorentz-Profil & gedämpfter harmonischer Oszillator)
- Licht/Strahlung-Materie-Wechselwirkung: Auswahlregeln und Übergangsdipolmoment; Materie im magnetischen (Zeeman-Effekt) und im elektrischen Feld (Stark-Effekt), Begriff der Polarisation (verschiedene Arten der Polarisation, Leiter vs. Dielektrikum, Zusammenhang Brechungsindex und Suszeptibilität), Reflexion vs. Brechung vs. Absorption vs. Streuung

- Elektronische Spektroskopie: Lambert-Beersches-Gesetz inkl. Gültigkeitsbereich, Franck-Condon-Prinzip und -Integrale, Jablonski-Termschema: Übergangsdipolmomente, Übergangswahrscheinlichkeiten, Intensitäten, strahlungslose Desaktivierung, Internal Conversion, Intersystem Crossing, Singulett-, Triplett-Zustände, Fluoreszenz und Phosphoreszenz inkl. Lebensdauern der Zustände. Grundlagen des Lasers (drei Komponenten, spontane vs. induzierte Emission, Besetzungsinversion); Röntgen-, Auger- und Photoelektronen-Spektroskopie; Frequenz- vs. zeitaufgelöste Spektroskopie: Prinzip eines Anrege/Abfrage-Experimentes (transiente Absorption)
- Schwingungsspektroskopie: Absorption vs. Streuung, Dipolmoment, permanente vs. induzierte Dipole, elektronische Polarisierbarkeit; IR und Raman inkl. Auswahlregeln sowie ihrer jeweiligen Vor- und Nachteile, virtuelle vs. reelle Energieniveaus beim Streuvorgang, Stokes- und anti-Stokes-Linien. Konzept der Gruppenschwingung bei funktionellen Gruppen, Normalkoordinaten und Normalmoden/Normal-schwingungen, Inversionssymmetrie und Ausschlussprinzip; Anwendungen des harmonischen Oszillators: Auswirkung von Massen/Isotopeneffekten und der Kraftkonstante/Bindungsordnung auf die Schwingungswellenzahl, harmonischer vs. anharmonischer Oszillator, Obertöne, Fermi-Resonanz
- Rotations- und Schwingungs-Rotations-Spektroskopie: Rotator: Eigenwerte aus Schrödinger-Gleichung, Entartung, Präzession, Auswahlregeln, Besetzungszahlen, Anwendung zur Bestimmung von Gleichgewichtsabständen von Molekülen in der Gasphase. Rotationsschwingungsspektren: Termschema, Spektrum mit PQR-Zweig.
- Molekülsymmetrie und angewandte Gruppentheorie am Beispiel Wasser: Symmetrieelemente, Symmetrioperationen und Matrix-Darstellung, direktes Produkt, reduzible vs. irreduzible Darstellungen, Gruppen und Klassen, Bestimmung Punktgruppe, Aufbau Charaktertafel und Anwendung auf Normalmoden und IR- und Raman-Übergänge
- Magnetische Resonanzspektroskopie: NMR-Spektroskopie: Dauerstrich (cw) und gepulste Anregung, Fourier-Transformation anhand von Beispielen, Sättigung, Relaxation, Gleichverteilung, Spin-Gitter und Spin-Spin-Relaxation mit Lebensdauern, chemische Verschiebung, Spin-Spin- Wechselwirkung; ESR-Spektroskopie: Magnetisches Moment, Grundlagen und Einsatzbereich
- Versuchsaufbauten/Spektrometer: Schematische Anordnung für alle Spektralbereiche

2.3.11 Theoretische Chemie

Konzept:

Die Hauptelemente dieses Blocks sind die Vermittlung der Grundlagen der Quantenchemie (Anwendungen der Quantenmechanik auf Moleküle) und atomistischer Simulationen kondensierter Phasen als verpflichtende Vorlesung mit Übung für alle Studierende der Chemie im Sinne eines absoluten Minimalcurriculums. Gelehrt werden die Axiome der Quantenmechanik an Hand exakt lösbarer Systeme, das Wasserstoffatom als Grundlage der Atomorbitale, der Aufbau von Molekülorbitalen und daraus Wellenfunktionen für Vielelektronensysteme. Als grundlegende Simulationstechniken wird die Molekulardynamik im Rahmen klassischer Kraftfelder als approximative Darstellung hochdimensionaler Potentialflächen eingeführt. Die optionalen Inhalte sind zahlreich, da der Anteil der Theoretischen Chemie im Curriculum stark schwankt. Stichpunkte, die mit „qualitativ“ gekennzeichnet sind, sollen vom Umfang her eingeschränkt bzw. einführend behandelt werden.

Kerninhalte:

- Grundkonzepte der Quantenmechanik: Postulate, Bedeutung der Wellenfunktion und ihres Betragsquadrates, Observablen und die zugehörigen linearen, hermiteschen Operatoren, Eigenwertgleichungen, Eigenwert vs. Erwartungswert und Messwert, Unschärferelation, Superpositionsprinzip und quantenmechanische Interferenz, zeitabhängige Schrödinger-Gleichung
- Einteilchensysteme: Hamiltonoperator und zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung exakt lösbarer Systeme (Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom) zur Einführung von Quantisierung, Quantenzahlen, Eigenschaften von Einteilchenwellenfunktionen, Nullpunktsenergie, Atomorbitale, Drehimpulsoperator
- Vielelektronenatome: Spin, Symmetrisierungspostulat und Pauli-Prinzip, Orts- und Spinorbitale, Determinanten als einfachste Mehrelektronenwellenfunktion, Erwartungswerte von Determinanten, Multiplizität und Gesamtspin, Schalenstruktur der Atome und Aufbau des Periodensystems (qualitativ)
- Molekulare Vielteilchensysteme: Hamiltonoperator vielatomiger Moleküle, Born-Oppenheimer Separation von Elektronen und Kernen (einfacher Ansatz), Definition von BO-Potential(hyper)flächen und von Molekülkoordinatensystemen, Bedeutung der stationären Punkte in der Chemie, Konzept adiabatischer chemischer Reaktionen auf Potentialflächen (qualitativ), Tunneleffekt (qualitativ)

- Kraftfelder und Molekulardynamik: Approximative Darstellung von BO-Potential(hyper)flächen durch Kraftfelder mit einfachen Funktionen (Coulomb, harmonische, Lennard-Jones, Morse Potentiale), Newtonsche und diskretisierte Bewegungsgleichungen, Beschreibung der klassischen Dynamik kondensierter Materie mit periodischen Randbedingungen (qualitativ), einfachste Eigenschaften aus MD Simulationen (z.B. radiale Verteilungsfunktionen oder Diffusionskoeffizienten), Kontinuumsmodelle für Flüssigkeiten und Lösungen (qualitativ)
- Methoden für molekulare Vielelektronensysteme: LCAO-Ansatz und AO-Basisätze, effektive Einteilchentheorien (Hückel und tight-binding), Hartree-Fock Theorie, Elektronenkorrelation (qualitativ), Grundlagen der Kohn-Sham DFT, approximative Dichtefunktionale
- Beschreibung und Analyse der Elektronenstruktur: Qualitative MO-Theorie und Populationsanalysen, Klassifizierung und quantenchemische Beschreibung verschiedener Bindungstypen (kovalent, ionisch, van der Waals), Hybridorbitale, lokalisierte MOs und Lewis-Strukturen, Pauli-Repulsion (sterische Wechselwirkung)

Theoretikum:

- Computational Chemistry: Anwendungsrechnungen mit Hilfe einfach zu bedienender QC- und MD-Programmpakete (ggfs. als zwei praktische Übungsstunden zur Vorlesung im Tausch gegen Papier-und-Bleistift Übungen gegen Ende des Semesters)

2.3.12 Physik

Konzept:

Ziel ist die Einführung in die stringente Denk- und Arbeitsweise dieser fundamentalen Naturwissenschaft und ihre Bedeutung für die Chemie. Physikalische Phänomene werden ausgehend von Fragen und Experimenten beobachtet und quantitativ beschrieben. Grundlegende Naturgesetze und Beschreibungsmodelle werden eingeführt auf Basis von zentralen physikalischen Begrifflichkeiten wie Materie, Raum, Zeit und Energie. Wo immer es möglich ist, sollte ein Bezug zur Chemie hergestellt werden, um die quantitativen Grundlagen chemischer Phänomene zu vermitteln. Gleichzeitig werden die engen Beziehungen zwischen Experiment und Theorie sowie von Beobachtung und Verständnis durch Modellbildung herausgearbeitet. Die Denkweise und das Methodenspektrum der Physik fördern zudem die Beurteilungsfähigkeit der Studierenden für Mess-Unsicherheiten und ihre quantitative Beschreibung.

Inhalte:

- Was ist Physik? Definition und Abgrenzung zu anderen Wissenschaften, Historie, Methodik der Physik
- Mechanik: Kinematik inkl. Messprozess und Fehlerrechnung; Dynamik - Masse und Kraft inkl. Kausalität und Determinismus, Begriffsbildung in der Physik, physikalische Größen und ihre Maßeinheiten; Energie und Arbeit – Erhaltungssätze; Rotation starrer Körper
- Mechanische Schwingungen und Wellen: Harmonische Schwingung, Zusammenwirken mehrerer Schwingungen, Entstehung und Ausbreitung von Wellen, Eigenschaften von Wellen; Bewegungsgleichungen für ungedämpfte, gedämpfte und angetriebene gedämpfte harmonische Schwingung inkl. Phase
- Elektro- und Magnetostatik & Elektrodynamik: Elektrischer Stromkreis, Ladung, elektrisches Feld, Bewegung geladener Teilchen im elektrischen Feld, Kraftwirkung des magnetischen Feldes, Untersuchung besonderer magnetischer Felder, elektromagnetische Induktion, Wechselstromtechnik, elektromagnetische Schwingungen und elektromagnetische Wellen, Wellenmodell des Lichtes, elektromagnetisches Spektrum; spezielle Relativitätstheorie (Energie und Masse, Masse und Geschwindigkeit)
- Optik: Eigenschaften des Lichts (Lichtgeschwindigkeit, Ausbreitung, Reflexion und Brechung, Polarisierung), Geometrische Optik (Spiegel, Linsen, Optische Instrumente: Mikroskop), Interferenz und Beugung (Interferenzmuster beim Doppelspalt, Beugungsgitter, Beugungsmuster beim Einzelspalt, Beugung und Auflösung)

- Festkörperphysik: Mechanische Eigenschaften fester Körper, Bändermodell und Bandstruktur, Halbleiterphysik (Dotierung, p-n-Übergang, Transistor)
- Kernphysik: Natürliche Radioaktivität, Aufbau und Systematik der Atomkerne, Kernumwandlung und radioaktive Strahlung, Energie der Atomkerne und Kernmodelle, künstliche Kernumwandlung und Kernspaltung inkl. techn. Nutzung, Kernfusion

Praktikum:

- Ausgewählte Experimente aus den Bereichen Mechanik, Wellen, Elektrizität/Magnetismus, Optik sowie Atom- und Kernphysik

Übungen:

- Übungsstunden mit qualitativen Verständnisaufgaben und Rechenaufgaben
- Ausgewählte Experimente aus den Bereichen Mechanik, Schwingungen und Wellen, Elektrizität und Magnetismus sowie Optik

2.3.13 Mathematik/Statistik und Datenwissenschaft

Konzept Mathematik/Statistik:

Es werden die mathematischen und statistischen Konzepte und Rechentechniken vermittelt, die in der Chemie benötigt werden. Die abstrakt-formale mathematische Beschreibung wird dabei ergänzt durch veranschaulichende graphische und für das naturwissenschaftliche Zielpublikum angepasste Darstellungen. Es werden möglichst viele konkrete Beispiele mit chemischem und physikalischem Bezug präsentiert und in Form von Anwendungen von Computerprogrammen (z.B. Excel, Origin, Matlab, Mathematica) vertieft. Neben der Vermittlung elementar notwendiger Methoden und Techniken zur quantitativen Erfassung chemischer Phänomene und zum Verständnis physikalischer Konzepte, legt insbesondere die statistische Grundausbildung das Fundament für die kritische Bewertung von Beobachtungen und Ergebnissen.

Inhalte Mathematik/Statistik:

- Grundlagen: Mengen, Zahlen, komplexe Zahlen, Vektoralgebra, Euklidische Geometrie, Abbildungen und elementare Funktionen
- Analysis: Folgen, unendliche Reihen, Binomialreihe, Fourierreihen, Polynome, Stetigkeit, Differentialrechnung, Taylorreihen, Integralrechnung, mehrdimensionale Differential- und Integralrechnung, gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen (Bsp. aus der Physik: Bewegungsgleichungen; Wellengleichung), Vektoranalysis (Gradient, Divergenz, Rotation), Optimierungsverfahren
- Lineare Algebra: Elemente der linearen Algebra, Matrizen, Determinanten, lineare Gleichungssysteme, Eigenwertprobleme, numerische Methoden
- Stochastik und Statistik: Wahrscheinlichkeitsrechnung, Kombinatorik; deskriptive Statistik: Verteilungsfunktionen und -charakteristiken, Streuungsmaße, Korrelationen; Schätzer, Bayes-Satz, Konfidenzanalyse Regressionsmethoden und Fehler- bzw. Ausgleichsrechnung; multivariate Statistik: Faktoren- und Clusteranalyse; Versuchsplanung, experimentelles Design

Konzept Datenwissenschaft:

Aufbauend auf mathematisch-statistischen Grundkenntnissen werden Methoden, insbesondere informatische Techniken präsentiert, die Chemiestudierende befähigen, mit digitalen Daten umzugehen und diese modellhaft zu interpretieren. Der chemische, chemisch-physikalische bzw. chemisch-biologische Praxisbezug stellt ein zentrales Element zur Vermittlung abstrakten Wissens dar, was die Nutzung von Computern und Programmen durch Studierende erfordert. Die computergestützten Inhalte können im Rahmen von Übungen und Praktika vermittelt werden, wodurch sich als Mehrwert auch die enge Verzahnung von experimenteller und theoretischer Chemie ergibt.

Inhalte Datenwissenschaft:

- Wissenschaftliche Programmierung: Informatische Grundlagen, Algorithmen; Compilersprachen, Skriptsprachen (Python, R, Mathematica, Matlab); Programmierumgebungen, Workflow-Tools (z.B. KNIME); algorithmische Umsetzung numerischer Verfahren, Simulationsmethoden, wissenschaftliches Rechnen; Umgang mit High-Performance-Computern und Parallelverarbeitung
- Datenanalyse und -modellierung: Datenquellen (instrumentelle und theoretische, Datenbanken), Datenqualität und -kuratierung, Datenvisualisierung; praktische Komponenten- bzw. Clusteranalyse, Labeling und Merkmalsauswahl, (multivariate) Regression, Chemometrie; Konzepte des maschinellen Lernens bzw. der künstlichen Intelligenz (neuronale Netze, Decision Trees, Support Vector Machines, Markov-Modelle), Konstruktion von Trainings-, Validierungs- und Testdatensätzen
- Forschungsdatenmanagement: Unterscheidung zwischen Roh- und aufbereiteten Daten, gute wissenschaftliche Praxis im Kontext von Forschungsdaten; elektronische Laborbücher, Repositorien; Metadaten, Annotation, Ontologien; Datenmanagementpläne, Forschungsdateninfrastruktur; rechtliche und ethische Anforderungen
- Chemieinformatische Methoden: Strukturrepräsentation im Computer (2D, 3D, Codierung durch z.B. SMILES, InChI), chemisch-/biologisch/physikalische Datenbanken; chemische Deskriptoren, Ähnlichkeitsmaße, Pharmakophore, Graphentheorie; maschinelles Lernen in der Chemie, strukturbasiertes Design, virtuelles Screening, Syntheseplanung

2.3.14 Toxikologie und Rechtskunde

Konzept Toxikologie:

Die wesentlichen Grundlagen für die toxische Wirkung von Stoffen auf den menschlichen Körper werden so vermittelt, dass die Teilnehmer diese einzuschätzen lernen und angemessen mit daraus resultierenden Risiken umzugehen verstehen, beziehungsweise sie in der Lage sind, bei Bedarf sich in spezielle toxikologische Sachverhalte einzuarbeiten und gegebenenfalls rechtzeitig einen Experten zu Rate zu ziehen.

Inhalte:

- Aufgaben und Definition der Toxikologie, Grundlagen der Toxikologie, Toxikokinetik (Resorption, Metabolismus, Distribution und Elimination), Toxikodynamik, Bedeutung der Exposition gegen Stoffe, Prinzipien der Sosis-Wirkungsbeziehung, akute und chronische Wirkungen ausgewählter Substanzen, toxikologische und ökotoxikologische Testmethoden (akute und chronische Toxizitätstests, Mutagenität, Cancerogenität und Reproduktionstoxizität), Risikoermittlung und Risikobewertung, Grenzwertableitung, Arbeitsschutzaspekte und richtiges Verhalten im Unglücks-/Vergiftungsfall
- Spezifische Wirkungen von Stoffen mit krebserzeugendem, erbgutveränderndem und reproduktionstoxischem Potential. Ausgewählte Beispiele der toxischen Wirkung von Lösemitteln, polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen, aromatischen Aminen, Nitro- und Nitrosoverbindungen, Biozide und Metalle bzw. metallorganischen Verbindungen, sowie Wirkungen auf den Atemtrakt!

Konzept Rechtskunde:

Wichtige rechtliche Aspekte im Hinblick auf die beruflichen Anforderungen an Chemiker/innen in der Arbeitswelt werden so vermittelt, dass die Teilnehmer/innen einerseits einen groben Überblick über geltende Vorschriften des deutschen und europäischen Chemikalienrechts gewinnen, andererseits in die Lage versetzt werden, sich bei „Bedarf“ gezielt in entsprechende Vorschriftentexte einzuarbeiten.

Wichtigste geltende deutsche und europarechtliche Vorschriften des Chemikalien- und (arbeitsschutzorientierten) Gefahrstoffrechtes werden vorgestellt und es wird vermittelt, wie sie miteinander verzahnt sind. An diesen Beispielen werden nicht nur Vorschrifteninhalte, sondern auch der Aufbau von Rechtsvorschriften und Grundzüge ihrer Methodik vermittelt.

Im Fokus stehen REACH und die CLP-VO, das ChemG, die GefStoffV und die ChemVerbotsV. Weitere themenangrenzende Rechtsvorschriften (zu Bioziden, Biostoffen, gefährlichen Abfällen, Gefahrgütern etc.) werden in Grundzügen behandelt.

Außerdem wird vermittelt, wie Vorschriften des Staatlichen und Berufsgenossenschaftlichen Rechts durchgesetzt werden (Sanktionen bei Verstößen).

Die Inhalte der Veranstaltung umfassen somit den „Vorschriften-Teil“ der Bekanntmachung von Hinweisen und Empfehlungen zum Sachkundenachweis gemäß §11 der Chemikalienverbotsverordnung des BMU.

Zusammen mit der Veranstaltung „Toxikologie für Chemiker“ kann die „Rechtskunde für Chemiker“ die Grundlage für den Erwerb der eingeschränkten Sachkunde für das Inverkehrbringen von gefährlichen Stoffen und Gemischen gemäß §11 ChemVerbotsV bilden.

2.3.15 Grundlagen wissenschaftlichen Arbeitens

Konzept:

Die Durchführung von Literaturrecherchen zu naturwissenschaftlichen Themen und die Gestaltung einer Präsentation mit Vortragstechniken werden vermittelt. Zudem erlernt man die wissenschaftliche Diskussion eines vorgetragenen Themas (auch in englischer Sprache).

Ferner erlernt man, komplexe naturwissenschaftliche Zusammenhänge in einem zeitlich begrenzten Rahmen für eine schriftliche Ausarbeitung und eine Präsentation aufzubereiten und eine kritische wissenschaftliche Diskussion zu führen [Vgl. auch Kasten „Wissenschaftskommunikation“]

In diesem Themenblock werden weiterhin Aspekte zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis (DFG-Standard) und Ethik in den Wissenschaften vermittelt.

Inhalte:

- Zeitmanagement, wissenschaftliche Methodiken, Forschungsdatenmanagement, Urheberrecht
- Aufbau wissenschaftlicher Vorgehensweise: Thema, Motivation, Hypothese, Konzept, Arbeits-/Versuchsplan (statistische Versuchsplanung), Ergebnisse, Diskussion, Schlussfolgerung, Ausblick
- Recherchieren: Literaturrecherche, Quellen- und Datenrecherche, Auffinden von Primärliteratur via SciFinder, Suchen nach einschlägigen vorherigen wissenschaftlichen Vorarbeiten Dritter
- Schriftliches Verfassen von wissenschaftlichen Arbeiten: Aufbau, Gliederung und Formatierung einer wiss. Arbeit; Literaturverzeichnis; geordnete Wiedergabe einschlägiger Forschungserfolge Dritter und Zitieren von einschlägiger Literatur inklusive Zitieren von Texten aus dem Internet; Anfertigen eines Protokolls inkl. nachvollziehbarer Versuchsbeschreibung und Betrachtung von Messunsicherheiten
- Präsentieren: Präsentationsformen; Präsentationsvorbereitung; Phasen und vor allem Inhalte einer Präsentation (Checkliste); Anforderungen und technische Hilfsmittel einer Visualisierung; Sprechtechnik; wiss. Sprache

3 Profilverriculum des Bachelorstudiums Chemie (2 Semester)

Die gelebte Erfahrung von über 50 universitären Bachelorstudiengängen Chemie zeigt, dass sich die Studieninhalte standortabhängig vor allem im 5. und 6. Semester zum Teil erheblich voneinander unterscheiden. Das liegt an der Mittel- und Mittlerstellung dieses Studienabschnitts. Er leitet von den Bachelor-Semestern 1-4, deren Inhalt nur wenig vom Standort abhängt, zu den chemieständigen Masterstudiengängen über. Letzteren wenden sich 98% der B. Sc.-Chemie-Absolvent:innen zu. Sie schlagen damit den Weg Richtung Forschung ein, was in der Anfertigung ihrer Masterarbeit kulminiert. Der Forschungsaspekt dominiert aber im Regelfall noch Jahre darüber hinaus: weil die meisten, die einen chemieständigen Masterabschluss erwerben, eine Promotion in einem Chemie-Teilgebiet anschließen.

Im Rahmen der geschilderten Gesamtsituation nehmen die Studiensemester 5 und 6 vieler Bachelorstudiengänge Chemie zum ersten Mal Bezüge zu den vor Ort vertretenen Forschungsrichtungen auf. Die in ihnen manifestierten und im großen Ganzen gewünschten Spezialisierungen entziehen sich naturgemäß konkreter Gestaltungsvorschläge einer so zentralen Studienkommission wie derjenigen der GDCh. Die nachfolgende Zusammenstellung versteht sich also als Optionen darstellend, auch wenn beileibe nicht sämtliche potentiell sinnstiftenden Optionen ausformuliert wurden. Und natürlich versteht sich diese Zusammenstellung in erster Linie als „entweder/oder“- und definitiv nicht als „sowohl/als auch“-Katalog.

3.1 Anorganische Festkörperchemie

Konzept:

Basierend auf den Grundlagen der Anorganischen und Physikalischen Chemie werden Kenntnisse der Anorganischen Festkörperchemie und der Anwendung physikalischer Methoden zur Analyse von Struktur- und Bindungsverhältnissen in anorganischen Verbindungen vermittelt. Die erworbenen Fertigkeiten befähigen zu einem tieferen Verständnis von Zusammenhängen zwischen Struktur, chemischer Bindung und Eigenschaften.

Inhalte:

- 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)
- Beschreibung von Kristallstrukturen: Elementarzelle, Translationssymmetrie, Kugelpackungen, Lückenbesetzung, einfache Strukturtypen binärer und ternärer Verbindungen
- Zustandsdiagramme, Polymorphie, Phasenumwandlungen, thermische Analyse
- Kovalente Bindungen: Strukturen von Halb- und Nichtmetallen, Druck-Koordinationsregel, Druck-Abstands-Paradoxon, Grimm-Sommerfeld-Regel
- Ionenkristalle: Born-Haber-Kreisprozess, Gitterenergie, Pauling-Regeln
- Partiiell- und nichtkristalline Feststoffe: Gläser, mikro-, meso-, nanostrukturierte Materialien, Komposit-Materialien
- Elektronische Struktur: Bändertheorie, Bandstruktur, Zustandsdichten
- Metalle und Legierungen, Metallographie
- Elektrische Eigenschaften: Halbleiter, Ferroelektrika, Ionenleiter, Defektchemie, Supraleiter
- Kooperative Phänomene: Ferro-, Antiferro- und Ferrimagnetismus, SQUID-Magnetometer

- Mößbauerspektroskopie, ESR-Spektroskopie
- Optische Eigenschaften und Pigmente
- Strukturanalytik: Röntgen-, Elektronen- und Neutronenbeugung: Symmetrieelemente und -operationen [Vgl. 2.3.10], Punktgruppen, Translationssymmetrie, Elementarzellenkonzept, Kristallsysteme, Bravais-Gitter, Raumgruppen, Hermann-Mauguin-Symbolik, reziprokes Gitter, Ewald-Kugel, Beugung am Gitter, Bragg-Gleichung, Millersche Indizes, Einkristalle und Pulver, Indizierung von Diffraktogrammen, Strukturbestimmung und -verfeinerung, Strukturbeschreibung

Praktikum:

- Festkörpersynthesen, Strukturanalytik, Bestimmung von Materialeigenschaften

3.2 Organische Chemie für Fortgeschrittene

Beispiel Konzept 1: Schlüsselreaktionen der Organischen Chemie

Vermittlung vertiefter Kenntnisse in Organischer Synthesechemie anhand der Vorstellung von zehn Top-Reaktionen der Organischen Chemie und der zahlreichen Konzepte, die ihnen bzw. ihren Syntheseanwendungen zugrunde liegen. Die Entwicklung von sechs dieser Reaktionen wurde der Zuerkennung eines Chemie-Nobelpreises für würdig erachtet. Zusammen mit den vier darüber hinaus berücksichtigten „Schlüsselreaktionen“ wird ein Ensemble an Reaktionen nahegebracht, das von größtem Wert für die Beantwortung der immer gleichen und doch immer wieder neuen (Prüfungs)Frage ist: „Wie könnte man eine beliebige, konkret angegebene Verbindung synthetisieren?“

Äquivalente Konzepte sind beispielsweise denkbar für die Themen „Aromaten und Heteroaromaten“, „Naturstoffchemie“ u.a.m.

Exemplarischer Inhalt (Konzept 1):

- Diels-Alder-Reaktionen (LCAO-Beschreibung der p-MOs von linear konjugierten sp^2 -Zentren; Grenzorbital-Wechselwirkungen bei einstufigen Cycloadditionen; Geschwindigkeit und Orientierungselektivität von Diels-Alder-Reaktionen; Einfache Diastereoselektivität von Diels-Alder-Reaktionen; Asymmetrische Diels-Alder-Reaktionen)
- 5-Hexenylradikal→Cyclopentylcarbinylradikal-Cyclisierungen (Baldwin-Regeln; Einstiegsmöglichkeiten in die Titel-Cyclisierung; Terminationsmöglichkeiten der Titel-Cyclisierung)
- Aliphatische Claisen-Umlagerungen (Claisen-Umlagerung von Allylenolethern; Einfache Diastereoselektivität und Chiralitätstransfer; Johnson-Orthoester-Umlagerung; Claisen-Ireland-Umlagerung)
- Chemie von Li-Enolaten (Regio- und/oder Stereoselektivität von Deprotonierungen zu Li-Enolaten; α -Funktionalisierung von enantiomerenreinen Li-Enolaten oder Li-Azaenolaten; Aldoladditionen von Li-Enolaten und deren einfache Diastereoselektivität)
- 1,4-Additionen (Mechanismus; Reaktionsbeispiele inkl. nützlicher Folgereaktionen; Asymmetrische 1,4-Additionen)

- Asymmetrische Sharpless-Epoxidierungen (Enantio- oder diastereoselektive Epoxidierung primärer Allylalkohole; Kinetische Racematspaltung sekundärer Allylalkohole; Syntheseanwendungen enantiomerenreiner Epoxyalkohole)
- Asymmetrische Sharpless-Dihydroxylierungen (Entwicklung der Asymmetrischen Sharpless-Dihydroxylierung; Mechanismus; Syntheseanwendungen)
- Olefin-Metathesen (Reaktionsprinzip und Mechanismus; Kreuzmetathesen; Ringchlussmetathesen; Enin-Metathesen)
- Mizoroki-Heck-Reaktionen (Reaktionsprinzip und Mechanismus; Intermolekulare Mizoroki-Heck-Reaktionen; Intramolekulare Mizoroki-Heck-Reaktionen)
- Katalytisch-Asymmetrische Hydrierungen in homogener Phase (Asymmetrische Hydrierungen von Dehydroamino- und anderen α,β -ungesättigten Carbonsäureestern; Asymmetrische Hydrierungen von β -Ketoestern und anderen funktionalisierten Ketonen)

3.3 Statistische Thermodynamik

Konzept:

Die statistische Thermodynamik ist das Bindeglied zwischen der Quantenmechanik und der phänomenologischen Thermodynamik. Wichtige Größen der Thermodynamik können mit Hilfe der statistischen Thermodynamik direkt aus quantenmechanischen Größen bzw. aus klassisch-mechanischen Modellen abgeleitet werden. Im Profilverriculum werden über die bereits in der physikalisch-chemischen Grundausbildung hinaus präsentierten Inhalte allgemeinere Zusammenhänge dargelegt sowie beispielhafte Anwendungen auf ideale und reale Systeme vermittelt. Die Inhalte können im Rahmen eines theoretisch-chemischen Praktikums vertieft werden.

Inhalte:

- Grundlagen der statistischen Thermodynamik (diskrete Zustände) und der klassischen statistischen Mechanik (kontinuierliche Systeme): Ensembles, Entropiekonzepte, Maxwell-Boltzmann-Statistik, Zustandssummen, Phasenraum, generalisierte Koordinaten, Impuls- und Konfigurationsintegrale, Zusammenhang mit thermodynamischen Größen, Gleichverteilungssatz; Grundlagen der Quantenstatistik (Systeme aus ununterscheidbaren Teilchen, Übergang von Fermi-Dirac-, Bose-Einstein- zur Maxwell-Boltzmann-Statistik)
- Anwendungen der statistischen Thermodynamik: Z.B. Berechnung chemischer Gleichgewichte idealer Systeme, Absolutberechnung von Reaktionsgeschwindigkeiten (Eyring-Theorie), Struktur und Thermodynamik realer Gase und Flüssigkeiten, Festkörper (Wärmekapazitäten), makromolekulare und biomolekulare Systeme, Computersimulationsmethoden (molekulare Potentialfunktionen bzw. Kraftfelder, Molekulardynamik- und Monte Carlo-Verfahren); Phasenübergänge; Komplexbildungsphänomene; Bezug zu Transportphänomenen (Linear-Response-Theorie)

3.4 Technische Chemie/Chemische Technologie

Konzept:

Der Themenblock behandelt die Reaktionstechnik und die verfahrenstechnischen Grundoperationen mit den Einzelschritten chemischer Produktionsverfahren und ergänzt damit die Industrielle Chemie [Vgl. 3.5] mit den chemischen Produktionsverfahren in ihren stofflichen und technischen Aspekten als Ganzes.

Inhalte:

- Verfahrensentwicklung in der chemischen Industrie
- Versuchsplanung, Einteilung und Bewertung von Versuchsvariablen, Zielgrößen, faktorielles Design
- Katalyse: homogene und heterogene Katalyse, Biokatalyse
- Chemische Produktionsanlagen: Aufbau, Fließbilder, Up- und Downstream-Prozesse
- Chemische Thermodynamik und Kinetik: Umsatz, Ausbeute und Selektivität
- Chemische Reaktionstechnik: Grundlagen, ideale Reaktoren, Reaktoren mit realem Verhalten, Stoff- und Wärmebilanzen, Verweilzeit, Verweilzeitverhalten idealer und realer Reaktoren, Reaktormodellierung, Reaktorsicherheit, Ausführungsformen von Reaktoren
- Kinetik heterogen katalysierter Reaktionen, Makro- und Mikrokinetik, Massentransportlimitation, Katalysatornutzungsgrad, homogene Katalyse
- Thermische und mechanische Grundoperationen in Up- und Downstream-Prozessen: Grundlagen des Wärme- und Stofftransportes, Strömungsmechanik, Ähnlichkeitstheorie, Beispiele (Destillation/Rektifikation, Adsorption, Absorption, Ionenaustausch, Extraktion, (Membran-)Filtration, Sedimentation, Zentrifugation, Mahlen, Rühren, Mischen)
- Rohstoffe und Produkte der Chemischen Industrie, Umwelt- und Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen, Nachhaltigkeit, Ressourcen
- Übungen mit technisch-chemischen Berechnungen zum chemischen Gleichgewicht, Reaktionskinetik, Stoff- und Wärme-Bilanzierung, Verweilzeitverteilungen, Reaktor- und Prozessauslegungen etc.

Praktikum:

Die Praktikumsversuche zur Chemischen Technologie sollten folgende Themengebiete (zumindest teilweise) abdecken:

- Messen/Steuern/Regeln von Prozessstufen
- Rührkessel bzw. Rührkesselkaskade (z.B. Esterverseifung unter pH-Verfolgung)
- heterogen katalysierte Gasphasenströmungsreaktor-Reaktionsverfolgung (Umsatz, Zünden, Löschen einer Reaktion, Bilanzierung, Arrhenius-Plot, Transportkinetik/Massentransportlimitation)
- Verweilzeitverhalten [z.B. Stoß- oder Sprungmarkierung in Rührkessel(kaskade) oder im Strömungsreaktor mit Zusatzeinbauten wie z.B. Totzone oder Bypass]
- Temperaturprogrammierte Methoden (Desorption, Oxidation oder Reduktion)
- Versuche zu mechanischen Grundoperationen (Sedimentation, Zentrifugation, Filtration/druckgetriebene Membranverfahren, Mahlen/Sieben/Rühren etc.)
- Versuche zu thermischen Grundoperationen (Adsorption, Ionenaustausch (Durchbruchskurven), Extraktion, Destillation/Rektifikation etc.)

vgl. auch: „Lehrprofil Technische Chemie“, herausgegeben vom DECHEMA-Unterrichtsausschuss für Technische Chemie an Wissenschaftlichen Hochschulen, 4. Auflage, Frankfurt am Main, Oktober 2014

3.5 Industrielle Chemie

Konzept:

Der Themenblock behandelt die chemischen Produktionsverfahren in ihren stofflichen und technischen Aspekten als Ganzes und ergänzt damit die anderen Teilbereiche der Chemischen Technologie [Vgl. 3.4], die sich in der Reaktionstechnik und den verfahrenstechnischen Grundoperationen mit den Einzelschritten chemischer Produktionsverfahren befassen.

Inhalte:

- Chemische Industrie, Verfahrensentwicklung (Labor, Scale-up, Industrie)
- Energie, Rohstoffe, Technologie
- Ökonomische und ökologische Betrachtungen, Stoffflüsse und Stoffkreisläufe (Linearwirtschaft vs. Zirkuläre Wirtschaft/Circular Economy), Abfallprodukte und deren Recycling, Grundwasseraufbereitung
- Basischemikalien-Herstellung (Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Chlor, Ammoniak, Schwefeldioxid, etc.), Luftzerlegung
- Anorganische Endprodukte, z.B. Anorganische Säuren, Herstellung und Verwendung; Düngemittel; Bauchemie (Zement, Pigmente); Zeolithe; Stahl und Metalle; Siliciumherstellung, Silicone
- Petrochemie: Verfahrensabläufe, Produktspektrum
- Organische Zwischen- und Endprodukte: C₁₋₃-Chemie, Alkohole, Aromaten, Halogenderivate; Polymere: PE, PP, PVC, Polyamide, Polyester, bio-basierte und biologisch abbaubare Kunststoffe
- Nachwachsende Rohstoffe

Im vorlesungsbegleitenden Seminar sollen Studenten in Kurzpräsentationen spezielle bzw. ergänzende Aspekte der Industriellen Chemie darstellen, um so die Vorlesungsinhalte zu vertiefen (Beispielthemen: IC-Herstellung, Celitement, Stähle, Hartmetalle, Verwendung von Zeolithen, synthetische anorganische Fasermaterialien, Superabsorber usw.)

3.6 Makromolekulare Chemie

Konzept:

Grundlegendes Verständnis der Synthese, Eigenschaften und Verarbeitung makromolekularer Stoffe wird vermittelt. Ökobilanz und Bedeutung der Polymere in der Gesellschaft sollen besprochen werden.

Inhalte:

- Allgemein: Grundbegriffe, Molare Masse, Nomenklatur, Systematik der Makromolekularen Chemie nach Reaktionstypen (Stufenwachstum vs. Kettenwachstum) und Polymerklassen, makromolekulare Strukturprinzipien, Strukturen in Lösung und im Festkörper, Verwendung (Werkstoffe vs. Funktionsstoffe)
- Synthesen von Makromolekülen: radikalische, kationische, anionische und koordinative Polymerisation, Polykondensation, Polyaddition, kontrollierte radikalische Polymerisationen, spezielle Reaktionstechniken (Emulsions-, Suspensions-, Fällungs-, Lösungs-, und Grenzflächenpolymerisation), thermodynamische und kinetische Prinzipien. Copolymerisation
- Analyse von Polymeren: Molekulargewichtsanalyse, thermische und strukturelle Analyse im Festkörper, mechanische Eigenschaften, Rheologie in Lösung und in Schmelzen, Oberflächeneigenschaften, Stabilität kolloidaler Systeme
- Stoffchemie: Thermoplaste, Elastomere, Duromere, Polyolefine, Polyester, Polyamide, Polyurethane, Biopolymere, elektrisch leitfähige Polymere, transparente Polymere, Additive für Polymere
- Verarbeitung von Polymeren: Film- und Faserherstellung, Schmelzextrusion, Spritzgießen, Blasformen, Schäumen, Verbundwerkstoffe
- Nachhaltigkeit: Polymerrecycling, bio-basierte und (biologisch) abbaubare Polymere

Praktikum:

- Reinigung von Monomeren und Polymeren, Radikalische Polymerisation (z.B. in Substanz, Emulsion, Lösung), Polykondensationen und Polyadditionen (z.B. in Lösung, an Grenzfläche oder in Schmelze). Copolymerisation und Bestimmung Copolymerisationsparameter, Polymerisationskinetik. Molekulargewichtsbestimmungen (z.B. Viskositätsbestimmung, GPC, Lichtstreuung, MALDI), thermische Charakterisierungsmethoden (z.B. DSC, TGA, DMA, Rheologie), Strukturanalyse (z.B. IR, NMR, Röntgen). Polymerrecycling bzw. Polymerabbau. Polymerverarbeitung (z.B. Polymerfilme, 3D-Druck, Spritzguß Faserspinnen).

3.7 Biochemie

Konzept:

Dieser Themenbereich vermittelt die notwendigen Kenntnisse und Konzepte, um Biomoleküle und ihre Reaktionen zu charakterisieren und Grundprinzipien chemischer Prozesse in lebenden Systemen zu verstehen. Kenntnisse aus der Anorganischen und Organischen Stoffchemie [Vgl. 2.3.2/2.3.5] und „Reaktionsmechanismen“ [Vgl. 2.3.6] werden dazu eingesetzt, Struktur und Eigenschaften von Biomolekülen zu klassifizieren, grundlegende Reaktionen in wichtigen Stoffwechselwegen nachzuvollziehen und Mechanismen von enzymkatalysierten Reaktionen zu verstehen. Die Energetik biochemischer Prozesse erlaubt eine Vorhersage darüber, wie biologische Prozesse auf Änderungen von Randbedingungen reagieren. In der Praxis werden biochemische Grundlagen bei der Entwicklung von Enzymen für die Synthese und für nachhaltige Prozesse ebenso benötigt wie für die Entwicklung neuer Diagnoseverfahren und Wirkstoffe.

Inhalte:

- Aufbau der Zelle (Organellen in Tier- und Pflanzenzellen, Bedeutung der Kompartimentierung)
- Proteine (Aminosäuren, Peptidbindung und Proteolyse, Ramachandran-Plot, Proteinfaltung und Struktur motive, Proteinreinigung, Eigenschaften von Proteinen)
- Nukleinsäuren (Nukleotide, Watson-Crick-Basenpaarung, Polymerase-Kettenreaktion, Sequenziermethoden, der genetische Code, Epigenetik, Genome Editing)
- Enzyme (Beschreibung der Enzymkinetik, grundlegende enzymatische Mechanismen, Cofaktoren, Regulation und Inhibition von Enzymaktivität)
- Lipide und Membranen (Mizellen und Vesikel, Aufbau und Eigenschaften biologischer Membranen)
- Oligosaccharide (Zucker, glykosidische Bindung, Nomenklatur von Oligosacchariden, Glykosylierung, Zell-Zell-Erkennung)
- Grundlegende Stoffwechselwege [z.B. Glykolyse (aerob, anaerob), Citratzyklus, Atmungskette, β -Oxidation von Fettsäuren, Gluconeogenese, Aminosäurebiosynthese; Photosynthese; Gemeinsamkeiten biochemischer Reaktionsfolgen, Regulation von Stoffwechselwegen]

- Analytik: Gelelektrophorese (Proteine, DNA), isoelektrische Fokussierung, HPLC, Schmelzpunkte von DNA und Membranen, DNA-Sequenzierung, Grundlagen der Proteinstrukturaufklärung

Praktikum:

- Transformation und Selektion von Bakterien, Proteinexpression und Proteinanalyse durch SDS-PAGE, Proteinbestimmung, PCR und Gelelektrophorese, Enzymkinetik

3.8 Umweltchemie

Konzept:

Die Studierenden sollen Kenntnisse erwerben und Methoden erlernen, chemische Prozesse in der Umwelt zu verstehen. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf der Analyse und Bewertung des Verhaltens von Schadstoffen in Boden, Pflanzen, Wasser, Sediment und Luft und in Grundzügen deren ökotoxische Effekte auf Organismen, Populationen und Ökosysteme. Studiengang- bzw. ortsbezogen kann ein Schwerpunkt auf eines der drei Kompartimente Hydro-, Pedo- oder Atmosphäre gelegt werden. Ziel ist es, dass die Studierenden Einblicke in die vielfältigen biotischen und abiotischen Wechselwirkungen der Schadstoffe mit Umweltkompartimenten erhalten. Der Übungsteil dient der Vertiefung und praktischen Einübung der Methoden, Schadstoffe zu analysieren und deren Verteilungs- und Umwandlungsprozesse in der Umwelt zu verstehen.

Inhalte:

- Eigenschaften, Funktion und Prozesse von Umweltmatrices (Boden, Pflanze, Wasser, Luft), Nachweis von organischen und anorganischen Spurenstoffen (Extraktionsmethoden, Probenaufreinigung, Fraktionierung, spektroskopische, spektrometrische und chromatographische Methoden, effektdirigierte Analytik umwelt- und gesundheitsrelevanter Stoffe)
- Abiotische und biotische stoffliche Umwandlungsprozesse in Umweltkompartimenten. Verteilung und Transport von Umweltschadstoffen in Umweltkompartimenten. Quantifizierung von Verteilungsprozessen in Ökosystemen. Langzeitverhalten von Schadstoffen unter Berücksichtigung von Geo- und Bioakkumulation
- Grundlagen Ökotoxikologie: Bioverfügbarkeit, Effektendpunkte, Ermittlung von Dosis-Wirkungsbeziehungen und Effektschwellen, Zusammenwirken multipler Stressoren

Praktikum:

- Analytik von Schadstoffen in Boden, Wasser, Sediment: Extraktion, Fraktionierung, physikochemische Nachweismethoden und effektdirigierte Analytik umwelt- und gesundheitsrelevanter Stoffe
- Verteilung und Abbau von Schadstoffen in Boden, Wasser, Sediment

3.9 Betriebswirtschaftslehre (BWL)

Konzept:

Elementare Grundlagen der Betriebswirtschaftslehre (BWL) sollten bereits im Bachelorstudium den Studierenden der Chemie z.B. im Rahmen einer Vorlesung vermittelt werden. Zur beruflichen Vorbereitung sind die Konzepte eines Betriebs essenziell – ob im Labor, in Leitungspositionen, Schnittstellenpositionen oder anderen. Deshalb sollten sich Studierende der Chemie mit den Grundlagen des Betriebsrechnungswesens, organisatorischen Abläufen und Management u.a. in Bezug auf Innovation, Wirtschaftlichkeitsrechnung usw. auseinandersetzen.

Inhalte:

Für eine Grundlagenvorlesung für Chemiestudierende im Bachelorstudium wird empfohlen:

- Grundlagen der/ Einführung in die Betriebswirtschaftslehre

Folgende Lehrblöcke könnten ebenfalls optional bereits im Bachelorstudium angeboten werden:

- Innovations-/ Technologiemanagement (u.a. auch Projektmanagement)
- Grundlagen der Kostenrechnung (u.a. Internes/ Externes/ Controlling)
- IP-Recht (u.a. Patente, Warenzeichen, Marken, Erfinderrecht)
- Grundlagen des Marketings (falls möglich: Fokus auf Marketing technischer Produkte)
- Produkt-/ Prozessmanagement

Die vorgeschlagenen Inhalte sind zwar Empfehlungen, doch obliegt die konkrete inhaltliche und konzeptionelle Ausgestaltung dieser Lehrveranstaltungen den jeweiligen wirtschaftswissenschaftlichen Fakultäten.

In diesem Zusammenhang wird empfohlen, den Studierenden die Möglichkeit zu bieten, an Vorlesungen der Betriebswirtschaftlichen Fakultäten teilzunehmen.

An vielen Universitäten Deutschlands wird zudem bereits das Studienfach Wirtschaftschemeie als Schnittstelle zwischen Chemie und Wirtschaft angeboten. Dieses basiert auf einem nahezu 50/50-Studium der Grundlagen der Chemie und vertiefter Inhalte der BWL/VWL.

Anhang 1

| Mitglieder der GDCh-Studienkommission | |
|---------------------------------------|---|
| Vorsitzender | Institution / Fachgebiet(e) |
| Prof. Dr. Peter R. Schreiner | GDCh-Präsident; Justus-Liebig-Universität Gießen; Institut für Organische Chemie |
| Mitglieder | |
| Prof. Dr. Barbara Albert | Technische Universität Darmstadt; Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie |
| Prof. Dr. Manuel Alcarazo | Georg-August-Universität Göttingen; Institut für Organische und Biomolekulare Chemie |
| Prof. Dr. Christoph Arenz | Humboldt-Universität zu Berlin; Institut für Chemie; Organische und Bioorganische Chemie |
| Prof. Dr. Reinhard Brückner | Albert-Ludwigs-Universität Freiburg; Institut für Organische Chemie |
| Prof. Dr. Dirk Burdinski | Technische Hochschule Köln; Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften; Materials Science; Anorganische Chemie |
| Prof. Dr. Lena Daumann | Ludwig-Maximilians-Universität München; Department Chemie; Bioanorganische Chemie |
| Prof. Dr. Richard Göttlich | Justus-Liebig-Universität Gießen; Institut für Organische Chemie |
| Prof. Dr. Stefan Grimme | Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn; Mulliken Center für Theoretische Chemie; Institut für Physikalische und Theoretische Chemie |
| Prof. Dr. Michael Groteklaes | Hochschule Niederrhein; Fachbereich Chemie; Lackchemie und Anorganische Chemie |
| Prof. Dr. Heiko Hayen | Westfälische Wilhelms-Universität Münster; Institut für Anorganische und Analytische Chemie |
| Prof. Dr. Stefan M. Kast | Technische Universität Dortmund; Fakultät für Chemie und Chemische Biologie; Physikalische Chemie |
| Prof. Dr. Peter Klüfers | Ludwig-Maximilians-Universität München; Department Chemie; Anorganische Chemie; Bioanorganische und Koordinationschemie |

| Mitglieder der GDCh-Studienkommission | |
|---------------------------------------|---|
| Mitglieder | |
| Prof. Dr. Nikolaus Korber | Universität Regensburg; Institut für Anorganische Chemie |
| Dr. Franziska Lissel | Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V.; Institut für Makromolekulare Chemie |
| Dr. Robin Meier | Boehringer Ingelheim Pharma GmbH & Co. KG |
| Prof. Dr. Arno Pfitzner | Universität Regensburg; Institut für Anorganische Chemie |
| Prof. Dr. Johann Plank | Technische Universität München; Anorganisch-Chemisches Institut; Lehrstuhl für Bauchemie |
| Prof. Dr. Julia Rehbein | Universität Regensburg; Institut für Organische Chemie |
| Prof. Dr. Jürgen Schatz | Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg; Organische Chemie I |
| Prof. Dr. Sebastian Schlücker | Universität Duisburg-Essen; Fakultät für Chemie; Physikalische Chemie |
| Prof. Dr. Jan Schwarzbauer | RWTH Aachen; Geologie, Geochemie + Lagerstätten des Erdöls und der Kohle |
| Prof. Dr. Andreas Terfort | Johann Wolfgang Goethe-Universität; Institut für Anorganische und Analytische Chemie |
| Prof. Dr. Patrick Théato | Karlsruher Institut für Technologie; Institut für Technische Chemie und Polymerchemie |
| Katharina Uebele, M.Sc. | GDCh-Vorstandsmitglied; DuPont Sustainable Solutions |
| Tobias Wilcke, M.Sc. | Mitglied des GDCh-Jungchemikerforums; Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf; Institut für Organische und Makromolekulare Chemie |
| GDCh-Geschäftsstelle | |
| Dr. Hans-Georg Weinig | GDCh-Geschäftsstelle |

Außerdem haben zahlreiche Kolleginnen und Kollegen aus den GDCh-Fachgruppen, GDCh-Arbeitsgemeinschaften und verschiedenen Chemie-Fakultäten mit Diskussions- und Textbeiträgen an der Ausarbeitung der Empfehlungen mitgewirkt. Allen sei an dieser Stelle für Ihre engagierte Unterstützung gedankt.

Anhang 2

Literaturverzeichnis

- 1) GDCh: Empfehlung der Studienreformkommission zum Basisstudium Chemie, 1.-6. Semester (180 SWS), 1998
- 2) Einführung von Bachelor- und Masterstudiengängen in der Chemie, eine gemeinsame Empfehlung von GDCh und VCI, 2004
- 3) Empfehlungen der GDCh-Studienkommission zum Bachelorstudium Chemie an Universitäten, März 2015
- 4) Chemiestudiengänge in Deutschland – Statistische Daten 2020, GDCh, Juli 2021
- 5) Tuning Chemistry Subject Area Brochure, European Chemistry Thematic Network ECTN, 2008
- 6) Fachspezifisch ergänzende Hinweise zur Akkreditierung von Bachelor- und Masterstudiengängen der Chemie, ASIIN, 29. März 2019
- 7) „The Hague Ethical Guidelines“, deutsche Version siehe Nachr. Chem. 2016, 64, 180-181 (<https://doi.org/10.1002/nadc.20164047914>)



Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh)
Varrentrappstraße 40-42
60486 Frankfurt am Main
www.gdch.de