Rudolf Holze

LEHRINHALTE IM BACHELOR-STUDIENGANG CHEMIE, PHYSIKALISCHE CHEMIE

Als Ergebnis des vor etlichen Jahren auf politische Bestrebungen hin gestarteten Bologna-Prozesses sind an deutschen Universitäten auch die bisher als Diplomstudiengänge ausgebildeten Studienangebote der Chemie in die Bachelor/Master-Form umgewandelt. Diese Umstellung – die weiterhin umstritten ist und die sich vereinzelt der Wiedereinführung von Diplomstudiengängen gegenüber sieht – ist nach anfänglichem Optimismus hinsichtlich einer einfachen Umetikettierung mit teilweise erheblichen inhaltlichen Veränderungen bedingt durch die „Modularisierung“ und die geforderte Aufnahme weiterer Studieninhalte bei wesentlich stärker reguliertem vor allem zeitlichem Gesamtumfang der Lehrveranstaltungen mit inhaltlichen Änderungen verbunden gewesen.

Unter den intensiv diskutierten Vorteilen der neuen Studienorganisation ist die gesteigerte nationale wie internationale Mobilität ein immer wieder genannter Aspekt. Mobilität wird wesentlich erleichtert – über ihre Vorteile muss an dieser Stelle kein Wort verloren werden – wenn Inhalte und Abschlüsse soweit vergleichbar sind, dass ein Studienortswechsel nach z. B. dem Bachelorabschluss nicht mehr mit einer aufwendigen Einzelfallprüfung und dem Risiko, weitere Lehrveranstaltungen „nachholen“ zu müssen, behaftet ist. Dies setzt Kenntnis der anderenorts behandelten Lehrinhalte voraus. Noch besser ist allerdings, wenn die an verschiedenen Orten behandelten Lehrinhalte in wesentlichen Teilen übereinstimmen. Gewiss ist damit eine lokale Individualisierung nicht ausgeschlossen, aber sie darf eben nicht zu Lasten eines allgemein akzeptierten und in Lehre und Ausbildung vertretenen Grundkanons gehen. Wissenschaftliche Fachgesellschaften wie die DECHEMA haben dies bereits vor langer Zeit erkannt und einen solchen Grundkanon definiert. Die Studienkommission der Deutschen Bunsen-Gesellschaft hat diese Erkenntnis nun auch mit der erarbeiteten und im Konsens nach intensiver Rückkopplung mit den an den Universitäten unsere Gesellschaft vertretenden Vertrauensdozenten beschlossen; Vorstand und ständiger Ausschuss haben das Ergebnis zustimmend zur Kenntnis genommen.

Prof. Dr. Rudolf Holze
Technische Universität Chemnitz, Institut für Chemie
Straße der Nationen 62, D-09111 Chemnitz
Telefon: +49 (0371) 531 21260 / 31509, Fax: +49 (0371) 531 21269
E-Mail : rudolf.holze@chemie.tu-chemnitz.de

Prof. Dr. Rudolf Holze ist Vorsitzender der Studienkommission der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie.

Im folgend abgedruckten Text ist stichwortartig dieser Grundkanon der Physikalischen Chemie, wie er nach Kenntnis der Beteiligten an deutschsprachigen Hochschulen gelehrt wird (Hochschullehrer aus der Schweiz und Österreich haben an der Erarbeitung intensiv mitgewirkt), zusammengetragen. Der Text mag zum Vergleich mit der eigenen Lehre anregen, er könnte Anregungen zu Ergänzungen und Neugewichtungen liefern. Bei allfälligen Überarbeitungen von Lehrveranstaltungen und Inhalten, bei Neuberufungen oder der Neuinstallation von Studiengängen kann er als Leitfaden dienen. Gewiss ist er nicht als kritische Referenz für Akkreditierungsagenturen oder als Vehikel des Vorwurfes gedacht.

BEREICH THERMODYNAMIK

- System, Phase, Gleichgewicht, intensive und extensive Größen
- SI-Basiseinheiten, Größen und Einheiten in der Physikalischen Chemie
- Temperatur, nullter Hauptsatz der TD
- Zustandsfunktionen, totale Differenziale
- Wärmekapazität
- Einführung in die kinetische Gastheorie
- Isotherme, adiabatische, isochore, isobare Prozesse
- Zustandsgleichung idealer Gase und Mischungen
- erster Hauptsatz der Thermodynamik, Arbeit und Wärme
- U und H und deren Ableitung nach T
- Bildungsenthalpien und Heß’scher Satz, Carnot’scher Kreisprozess
- zweiter Hauptsatz, Entropie
- Einführung in die statistische Thermodynamik (Verteilungsfunktion, Boltzmann-Statistik, Fermi-Dirac-Statistik. Zustandssummen; Anwendung auf Teilchengeschwindigkeiten: Maxwell-Boltzmann 3D-Geschwindigkeitsverteilung, Berechnung von Gleichgewichten und thermodynamischen Zustandsfunktionen)
- reale Systeme, Theorem der korrespondierenden Zustände
- Joule-Thomson-Effekt
- Mischphasen, partielle molare Größen, Gibbs-Duhem’sche Gleichung
- Gibbs´sche Fundamentalgleichung, das chemische Potenzial
- dritter Hauptsatz der Thermodynamik, das Nernst-Theorem
- Phasengleichgewichte, Gibbs´sche Phasenregel
- Dampfdruckerniedrigung, kolligative Eigenschaften, osmotischer Druck, Siedepunktserhöhung,
- Gefrierpunktserniedrigung, Einfluss von Fremdgasen

- Aktivitätskoeffizienten, Phasendiagramme
- das chemische Gleichgewicht, Gleichgewichtskonstanten
- Grenzflächengleichgewichte, Grenzflächenspannung, Adsorption, Benetzung

BEREICH ELEKTROCHEMIE

- Phasengrenzen und geladene Teilchen
- Aufbau einer elektrochemischen Zelle
- Faraday-Gesetze
- Elektrolyte: starke und schwache Elektrolyte, Festelektrolyte, ionische Flüssigkeiten, Debye-Hückel-
- Theorie, Ladungstransport, Grenzleitfähigkeit
- Elektrochemische Zellen im Gleichgewicht, Nernst-Gleichung
- Elektrochemische Doppelschicht, Stabilität kolloidaler Dispersionen
- Elektrodenkinetik: Durchtrittsreaktionen und Diffusion
- Experimentelle Methoden: 3-Elektroden-Aufbau, potentiostatische und galvanostatische Verfahren,
- Cyclovoltammetrie
- Korrosion
- Grundlagen der elektrochemischen Energiespeicherung und -wandlung
- Elektrochemische Produktionsverfahren

BEREICH ATOM UND MOLEKÜL-SPEKTROSKOPIE

- Verschiedene Spektralbereiche und Arten der Anregungen
- Materie im magnetischen (Zeeman-Effekt) und im elektrischen Feld (Stark-Effekt), Begriff der Polarisation (verschiedene Arten der Polarisation, Zusammenhang Brechungsindex und Suszeptibilität)
- Auswahlregeln und Übergangsdipolmoment
- Elektronische Spektroskopie (Lambert-Beersches Gesetz, Franck-Condon-Integrale, Franck-Condon-Prinzip, Fluoreszenz und Phosphoreszenz, Grundlagen des Lasers)
- Schwingungsspektroskopie (IR und Raman, Absorption vs. Streuung, Normalmodenkonzept, Ausschlussprinzip)
- Rotationsspektroskopie und Schwingungs-Rotations-Kopplung
- Magnetische Resonanzspektroskopie: NMR-Spektroskopie und ESR-Spektroskopie
- Röntgen-, Auger- und Photoelektronen-Spektroskopie
- Massenspektrometrie
- Strukturaufklärung mittels Röntgen und Neutronenbeugung

BEREICH KINETIK

- Elementarreaktionen vs. Bruttogleichung, Molekularität vs. Reaktionsordnung, Reaktionsgeschwindigkeit,
- Formale Kinetik: Differentielle und integrierte Geschwindigkeitsgesetze für 0./1./2. und pseudo-Ordnung, graphische Auswertungen/Auftragungen
- Halbwertszeit und Geschwindigkeitskonstante für 0./1./2. Ordnung
- Folgereaktionen und Quasistationarität, Parallelreaktionen, Kettenreaktion
- Temperaturabhängigkeit chemischer Reaktionen (Arrhenius)
- Theoretische Kinetik: Ansatz und Ergebnis der Stoßtheorie (Stoßzahlen und mittlere freie Weglänge,
- Stoßquerschnitte), Theorie des Übergangszustandes (Eyring)
- Unimolekulare Reaktionen – Lindemann und Hinshelwood
- Kinetische Isotopeneffekte, kinetischer Salzeffekt bei Ionenreaktionen
- Katalyse – homogen vs. heterogen (Enzymkatalyse – Michaelis Menten)
- Transportphänomene und allg. Transportgleichung (Viskosität, Wärmeleitung. Diffusion, Fick'sche Gesetze, diffusionskontrollierte Reaktionen)

BEREICH THEORETISCHE CHEMIE

- Bedeutung und Anwendung der Quantenmechanik in der Chemie:
- Versagen der klassischen Physik (z. B. Doppelspaltexperiment und seine Interpretation), Einführung in die Quantentheorie: Plancksches Strahlungsgesetz, Aufbau der Atome aus Atomkern und Elektronenhülle, Wellennatur des Elektrons, Eigenschaften des Lichts, Welle-Teilchen-Dualismus, Spektrallinien der Atome, Bohr'sches Atommodell
- Modelle der klassischen Mechanik und ihre Grenzen; Hamilton-Funktion, Bewegungsgleichungen; Schrödinger-Gleichung
- Postulate der Quantenmechanik, Erwartungswerte, Operatoren und Observablen, Heisenbergsche Unschärferelation, Hamilton-Operator
- exakte analytische Lösungen der Schrödinger-Gleichung für einfache Systeme (Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom, etc.)
- Drehimpulsoperatoren und ihre Eigenschaften (Eigenwerte und Eigenfunktionen)
- Mehrelektronensysteme, Pauli-Prinzip/Antisymmetrie, Elektronenkorrelation, Hund'sche Regeln und Aufbauprinzip
- Born-Oppenheimer-Näherung
- Näherungsmethoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung: Variationsprinzip, Störungstheorie
- Produktwellenfunktion; Slater-Determinante
- Hartree-Theorie: erste Einblicke in die Hartree-Fock-Theorie sowie in auftretende Energiebeiträge; Orbitale, Orbitalenergien
- Einführung in die Dichtefunktional-Theorie (DFT), quantenchemische Berechnung molekularer Eigenschaften
- Zwischenmolekulare Kräfte: Coulomb-, Dipol-Dipol-Wechselwirkung, Wasserstoffbrücken, van der Waals-Wechselwirkung
- Einführung in die Molekulardynamik
- Einführung in die Gruppentheorie: Anwendungen auf Moleküle, Schwingungen und Kristalle