

Thermodynamik für Studierende der Chemie und Chemischen Biologie an der TU Dortmund

Inhalt

- B.Sc.-Studium Chemie/Chemische Biologie
- Ausbildungsstruktur Physikalische Chemie
- Schwerpunkte der Thermodynamik
- Erfolgsfördernde Maßnahmen
- Perspektiven



Bild: Alamy

Bachelor-Studiengang Chemie (1.-3. Semester)

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 1. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
1.1	M-AC-1	Allgemeine und Anorganische Chemie 1	4	2				8
1.2	M-AC-1	Analytische Chemie 1	1	1				2
→	1.3	M-M-1	3	1				5
	1.4	M-AC-2			1	10		9
	1.5	M-TO	2					2
→	1.6	M-P-1	2	1				4
Summe			12	5	1	10	28	30

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 2. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
	2.1	M-OC-1	3	1				5
	2.2	M-AC-3V	2					3
	2.3	M-AC-3V	1	1				2
	2.4	M-AC-3P			2	7		9
→	2.5	M-P-2	2	1				4
→	2.6	M-M-2	3	1				5
→	2.7	M-PC-1	2	1				4
Summe			13	5	2	7	27	32

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 3. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
	3.1	M-OC-2V	3	1				5
	3.2	M-OC-2P			2	10		11
→	3.3	M-PC-1	3	1				5
→	3.4	M-PC-1P			1	5		6
→	3.5	M-P-3				3		3
Summe			6	2	3	18	29	30

Bachelor-Studiengang Chemische Biologie (1.-3. Semester)

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 1. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
1.1	MAC1B	Allgemeine und Anorganische Chemie 1	4	2				8
1.2	MAC1B	Analytische Chemie 1	1	1				2
1.3	MAC2B	Allgemeine und Anorganische Chemie Praktikum 1			1	6		6
1.4	MM1	Mathematik für Chemiestudierende 1	3	1				5
1.5	MP1	Physik für Chemiestudierende 1	2	1				4
1.6	MTO	Toxikologie und Rechtskunde	2					2
Summe			12	5	1	6	24	27

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 2. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
2.1	MOC1	Organische Chemie 1	3	1				5
2.2	MAC3V	Anorganische Chemie 2	2					3
2.3	MAC3V	Analytische Chemie 2	1	1				2
2.4	MAC3PB	Allgemeine und Anorganische Chemie Praktikum 2			2	4		6
2.5	MM2	Mathematik für Chemiestudierende 2	3	1				5
2.6	MP2	Physik für Chemiestudierende 2	2	1				4
2.7	MPC1	Physikalische Chemie 1	2	1				4
2.8	MBIO1	Mikrobiologie 1	2					3
Summe			15	5	2	4	26	32

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 3. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
3.1	MOC2V	Organische Chemie 2	3	1				5
3.2	MOC2P	Organisch-Chemisches Praktikum			2	10		11
3.3	MPC1	Physikalische Chemie 2	3	1				5
3.4	MBC1	Biochemie und Molekularbiologie	2	1				4
3.5	MBC2	Biochemie Praktikum 1			2	5		6
Summe			8	3	4	15	30	31

Bachelor-Studiengang Chemie (4.-6. Semester)

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 4. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
→	4.1	M-PC-2V	Physikalische Chemie 3	3	1			5
→	4.2	M-PC-2P	Physikalisch-Chemisches Praktikum 2			7		7
	4.3	M-AO-1	Methoden der Strukturaufklärung im Festkörper und in Lösung	2	2			4
	4.4	M-AO-2	Praktikum Synthesen und Methoden (AC/OC)		1	1	8	8
	4.5	M-TC	Einführung in die Technische Chemie	3	1			5
Summe			8	6	1	15	30	29

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 5. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
→	5.1	M-PC-3	Physikalische Chemie 4	2	1			4
	5.2	M-WV-1	Wahlpflichtvorlesung 1**	2	1			4
	5.3	M-BC-1C	Bioorganische Chemie	3	1			5
	5.4	M-VP-1	Vertiefungspraktikum 1*			1	7	7
	5.5	M-AC-4	Konzepte der Anorganischen Chemie	2	1			4
	5.6	M-OC-3	Organische Chemie 3	2	1			4
	5.7	M-TC	Praktikum Technische Chemie				1	1
	5.8	M-WV-F	Wahlpflichtvorlesung mit Forschungsvorträgen**	(2)	(1)			(8)
Summe			11	5	1	8	25	29

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 6. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
	6.1	M-WV-2	Wahlpflichtvorlesung 2**	2	1			4
	6.2	M-VP-2	Vertiefungspraktikum 2*			1	7	7
	6.3	M-VB	Vertiefung auf dem Gebiet der Bachelorarbeit				6	4
	6.4		Bachelorarbeit (10 Wochen)					12
	6.5		Bachelorarbeit Disputation					3
Summe			2	1	1	13	17	30

Bachelor-Studiengang Chemische Biologie (4.-6. Semester)

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 4. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
4.1	MPC2B	Physikalische Chemie 3	3	1				5
4.2	MPC2B	Physikalisch-Chemisches Praktikum			1	6		7
4.3	MBC2	Biochemie Praktikum 2			1	5		5
4.4	MAO1	Methoden der Strukturaufklärung im Festkörper (AC) u. in Lösung (OC)	2	2				4
4.5	MBC3	Biochemie Stoffwechsel	2	1				4
4.6	MBIO1	Mikrobiologie 2	1					2
4.7	MBIO1	Mikrobiologie Praktikum		1		4		4
Summe			8	5	2	15	30	31

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 5. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
5.1	MBIO2	Molekulare Zellbiologie	2	1				4
5.2	MBIO2	Zellbiologisches Praktikum			1	4		4
5.3	MWV1	Wahlpflichtvorlesung 1*	2	1				4
5.4	MBIO3	Bioorganische Chemie	3	1				5
5.5	MBIO3	Integriertes Bioorganisches Praktikum				10		7
5.6	MOC3	Organische Chemie 3	2	1				4
5.7	MBIO4	Biophysikalische Methoden	2	1				4
Summe			11	5	1	14	31	32

Pos.	Modul	Lehrveranstaltungen 6. Semester	V	Ü	S	P	SWS	Cr.
6.1	MBIO5	Bioanorganische Chemie	2	1				4
6.2	MWV2	Wahlpflichtvorlesung 2*	2	1				4
6.4	MVB	Vertiefung auf dem Gebiet der Bachelorarbeit				6		4
6.5		Bachelorarbeit (10 Wochen)						12
6.6		Bachelorarbeit Disputation						3
Summe			4	2	0	6	12	27

Ausbildungsstruktur Physikalische Chemie

Lehrkörper (nach Dienstalter)

- **Prof. Dr. Roland Winter** (Biophysikalische Chemie)
- apl. Prof. Dr. **Claus Czeslik** (Praktikum)
- **Prof. Dr. Stefan M. Kast** (Theoretische Phys. Chemie)
- JProf. Dr. **Müge Kasanmascheff** (EPR-Spektroskopie)
- **Prof. Dr. Rasmus Linser** (Biomolekulare NMR-Spektr.)



Bilder: Secci/Sondermann

Vorlesungsinhalte (S. Kast)

- **Physikalische Chemie 1 (C, CB, V2/Ü1, auch B.Sc. LaG)**
 1. *Mathematische Grundlagen*
 2. *Ideale und reale Gase, Kinetische Gastheorie*
 3. *Chemische Kinetik*
- **Physikalische Chemie 2 (C, CB, V3/Ü1, auch M.Sc. LaG/optional)**
 4. *Thermodynamik und Elektrochemie*
 5. *Transportphänomene*
- **Physikalische Chemie 3 (C, CB, V3/Ü1, auch M.Sc. LaG/optional)**
 6. *Quantenmechanik und Spektroskopie*
- **Physikalische Chemie 4 (C, CB/optional, V2/Ü1)**
 6. *Quantenmechanik und Spektroskopie (Forts.)*
 7. *Statistische Thermodynamik*

Vorlesungsinhalte (S. Kast)

- **Physikalische Chemie 2 (C, CB, V3/Ü1, auch M.Sc. LaG/optional)**

- 4. Thermodynamik und Elektrochemie**

- 4.1 Grundbegriffe** (*System, Umgebung, Wärme, Arbeit*)

- 4.2 Der 1. Hauptsatz**

- (Innere Energie, Enthalpie, totale Differentiale, Wärmekapazität, Gasprozesse)*

- 4.3 Thermochemie** (*Kalorimetrie, Hess'scher Satz*)

- 4.4 Der 2. Hauptsatz**

- (Entropie, Wärmekraftmaschinen, Gasprozesse, 3. Hauptsatz, Gibbs-/Helmholtz-Energie, Fundamentalgleichungen, chemisches Potential)*

- 4.5 Phasengleichgewichte**

- (Phasenregel, Phasendiagramme, Phasenübergänge, Mischphasen, Raoult/Henry, Fugazität/Aktivität, Standardzustände, Elektrolytlösungen, kolligative Eigenschaften)*

- 4.6 Chemisches Gleichgewicht**

- (thermodynamische Herleitung, Massenwirkungsgesetz, spezielle Gleichgewichtskonstanten, p -/ T -Abhängigkeit)*

- 4.7 Elektrochemie**

- (Zelltypen, elektrochem. Potential, Nernst-Gleichung, Zellschemata/Konventionen, EMK)*

Vorlesungsinhalte (S. Kast)

- **Physikalische Chemie 4 (C, CB/optional, V2/Ü1)**

- 7. Statistische Thermodynamik*

- 7.1 Mathematische und statistische Grundlagen**

- (Stochastik, Verteilungen, Wiederholung Thermodynamik, Mikro-/Makrozustände, Gibbs-Postulat)*

- 7.2 Das kanonische Ensemble**

- (Herleitung der Verteilung, Zustandssumme, thermodynamische Größen)*

- 7.3 Ideale Systeme im kanonischen Ensemble**

- (Zustandsgleichung id. Gas, Gibbs-Paradoxon/Entropie, Perspektive der Quantenstatistik)*

- 7.4 Intramolekulare Beiträge zur Zustandssumme**

- (Produktansatz, Kern/Elektronen, Vibration, Rotation, Gleichverteilung, Wärmekapazität, Entropie)*

- 7.5 Chemisches Gleichgewicht**

- (Herleitung Gleichgewichtskonstante, Dimerisierung, Bezug Spektroskopie, Isotopeneffekt)*

Vorlesungsinhalte (S. Kast)

▪ Master WPF "Biomolekulare Modellierung" (V2/Ü1)

Statistisch-thermodynamische Grundlagen

Statistik und Thermodynamik, Ensembles

Berechnung von Zustandssummen und Anwendungen

Klassische Mechanik und Dynamik von Molekülen

Koordinatensysteme

Mechanische Bewegungsgleichungen

Phasenraum und Statistische Mechanik

Monte-Carlo-(MC-)Simulation im kanonischen Ensemble

Diskretisierung der Bewegung, klassische Moleküldynamik-(MD-)Simulation

Potentialfunktionen/„Kraftfelder“

Potentialflächen: Geometrieoptimierung, Vibrationsanalyse, Übergangszustände

Besondere Simulationstechniken

Observablen aus Simulationen

Thermodynamische, strukturelle und dynamische Größen

Freie-Energie-Simulationen

Anwendungsbeispiele

Methodik

- Weitestgehend Tafelanschrieb, Powerpoint/Web-Unterstützung
- Literaturempfehlung (dt.): Atkins (*nicht* Kurzlehrbuch!), Wedler
- *Moodle*-Kurs mit weiterführendem Material, Übungen, Musterlösungen
- Kleingruppenübungen (PC 1/PC 2), Bonustests (PC 3/PC 4)
- Gedrucktes Skript nach Semesterende
- Klausurvorbereitung: Lernzielkatalog, Probeklausur, Sondertermin
- **Früher Bezug zur Statistik, [Simulationsspiele](#), [Computerprogramme](#)**
(Thermodynamik ist die Basis für **maschinelles Lernen!**)

- Jeder Teilnehmer beginnt mit 5 Cent.
- Jeder Teilnehmer sucht sich einen zufälligen Partner.
- Wenn beide kein Geld mehr besitzen, suchen sie einen neuen Partner.
- Wenn mindestens ein Partner Geld besitzt, wählen sie den Empfänger jeweils eines Cents als Gewinner von Schnick-Schnack-Schnuck (ohne Brunnen). Wenn der Verlierer nichts besitzt, suchen sich beide neue Partner.
- Auswertung nach verschiedenen Zeiten.

Metriken und Indikatoren

- Evaluationsergebnisse der Grundvorlesung sind nur bedingt sinnvoll
- und für Übungsgruppenleiter oft demotivierend
- Kleingruppenübungen bewirken weder nachhaltigeren Besuch noch mehr interaktive Mitarbeit der Studierenden (Praktikumsbelastung)
- Bonustests fördern nur die ohnehin Interessierten, Bestehensquoten werden *nicht* verbessert

Ausblick

- Besonders phänomenologische Thermodynamik erfordert intensive Motivation der Studierenden anhand von Alltagsbeispielen
- Sinnvollerer Beginn mit Quantenmechanik / Statistik?
- Engere Verzahnung mit Anorganischer und Allgemeiner Chemie?
- Statistik (nicht nur Wahrscheinlichkeitsrechnung) und *Datenwissenschaften* in der Mathematik-Ausbildung stärken!

Metriken und Indikatoren

- Evaluationsergebnisse der Grundvorlesung sind niedrig
- und für Übungsgruppenleiter oft demotivierend
- Kleingruppenübungen bewirken weder nachhaltige noch
- interaktive Mitarbeit der Studierenden (Praktikurnote)
- Bonustests fördern nur die ohnehin Interessierten und verbessern *nicht* die

Ausblick

- Besonders phänomenologische Thermodynamik der Studierenden anhand von Alltagsbeispielen
- Sinnvollere Einbettung in die Ausbildung
- Sinnvollere Einbettung in die Ausbildung
- Engere Verzahnung mit Anorganischer und Allgemeiner Chemie
- Statistik (nicht nur Wahrscheinlichkeitsrechnung) der Mathematik-Ausbildung stärken!

