

Themenliste zur Eignungsprüfung (Master Chemie)

Bereich: Anorganische Chemie

Allgemeine und Anorganische Chemie

- Gemische, Stöchiometrie, Energieumsatz
- Kenntnis des PSE, Atombau, Orbitale, Elektronenkonfigurationen
- Lewisformeln, VSEPR
- Metalle und Legierungen
- Gase, Flüssigkeiten, Phasendiagramme
- Chemisches Gleichgewicht, Fällungsreaktionen, L und K_L , Auflösungsprozesse
- Entropie, Freie Enthalpie, Hauptsätze der Thermodynamik, Elektrolytlösungen, kolligative Eigenschaften
- Säure-Base-Konzepte, Nomenklatur
- Säure-Base-Gleichgewichte, Titrationsen, Indikatoren, Puffer
- Redox-Reaktionen, Bestimmung von Oxidationszahlen
- Spannungsreihe, Nernst-Gleichung, Redoxaktivitäten
- Stoffklassen:
Wasserstoff und Edelgase,
Halogene und Chalkogene,
Stickstoffgruppe, P-Gruppe,
Kohlenstoffgruppe,
Borgruppe,
Alkali- und Erdalkalimetalle,
Nebengruppenelemente.

Konzepte der Anorganischen Chemie

- Erweiterte Säure-Base Konzepte: Lewis, Supersäuren, Hammett
- Chemische Bindungskonzepte:
- Molekülorbitale, Mehrfachbindungen, Übergang zur ionischen Bindung, Metalle und metallische Bindung
- Clusterverbindungen, Polyborane

Koordinationschemie

- Aufbau und grundlegende Eigenschaften von Koordinationsverbindungen
- Farbigkeit von Komplexen
- Stabilität von Komplexverbindungen

Bereich: Organische Chemie

Organische Chemie

- Alkane
- Halogenalkane
- Absolute Stereochemie (Konfiguration)
- Nucleophile Substitution: SN1- und SN2-Reaktionen
- Cycloalkane
- Alkene
- Alkine
- Aromatische Kohlenwasserstoffe
- Elektrophile aromatische Substitution SEAr
- Alkohole und Phenole
- Phenole
- Ether
- Organische Schwefelverbindungen
- Amine
- Aldehyde und Ketone
- Stereochemie Teil 1: Symmetrie und Chiralität
- Kohlenhydrate Teil 1
- Nucleoside, Nucleotide
- Carbonsäuren und Derivate
- Polymere: Polykondensate
- Ketocarbonsäuren
- Halogencarbonsäuren
- Kohlensäurechemie
- Aminosäuren und Peptide

Lehrbuch: K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore, "Organische Chemie", 5. Auflage, 2012.

Organische Synthese: Grundlagen und Konzepte

- Nucleophile Substitution am gesättigten Kohlenstoffatom
- Eliminierungen
- Elektrophile Addition an Alkene
- Nucleophile Addition an der Carbonylgruppe, Nucleophile Substitution an der Carbonylgruppe
- Alkylierung von Enolaten
- Reaktionen von Enolaten mit Carbonylverbindungen: Aldol- und Claisen-Reaktionen
- Pericyclische Reaktionen
- Nachbargruppenbeteiligung, Umlagerung und Fragmentierung
- Schwefel, Silicium und Phosphor in der organischen Chemie
- Chemoselektivität, Reduktions- und Oxidationsreaktionen

Lehrbuch: J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, "Organische Chemie", 2. Auflage, 2013.

Reaktivitäten und Anwendungen in der organischen Synthese

- Radikal-Stabilität
- Bildung von Radikalen in synthetisch wichtigen Reaktionen
- Radikalische Halogenierung von Kohlenwasserstoffen
- Autoxidation
- Radikal-vermittelte Defunktionalisierung
- Radikalische Addition an Mehrfachbindungen
- Elektrophile aromatische Substitution
- Nucleophile aromatische Substitution
- Dehydroaromaten
- Heteroaromaten
- Metall-vermittelte Funktionalisierung von Aromaten
- Übergangsmetall-vermittelte Synthesemethoden (Pd, Cu)
- Olefin-Metathese
- Huisgen-Click-Reaktion
- Oxidative Kupplung von Alkinen
- Schutzgruppenchemie
- Peptid-Synthese in Lösung und an fester Phase
- Synthese komplexer Verbindungen (bioaktive Wirkstoffe, Naturstoffe und deren Modifikationen)

Bereich Physikalische Chemie

Thermodynamik

- Der thermodynamische Zustand (Zustandsgrößen, Zustandsgleichungen, Ideales Gas, Kinetische Gastheorie, van-der-Waals-Gesetz, Flüssigkeiten und Festkörper, Thermodynamische Systeme)
- Der Erste Hauptsatz (Arbeit, Wärme, Innere Energie, Enthalpie, Adiabaten eines idealen Gases)
- Thermochemie (Kalorimetrie, Standardenthalpie, Satz von Hess, Kirchhoffsches Gesetz)
- Der Zweite Hauptsatz (Carnotscher Kreisprozess, Entropie, Dritter Hauptsatz, Freie Energie, Freie Enthalpie, Fundamentalgleichungen)
- Mischungen (Chemisches Potential, Mischungen idealer Gase, ideale und reale feste und flüssige Mischungen)
- Phasengleichgewichte (Einkomponentensysteme, Mehrkomponentensysteme, Clausius-Clapeyron-Gleichung, Raoult'sches Gesetz, fraktionierte Destillation, Mischungslücken, Eutektika)
- Das chemische Gleichgewicht (Gleichgewichtskonstante, Gleichgewicht bei Reaktionen idealer und realer Gase, Reaktionen in kondensierten Phasen, Van't Hoff'sche Gleichung, Le Chatelier-Prinzip)

Elektrochemie

- Galvanispannung (elektrochemisches Potential, Metall-Metallionen-Elektroden, Redoxelektroden, Gaselektroden)
- Nernstspannung (elektrochemische Zellen, Standardpotential, Nernst'sche Gleichung, Batterien, Brennstoffzellen)

Kinetik

- Geschwindigkeitsgesetze (Reaktionsordnungen, Geschwindigkeitskonstante, Arrhenius-Gesetz)
- Mechanismen und Geschwindigkeitsgesetze (unimolekulare und bimolekulare Reaktionen, Folgereaktionen, Bodensteinsches Stationaritätsprinzip, vorgelagerte Gleichgewichte)

Lehrbuch: Peter W. Atkins, Julio de Paula, "Physikalische Chemie"

Theoretische Chemie

- **Einführung in die Quantenmechanik**

Modelle der klassischen Mechanik, Grenzen der klassischen Mechanik, Die Schrödinger-Gleichung

- **Exakt lösbare Modellsysteme**

Freies Teilchen und Teilchen im Kasten, Der harmonische Oszillator, Grundlagen der Infrarot-Spektroskopie

- **Drehimpuls in der Quantenmechanik**

Drehimpulsoperatoren, Eigenfunktionen des Drehimpulses, Starrer Rotator und Rotationsspektroskopie

- **Das Wasserstoffatom**

Variablenseparation in Radial- und Winkelabhängigen Teil, Radialfunktionen des Wasserstoffatoms, Orbitale als Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms, Serien des Wasserstoffatoms, Bahndrehimpuls im externen Feld (Zeeman Effekt), Elektronenspin und Stern-Gerlach Experiment

- **Mehrelektronensysteme**

Molekularer Hamiltonoperator, Born-Oppenheimer Näherung, Variationsprinzip, Basissatzentwicklung und Matrixeigenwertgleichung

- **Zeitunabhängige Störungstheorie**

Störparameter und Reihenentwicklung, Intermediäre Normierung, Störungsenergie 1. und 2. Ordnung, Wellenfunktion in Störungstheorie, Wigner'sche Regel, Genauigkeit Störungstheorie

- **Elektronische Struktur von Atomen und Molekülen**

Hartree-Produkt, Spinorbitale und Antisymmetrie, Pauli-Prinzip und Slaterdeterminante, Slater-Condon Regeln, Hartree-Fock Theorie, Coulomb- und Austausch-Operatoren, SCF-Verfahren. Koopmans Theorem, Roothaan-Hall-Gleichungen, Elektronenkorrelation

Lehrbücher:

- *Einführung in die Theoretische Chemie*; Werner Kutzelnigg,
- *Modern Quantum Chemistry*; A. Szabo, N. S. Ostlund,
- *Molecular Quantum Mechanics*; P. W. Atkins, R. S. Friedman