

Hinweise zum Erstellen von Bachelorarbeiten, Praktikumsprotokollen, Master- und Doktorarbeiten

M.U. Schmidt, Hinweise_Bachelorarbeit.doc

Bitte achten Sie auf folgende Punkte:

1. Rechtschreibung und Zeichensetzung

2. Stil

- Flüssig, gut lesbar
- Klar und präzise formulieren!
- Nicht ausschweifend
- Der rote Faden muss immer nachvollziehbar sein.
- Bandwurmsätze, wie z.B. „Derjenige, der denjenigen, der den Wegweiser, der an der Brücke, über die die Straße, die nach Klein Posemuckel führt, geht, steht, beschädigt hat, fängt, erhält eine Prämie von 50 Mark“, sind, ebenso wie Sätze, die mit Worten wie „Die an dem“ anfangen, wie beispielsweise „Die an dem von dem vor dem Bahnhof befindlichen Platz abgehenden Weg stehenden Bäume werden gefällt werden“, zu vermeiden.
- Kein Laborjargon (Wörter wie "refluxieren", "abnutschen", "wegkippen" sind zu vermeiden)

3. Keine falschen oder unklaren Bezüge

Gegenbeispiele:

- *"Das Reaktionsprodukt des Gemisches aus Silizium und Cl₂, das durch Pyrolyse hergestellt wurde..."* [Was wurde denn nun durch Pyrolyse hergestellt: Das Reaktionsprodukt, das Gemisch, das Si oder das Cl₂?]
- *"Der Kolben wurde im Abzug des Assistenten mit einem Heizpilz erhitzt. Er färbte sich dabei intensiv gelb."* [Wer? Der Heizpilz oder der Assistent? Oder der Abzug? Oder der Kolben? Oder sogar nur der Inhalt des Kolbens?]

4. Beachten der Logik-Kette

Wenn ein Gedankengang "A => B => C => D" vorliegt, sollte man ihn auch in der Reihenfolge "A => B => C => D" beschreiben und nicht irgendwie von hinten nach vorne oder durcheinander.

Gegenbeispiel:

"Aceton ist preiswert, weil Phenolharze industrielle Bedeutung haben. Also wird Phenol großtechnisch hergestellt. Die Reaktion von Cumol mit Sauerstoff und nachfolgender Hydrolyse nennt man Hock-Verfahren. Dabei entstehen Phenol und Aceton."

[Haben Sie verstanden, warum Aceton preiswert ist? Nein? Warum nicht? Es ist doch alles richtig. Lediglich die Logik-Kette wurde nicht beachtet]

Besser wäre die folgende Formulierung:

"Phenol wird großtechnisch hergestellt, weil es für Phenolharze verwendet wird. Bei der industriellen Synthese von Phenol wird Cumol (Isopropylbenzol) mit Sauerstoff oxidiert und anschließend hydrolysiert (Hock-Verfahren). Dabei entstehen je Kilogramm Phenol etwa 600g Aceton als Zwangsanfall (sog. Koppelprodukt). Dies ist der Grund dafür, dass Aceton so preiswert ist."

5. Genaue Versuchsbeschreibung

Beschreiben Sie die Versuche so präzise wie möglich, damit sie reproduziert werden können und man nachvollziehen kann, warum etwas funktioniert bzw. nicht funktioniert hat!

Die Ausbeute sollte in *mol* und in % der Theorie angegeben werden.

Gegenbeispiele:

- *"Bei der Reaktion entsteht ein braunes Öl, ein weißer Niederschlag und gelbe Kristalle, die an Luft trüb werden. Nach dem Waschen mit Wasser beträgt die Ausbeute 53%...."*
[Welches war denn das Produkt?]

6. Ehrlichkeit

Die größten Erfindungen entstehen durch Zufälle, denen man systematisch nachgeht (z.B. die Entdeckung der Röntgenstrahlen).

Reproduzierbar ist ein Ergebnis nur dann, wenn es ausreichend dokumentiert ist. Daher sollten z.B. alle Abweichungen von der Versuchsvorschrift aufgezeigt werden.

Nobody is perfect. Bei jeder Forschung können Fehler oder Unzulänglichkeiten auftreten.

Sie sollten aber im Praktikumsbericht erklärt werden, z.B.:

- *"Das gewünschte Produkt wurde irrigerweise verworfen, da der Schmelzpunkt nicht stimmte und aus dem NMR-Spektrum nicht erkennbar war, dass es sich um das richtige Produkt handelte."*
- *"Nach drei erfolglosen Versuchen wurde die Reaktion abgebrochen. Später zeigte sich, dass das Lösungsmittel nicht genügend getrocknet war."*
- *Gemessene Ausbeute: 113% der Theorie (weil das Produkt noch CaSO_4 enthielt)*

7. Angabe der Messparameter bei analytischen Daten

Bei der Angabe von analytischen Daten ist es wichtig, die Messparameter mit anzugeben.

Beispiele:

NMR:

- Temperatur
- Lösungsmittel
- Messfrequenz
- Kalibrierung: Was wurde als Referenzsignal verwendet?
z.B. ^1H : $\delta(\text{CHCl}_3) = 7,24 \text{ ppm}$; ^{13}C : $\delta(\text{CDCl}_3) = 77,0 \text{ ppm}$ (Man beachte den Unterschied zwischen CHCl_3 und CDCl_3).

IR:

- Nujol oder KBr-Pressling?

GC, HPLC:

- Säule
- Temperatur
- Lösemittel bzw. Lösemittelgradient
- Detektor (WLD, UV, MS, ...)

DC:

- Platte, Fließmittel und RF-Werte

Röntgenpulverdiagramm:

- Diffraktometer, Strahlung, Präparation in Glaskapillare (Durchmesser?) oder zwischen Folien, Detektor, 2θ -Bereich, Gesamtmesszeit (oder Angabe von 2θ -Stepweite und Messzeit je 2θ -Step)

8. Vollständigkeit der analytischen Daten

Wenn eine Analyse gemacht wurde, sollten die analytischen Daten richtig und vollständig sein.

Also: Wenn man ein $^1\text{H-NMR}$ macht, sollte man auch alle H-Atome finden. Wenn man "Duplett" schreibt, muss man auch die Kopplungskonstante angeben.

Gegenbeispiel:

- "HPLC: $t=2,03\text{min}$ (15%, Produkt), $t=4,22\text{min}$ (12%, Nebenprodukt)" [Und was waren die restlichen 73%?]

9. Signifikanz der Stellen berücksichtigen

Man sollte eine Größe nicht genauer angeben, als sie gemessen worden ist.

Gegenbeispiel:

- IR: $1630,576\text{ cm}^{-1}$ (Ein IR-Spektrum ist selten genauer als 1 cm^{-1})

Die Genauigkeit einer Messgröße erhält man auf folgenden Wegen:

- Nachfragen
- Linienbreite ansehen
- Reproduzierbarkeit

Die Reproduzierbarkeit der Reflexpositionen eines Röntgenpulverdiagrammes, das auf einem STOE-Stadi-P-Diffraktometer gemessen wurde, ist bei guter Justage des Diffraktometers 0.02° .

10. Abschreiben und Zitieren

- Das wörtliche Abschreiben von Text ist verboten (wegen Plagiat, und aus urheberrechtlichen Gründen). Einzige Ausnahme bilden Zitate. Jeder Text, dessen Informationen man übernehmen möchte, muss zuvor umformuliert werden. Dies gilt auch für Texte oder Beschreibungen aus dem Internet.
- Zitate müssen als solche gekennzeichnet werden und mit Literaturangabe versehen werden, z.B. in der Form: "Die Mineralogie (...) ist ein Teil der deskriptiven Chemie" (P. Groth, 1885) ^[3]

11. Abbildungen

- Abbildungen, die man nicht selbst erstellt hat, sondern aus einer anderen Quelle kopiert hat, müssen mit eindeutiger Quellenangabe versehen werden, z.B. in der Form: (aus [1])
- Abbildungen, die man abgezeichnet hat, zitiert man als: (Nach [1]).
- Bei der Reproduktion fremder Abbildungen in Doktorarbeiten und anderen Veröffentlichungen ist die Genehmigung des Herausgebers einzuholen.
- Dies gilt auch für Abbildungen aus dem Internet.

12. Zitieren von Literatur ^[1]

- Bei allen Aussagen und Behauptungen, die weder von Ihnen selbst stammen, noch Lehrbuchwissen sind, ist die Quelle anzugeben.
- In der Chemie ist folgende Form üblich:
Aussage. ^[1-3]
N.B.: In der Kristallographie und in Geisteswissenschaften zitiert man häufig in der Form:
Aussage (Autor & Coautor, 2002)
- Literaturangaben können auch an der Kapitelüberschrift stehen (wie in diesem Kapitel), insbesondere wenn es sich um Übersichtsartikel handelt, die sich auf das ganze (Unter-) Kapitel beziehen.
- Der Verweis auf graue Literatur oder nicht nachvollziehbare Quellen sollte – falls möglich – vermieden werden. Hierzu gehören auch www-Zitate (Wer weiß, wie lange es diese Webseite noch geben wird?), unveröffentlichte Manuskripte und persönliche Mitteilungen. Man sollte diese nur dann zitieren, wenn es keine Veröffentlichungen hierzu gibt.

13. Literaturangaben

Das Format der Literaturangaben ist leider nicht einheitlich, sondern von Journal zu Journal verschieden. (Fragen Sie im Zweifelsfall Ihren Betreuer, wie er/sie es haben möchte). Im allgemeinen ist es vorteilhaft, sich an das Format der "Angewandten Chemie" zu halten, und zusätzlich den Titel zu nennen (damit man weiß worum es geht), also:

[Nr.] Autoren (mit abgekürzten Vornamen), "Titel", *Zeitschrift (kursiv)*, **Jahr(fett)**, *Band (kursiv)*, Anfangs- und Endseite.

Das Heft (innerhalb eines Bandes) braucht nicht angegeben zu werden, es sei denn, es existiert keine durchgehende Seitennummerierung.

Beispiele:

- [1] P. Rakti, B.E. Treuer, C. Hef, "Vergebliche Versuche zur Herstellung eines wohlschmeckenden Getränkes aus vergorenen Äpfeln", *Angew. Chem.* **2003**, *111*, 232-235; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2003**, *34*, 242-245.
- [2] U.N. Sinn: "Über das Verhalten von Schokoladestücken in Bier", *J. Irrep. Res.* **1993**, *24*, 31-33 [Das *Journal of Irreproducible Results* gibt es tatsächlich!].
- [3] P. Groth, *Physikalische Kristallographie*, Verlag Wilhelm Engelmann, Leipzig, **1885**, S. 3.
- [4] K.O. Lege, *persönliche Mitteilung*, **2003**.
- [5] M.U. Schmidt, H.J. Metz (Clariant): "Neue Kristallmodifikation von C.I. Pigment Red 53:2 (gamma-Phase)", *Europäisches Patent EP 965617 A1*, **1999**.
- [6] E.X. Student, "Vereinfachte Herstellung von Nitroglycerin" in *Versuche, die nicht für Schüler geeignet sind* (Hrsg.: H. Spreng, A. Nobel), Verlag Chemie, Weinheim, **2003**, S. 52-73.

Die Angewandte Chemie führt folgende Beispiele auf:

Buchzitate: Bücher ohne Herausgeber: K. P. C. Vollhardt, *Organische Chemie*, 1. Aufl., VCH, Weinheim, **1988**, S. 215;

Bücher mit Herausgeber: T. D. Tullius in *Comprehensive Supramolecular Chemistry, Vol. 5* (Hrsg.: J. L. Atwood, J. E. D. Davies, D. D. MacNicol, F. Vögtle, K. S. Suslick), Pergamon, Oxford, **1996**, S. 317-343.

Sonstige Zitate: C. R. A. Botta (Bayer AG), DE-B 2235093, **1973** [Chem. Abstr. **1974**, *80*, 55356 c]; M. R. Hopmann, Dissertation, Technische Universität Berlin, **1983**; G. Maas, *Methoden Org. Chem. (Houben-Weyl) 4th ed. 1952*, Vol. E 21/1, 1983, S. 379-397; "Synthesis in Biochemistry": R. Robinson, *J. Chem. Soc.* **1936**, 1079; S. Novick, "Biography of Rotational Spectra for Weakly Bound Complexes", zu finden unter <http://www.wesleyan.edu/chem.bios/vdw.html>, **1999**.

Programme: G. M. Sheldrick, SHELXS-96, Program for the Solution of Crystal Structures, University of Göttingen, Göttingen (Germany), 1996.

14. Aufbau der Arbeit:

In einigen Arbeitskreisen gibt es einen Standard-Aufbau für Bachelor-, Master- und Doktorarbeiten. Ansonsten empfiehlt sich folgender prinzipieller Aufbau:

- **Titelblatt** (bei Doktorarbeiten ist der Text vorgeschrieben; bei der Einreichung von Doktorarbeiten bitte das Wort "eingereicht" statt des Wortes "genehmigt" verwenden)
- **Angabe des Zeitraumes der Arbeit** (soweit nicht aus dem Titelblatt ersichtlich): Diese Arbeit wurde im Zeitraum vom ... bis ... im Arbeitskreis von Prof. ... unter Betreuung von ... erstellt.
- **Widmung** (kann bei Praktikumsarbeiten meist entfallen).

Typische Widmung: Meinen Eltern, meiner Freundin und meiner Katze
Zusätzlich kann an dieser Stelle auch ein Spruch, ein Gedicht oder ein Zitat stehen. Auch ein Comic ist erlaubt.

- **Danksagung**
- **Inhaltsverzeichnis**
- **Abkürzungs- und Symbolverzeichnis** (sofern erforderlich)
 - Standardabkürzungen wie "DMF" oder "NMR" brauchen nicht erklärt zu werden, alle anderen, wie z.B. "DMAC", "Cp' " oder "CP-MAS" sollten erklärt werden.
 - Es empfiehlt sich, auch Symbole, die häufiger vorkommen, zu erklären, z.B. d (Netzebenenabstand), θ (Beugungswinkel)Ein Verzeichnis der Abbildungen oder der Tabellen ist nicht erforderlich.
- **Einleitung und Themenstellung:**
 - Einleitung: Worum geht es? In welchem Sinnzusammenhang steht die Arbeit?
 - Themenstellung: Was soll in der Arbeit gemacht werden? (kurz)
- **Grundlagen / Theoretischer Teil**
 - Beschreibung früherer Arbeiten bzw. Stand der Literatur.
 - Beschreibung der verwendeten Methoden (sofern erforderlich) und der theoretischen Grundlagen (sofern erforderlich). Allgemein gilt: Was in Lehrbüchern steht, braucht man hier nicht nochmal zu beschreiben.
- **Hauptteil**
 - Beschreibung der selbst durchgeführten Experimente, Auswertungen und Ergebnisse. Welche Schlussfolgerungen können daraus gezogen werden?
 - Experimentelle Details und Abbildung von Spektren: Nur dann, wenn sie für das Verständnis wichtig sind.
- **Experimenteller Teil**
 - Details zu den durchgeführten Versuchen, z.B. Synthese- oder Analysevorschriften; IR- NMR- und MS-Daten, Ausbeute, Schmelzpunkte usw.
 - Bei kurzen Arbeiten (Bachelorarbeit, Praktikumsarbeiten) kann es sinnvoll sein, Hauptteil und experimentellen Teil zusammenzufassen.
 - Experimentelle Details kann man stattdessen auch im Anhang aufführen.
- **Zusammenfassung**
 - Zusammenfassung der Ergebnisse der Arbeit in kurzer, präziser Form.
 - Die Zusammenfassung sollte auch für denjenigen Leser verständlich sein, der den Rest der Arbeit nicht gelesen hat, ohne dass er Substanzkürzel, Verbindungsnummern etc. im Hauptteil oder im experimentellen Teil nachschlagen muss.
 - Die Zusammenfassung gibt die Antworten auf die in der Einleitung und Themenstellung aufgeworfenen Fragen.
 - Die Zusammenfassung sollte keine im Hauptteil nicht erwähnten "weitere Ergebnisse" enthalten.
- **Ausblick**
 - Welche Fragen sind noch offen?
 - Welche Experimente oder Berechnungen wären noch durchzuführen?
 - Ist evtl. ein späterer Nutzen der Arbeit erkennbar?Der Ausblick ist meist relativ kurz; er kann auch mit der Zusammenfassung kombiniert werden.
- **Literaturverzeichnis**
- **Anhang**
 - Tabellen mit Atomkoordinaten, Bindungslängen und Bindungswinkeln
 - Sonstige Datenreihen wie z.B. Inputfiles, Parameter bei Serienversuchen etc.
 - Aufwändigere Herleitungen von Formeln
 - Bei Praktikumsarbeiten: Spektren, Chromatogramme, Röntgenbeugungsdiagramme

- **Bei kumulativen oder teil-kumulativen Arbeiten: Angabe des eigenen Beitrages der Publikationen**
- **Publikationen und Manuskripte**
- **Lebenslauf und offizielle Erklärungen**

Die Reihenfolge der einzelnen Teile und die Bezeichnung der Kapitel kann natürlich variiert werden.

Weitere Tipps zur Bachelor-, Master- und Doktorarbeit:

1. Machen Sie frühzeitig eine Gliederung. Beachten Sie die Themenstellung und überlegen Sie, was Sie in die Arbeit hineinschreiben. Sie erkennen dann rechtzeitig, welche Experimente, Analysen, Berechnungen oder Recherchen noch fehlen.
2. Schreiben Sie das Kapitel "Einleitung und Themenstellung" nicht als Letztes, sondern möglichst als Erstes (wenigstens als Stichpunkte), damit Sie im Hauptteil wissen, was Sie schreiben müssen und nicht hinterher alles nochmal neu schreiben müssen.
3. Machen Sie sich frühzeitig mit Ihrem Textverarbeitungssystem vertraut (Import von Graphiken; Erstellen von Tabellen, Fußnoten, Inhaltsverzeichnis, Literaturverzeichnis usw.).
4. Geben Sie Ihrem Gutachter und Ihrem Zweitgutachter eine Fassung der Arbeit möglichst einige Zeit bevor Sie sie einreichen. Denn wenn die Arbeit eingereicht ist, kann man nichts mehr verbessern.
5. Und natürlich: Machen Sie sich immer eine Sicherheitskopie Ihrer Arbeit, die auch dann noch verwendbar ist, wenn Ihr Rechner zuhause von Viren, Würmern o.ä. befallen werden sollte.