

Richtlinien zur Anfertigung von Bachelorarbeiten

Fachgebiet Bioanorganische Chemie
am Institut für Chemie
der Technischen Universität Berlin

Verantwortlicher:

Prof. Dr. Andreas Grohmann
Technische Universität Berlin
Institut für Chemie
Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin

Telefon: +49 30 314-79877

Telefax: +49 30 314-22935

E-Post: andreas.grohmann@chem.tu-berlin.de

Verfasser:

Dr. Dennis Wiedemann
Technische Universität Berlin
Institut für Chemie
Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin

E-Post: dennis.wiedemann@chem.tu-berlin.de

© 2013 von Dennis Wiedemann.

Die vorliegende Arbeit steht unter der *Creative-Commons*-Lizenz „Namensnennung – Nicht-kommerziell – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Deutschland“ (CC BY-NC-SA 3.0), deren Kopie auf der Seite <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/de/> eingesehen werden kann.



Vorwort

„Entweder man kann gut schreiben oder eben nicht“, so eine Meinung, die unter Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern unabhängig von Lebensphase oder Stellung verbreitet ist. Den Satz nur als vorgeschobene Entschuldigung für die Faulheit oder Unkenntnis derer abzutun, die es „eben nicht“ können, ist wohlfeil und wenig hilfreich. Er entspringt dem Eindruck, dass gutes wissenschaftliches Schreiben eine Art Geheimkunst sei, die einer oder einem nur durch die Gnade des Schicksals zufallen könne und sich ihren Weg bahne, wenn sie auf einen entsprechenden Spleen stoße.

Sicher, einigen Menschen fällt das Schreiben leicht, anderen schwerer. Manche bewältigen es mit wenig Übung gut, andere nur leidlich. In diesen Punkten unterscheidet sich das Schreiben nicht von anderen Kenntnissen und Fertigkeiten, die der universitäre Alltag fordert. Vergleicht man aber den Stellenwert, den die Ausbildung am Schreibgerät im Verhältnis zu derjenigen an Glasapparatur, Messanordnung, Computerprogramm oder Reaktor genießt, wird eines klar: Es wird erwartet, dass sich Studierende ohne systematische Anleitung wissenschaftliches Schreiben „so nebenbei“ aneignen. Nur an wenigen Universitäten werden fachnahe – fakultative oder optionale – Kurse zum Thema angeboten. Eine Abstimmung zwischen Fachbereichen, um von strukturierten Protokollen über Forschungsberichte zu eigenen publikationsfähigen Arbeiten zu gelangen, findet für gewöhnlich nicht statt.

In einer Zeit, in der auf die Präsentation von Forschungsergebnissen – besonders für das Einwerben von Drittmitteln – großer Wert gelegt wird, in der man sich dem Diktat des „*Publish or perish*“ bis zur Groteske beugt, überrascht dieser Mangel an Ausbildung. Ihm gegenüber steht die Tendenz, immer früher zu veröffentlichen: Viele Universitäten schaffen zurzeit die Infrastruktur, um bereits Bachelorarbeiten elektronisch zu publizieren und damit weltweit verfügbar zu machen. Deshalb wird es in den kommenden Jahren immer wichtiger werden, Qualitätsstandards für das wissenschaftliche Schreiben festzulegen und dem Weg dorthin in Studienplänen und Lernkonzepten den nötigen Platz einzuräumen.

Die vorliegenden Richtlinien sollen einen Beitrag hierzu leisten. Sie sind als Handreichung gedacht, um grundsätzliche Fragen bei der Erstellung einer Bachelorarbeit zu klären und die Präsentation von Ergebnissen zu standardisieren. Wir hoffen, sie erweist sich als nützlich, damit es in Zukunft statt dem oben genannten Satz heißen kann: „Entweder man kann gut schreiben oder lernt es eben.“

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	3
Inhaltsverzeichnis	4
1 Grundlage – Ordnung muss sein!.....	5
2 Struktur einer Bachelorarbeit.....	6
3 Textverarbeitung – Warum einfach	7
4 Layout – Das Auge liest mit.....	7
4.1 Textsatz	7
4.2 Typographie.....	9
5 Grafiken und Formeln – Ein Bild sagt mehr.....	11
6 Inhalte – Die inneren Werte	13
6.1 Substanzbezeichnungen	13
6.2 Zitierweise.....	13
6.3 Zahlen und Einheiten	16
6.4 Analytische Daten.....	17
7 Stil – Ganz ohne Blüten.....	21
8 Alles, was Recht ist.....	22
9 Zum Weiterlesen	23
9.1 Internetverweise	23
9.2 Bücher	23

1 Grundlage – Ordnung muss sein!

Die Bachelorarbeit ist eine Abschlussarbeit und endet, wenn alle Voraussetzungen erfüllt sind, mit der Erteilung des akademischen Grades „Bachelor of Science“, B. Sc. (Dieser wird übrigens auch im Deutschen *nach* dem Namen geführt; es heißt also „Erika Mustermann, B. Sc.“, nicht „B. Sc. Erika Mustermann“.) So wichtige Dinge werden natürlich in entsprechenden Ordnungen rechtlich geregelt. Für den Bachelorstudiengang Chemie sind dies die Studienordnung (§ 15 StuO) und die Prüfungsordnung (§ 7 PO). Die erstgenannte verrät Ihnen unter anderem die Bearbeitungszeit für die Anfertigung:

„Die Bachelorarbeit hat einen Umfang von 12 LP und wird ganztägig in ca. 10 Wochen oder semesterbegleitend in maximal 18 Wochen durchgeführt.“

§ 15 Abs. 1 StuO (18. Januar 2012)

Die Prüfungsordnung nennt Zweck sowie Umfang und regelt den Umgang mit Fremdquellen:

„(1) Die Bachelorarbeit ist eine Prüfungsarbeit und zugleich Teil der wissenschaftlichen Ausbildung. In ihr soll die Kandidatin oder der Kandidat zeigen, dass sie oder er in der Lage ist, innerhalb einer vorgegebenen Frist ein in sich abgeschlossenes Projekt aus dem Bachelorstudiengang Chemie selbstständig nach wissenschaftlichen Methoden zu bearbeiten. [...]

(4) Die maximale Bearbeitungsfrist beträgt 18 Wochen. Der Umfang der schriftlichen Ausarbeitung sollte 20 Seiten nicht überschreiten. Nicht zu berücksichtigen sind hierbei Anhänge, die Tabellen, Messkurven, Arbeitsvorschriften etc. Über die Ergebnisse wird ein kurzer Abschlussvortrag in einem Kolloquium der betreuenden Arbeitsgruppe gehalten. [...]

(7) Die oder der Studierende hat bei der Abgabe der eigenständig angefertigten Bachelorarbeit schriftlich zu erklären, dass die Arbeit ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt wurden. Entlehnungen aus anderen Arbeiten sind an den betreffenden Stellen in der Bachelorarbeit kenntlich zu machen. [...]

§ 7 PO (18. Januar 2012)

Achten Sie also darauf, dass die Anfertigungszeit zehn Wochen ganztägig bzw. 18 Wochen semesterbegleitend nicht überschreitet. In dieser Zeit sollen Sie eine Arbeit erstellen, die 20 Seiten (Anhänge nicht mitgerechnet) umfasst. Alle Quellen müssen entsprechend gekennzeichnet, Hilfsmittel (auch Übersichtsartikel, Computerprogramme usw.) aufgeführt werden. Sollten Sie letztgenanntem keine Folge leisten, könnten Sie sich eines Tages mit der Anschuldigung konfrontiert sehen, eine Plagiatörin oder ein Plagiatör zu sein (s. Abschnitt 8).

2 Struktur einer Bachelorarbeit

Abschlussarbeiten in den Naturwissenschaften sind relativ stark formalisiert. Für längere Forschungsarbeiten hat sich folgende Struktur bewährt:

- Titelblatt,
- Kurzzusammenfassung auf Deutsch (bei Anfertigung in einer Fremdsprache gemäß § 7 Abs. 7 S. 3 PO),
- Einleitung und Aufgabenstellung,
- Allgemeiner Teil (Ergebnisse und Diskussion),
- Zusammenfassung,
- Experimenteller Teil und
- Anhang (ausgewählte Spektren, Kristallstrukturanalytik, Abkürzungen, Literatur).

Das Titelblatt orientiert sich an den Vorgaben für Abschlussarbeiten wie die Dissertation. Es soll folgende Elemente enthalten (s. Abb. 1):

- Titel und Art der Arbeit,
- Fakultät und angestrebter Grad,
- Name und Geburtsort,
- Betreuer/-in und Gutachter/-in sowie
- Ort und Jahr der Anfertigung.

**Eisen(II)-Komplexe neuartiger
N-Donor-Liganden**

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
„Bachelor of Science“ (B. Sc.)
der Fakultät II – Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin

vorgelegt von
Erika Mustermann
aus Berlin

Betreuer: Prof. Dr. Christian Mustermann
Gutachterin: Prof. Dr. Lieschen Musterfrau

Berlin 2013

Abb. 1. Beispiel für eine Titelseite.

3 Textverarbeitung – Warum einfach ...

Das wichtigste Arbeitswerkzeug von Chemikerinnen und Chemikern im Alltag ist ...? Richtig, die Textverarbeitung. Und so sollten Sie sie auch behandeln: Setzen Sie sich frühzeitig mit den Möglichkeiten zur automatisierten Gestaltung auseinander! Eine Bachelorarbeit mit 20 Seiten ist so übersichtlich, dass man zur Not auch alle Daten händisch pflegen kann. Bei einer Masterarbeit von 40 Seiten oder einer Dissertation von bis zu 200 Seiten gerinnt das aber schnell zur Qual.

Dabei ist es egal, ob Sie proprietäre Lösungen wie MICROSOFT WORD, freie Anwendungen wie LIBREOFFICE WRITER oder Textsatzpakete wie LATEX bevorzugen: Moderne Versionen unterstützen in allen Fällen die nötigen Funktionen. An dieser Stelle eine Einführung zu geben, würde den Rahmen sprengen; es existiert aber eine Vielzahl von Internetressourcen, Büchern oder Kursen für Studierende, die eine Textverarbeitung zu nutzen helfen. Zumindest mit folgenden Konzepten sollten Sie vor dem Beginn Ihrer Arbeit vertraut sein:

- konsequente Verwendung und globale Modifizierung von Stilen (für Überschriften, Fließtext, Bildunterschriften etc.),
- Absatzkontrolle und Umbrüche,
- automatische Erzeugung eines Inhaltsverzeichnisses,
- automatische Nummerierung von graphischen Elementen,
- Einsatz von Verweisen auf solche Elemente im Text und
- automatische Verwaltung von Bildunter- und Tabellenüberschriften.

Bei den graphischen Elementen hat sich der Einsatz separater Zähler für Abbildungen (z. B. Strukturdarstellungen oder Bilder), Schemata (chemische Reaktionsgleichungen), Tabellen und Gleichungen (physikalisch-mathematische) etabliert. Daran sollten auch Sie sich halten.

Es empfiehlt sich, ebenfalls frühzeitig den Umgang mit einem Formeleditor und einem Literaturverwaltungsprogramm zu erlernen – früher oder später wird von Ihnen ohnehin erwartet werden, dass sie ihn beherrschen (s. Abschnitte 5 und 6.2).

4 Layout – Das Auge liest mit

4.1 Textsatz

Das Layout ist für viele ein leidiges Thema und manch eine Person meint gar, es sei völlig unwichtig, solange der Inhalt für sich spreche. Richtig ist aber, dass ein ordentlich durchdachter Textsatz nicht nur dafür sorgt, dass man sich einem Schriftstück offener nähert, sondern auch dafür, dass man ihn entspannter und schneller aufnimmt. (Alle, die sich im Internet schon ein-

mal durch eine „*Wall of Text*“ oder in einem Druckmedium durch eine „Bleiwüste“ kämpfen mussten, wissen das bereits.) Bevor es also um Fragen des *Inhalts* geht, ist hier erst einmal vom *äußeren Erscheinungsbild* die Rede.

Es lohnt sich, sich *vor Beginn des Schreibens* ein bis zwei Stunden Zeit zu nehmen und das Layout festzulegen. Zunächst sollten Sie den **tatsächlich bedruckten Bereich (Textspiegel)** festlegen, indem Sie entsprechende Seitenränder anlegen. Diese sollten *mindestens 1.5 cm, oben besser 2.5 cm* (für den Inhalt der Kopfzeile) groß sein.

Als nächstes bietet es sich an, die **Kopfzeile** einzurichten. Sie muss mindestens die *Seitennummer* enthalten; es ist inzwischen üblich, auch die *Kapitelüberschriften* (wie in diesem Dokument) oder *kleine graphische Elemente* (Trennlinie, Hinterlegungen) einzufügen. Nutzen Sie die Vorlagen und Automatisierungsmöglichkeiten ihrer Textverarbeitung, um sich Arbeit zu sparen! **Fußzeilen** sind in naturwissenschaftlichen Abschlussarbeiten aus der Mode gekommen.

Richten Sie danach die Stile für Fließtext, Überschriften und Hervorhebungen ein. Wählen Sie für den **Fließtext** eine nüchterne *Schriftvariante mit Serifen* (z. B. Cambria, Times New Roman oder Computer Modern Roman). Die kleinen Endstriche sorgen für eine horizontale Linie, an der sich das Auge leichter orientieren kann. (Für Präsentationen mit einem Projektor gilt übrigens das Gegenteil: Serifenschriften sorgen bei geringerer Auflösung für ein „matschiges“ Bild, so dass Grotesken [serifenlose Schriften] zu bevorzugen sind.) Nutzen Sie auf jeden Fall den *Blocksatz* (nicht den so genannten Flattersatz, also links- oder rechtsbündige Schrift) und aktivieren Sie die *automatische Silbentrennung*! Sollte diese bei einzelnen Wörtern falsch oder gar nicht trennen, fügen Sie an der gewünschten Stelle einen *weichen Trennstrich* (Tastenkombination: „Strg“ + „-“) ein. Dieser wird nur beachtet, wenn er in die Nähe eines Zeilenendes rückt, und taucht sonst nicht im Druck auf. Der *Zeilenabstand* sollte 1.2–1.5 betragen, um die Lesbarkeit zu erhöhen. Die *Absätze* können auf verschiedene Arten optisch voneinander getrennt werden. In diesem Dokument wird das durch einen nachgefügt Abstand von 10 pt bewirkt; auch vorgefügte Abstände oder der Einzug der ersten Zeile sind üblich. Probieren Sie aus und wählen Sie die Art, die Ihnen zusagt.

Überschriften müssen sich vom Fließtext abheben. Achten Sie deshalb darauf, dass die *Abstände* groß genug gewählt sind. (Nur wenig ist optisch störender, als Überschriften, die direkt auf einem Absatz „kleben“.) Es empfiehlt sich, für Überschriften eine *andere Schriftart* einzusetzen. Eine besonders gute optische Trennung erreichen Sie mit einer *serifenlosen Schrift* (z. B. Calibri, Arial oder Computer Modern Sans Serif). Arbeiten Sie mit *erhöhten Schriftgrößen, Fettdruck und gegebenenfalls Kursivdruck*, um Überschriften verschiedener Ebenen zu kennzeichnen (Faustregel: je größer und schwärzer, desto weiter oben in der Hierarchie). Nutzen Sie auch hier die Automatisierung der Textverarbeitung, um die Überschriften *automatisch nummerieren* zu lassen. Für die automatische Erstellung des Inhaltsverzeichnisses ist es notwendig, allen Überschriften den entsprechenden Stil zuzuweisen und sie nicht händisch zu formatieren.

Hervorhebungen sind eine gute Möglichkeit, das Auge der Leserin oder des Lesers zu leiten. Legen Sie auch hierfür entsprechende Stile an. Die bevorzugte Art der Hervorhebung ist der *Kursivdruck*. Er ist im Gegensatz zum *Fettdruck*, den Sie sparsam verwenden sollten, weniger aufdringlich und verhindert auch bei regem Gebrauch, dass Seiten wie aus der BILD-Zeitung aussehen. In vielen Veröffentlichungen findet man speziell für Eigennamen und Computerprogramme die Hervorhebung als *Kapitälchen* (z. B. „ROSENMUND-VON-BRAUN-Reaktion“, „SHELXL-97“); entscheiden Sie, ob Sie dies auch in Ihrer Arbeit wollen. Ins Schreibmaschinenmuseum oder in den *Giftschrank des Layoutens* gehören Unterstreichung, *S p e r r u n g*, GROSSBUCHSTABEN, **Änderungen der Schriftgröße** und **farbiger Text** (hier sehen sie auch, warum). Eine Ausnahme bilden Hyperlinks in interaktiven Dokumenten; für sie hat sich in Anlehnung an die klassische Darstellung in Webbrowsern die Unterstreichung und sachte farbliche Hervorhebung durchgesetzt.

4.2 Typographie

Probleme bereitet immer wieder die Wahl und Darstellung bestimmter Zeichen. Mit Bezug zur Praxis soll hier auf einige häufige Fehler hingewiesen werden.

Geschützte Leerzeichen werden mit der Tastenkombination „Strg“ + „Shift“ + Leertaste erzeugt. Sie sorgen dafür, dass der Text zusammengehalten wird an ihm *kein Umbruch* erfolgt. Beim Schreiben im Blocksatz werden geschützte Leerzeichen außerdem *nicht erweitert*, so dass der Text optisch enger zusammenhängt. Sie werden gesetzt *zwischen Zahlen und Einheitenzeichen* (z. B. „25 °C“), *bei mehrteiligen Abkürzungen* (z. B. „z. B.“) und *bei kurzen Gleichungen im Fließtext* (z. B. „Destillation bei $p = 10^{-3}$ mbar“).

Geschützte Trennstriche werden mit der Tastenkombination „Strg“ + „Shift“ + „-“ erzeugt. Sie funktionieren genau wie geschützte Leerzeichen, nur dass statt der Leere ein kurzer Bindestrich gedruckt wird. Man benötigt sie unter anderem für die Zuordnung von Atomnummern zu spektralen Signalen (z. B. „H-6“ in NMR-Spektren).

Physikalische Größen und Variablen werden, im Gegensatz zu Einheitenzeichen, *kursiv* gesetzt (z. B. „ $V = 0.45$ V“ für das elektrische Potential). Mit Fehlern behaftete Messgrößen werden mit der Ungenauigkeit der letzten signifikanten Stelle in Klammern dargestellt, also „ $T = 150(2)$ K“ statt „ $T = (150 \pm 2)$ K“.

Tabelle 1. Striche in der deutschen Sprache.^[1]

Art	Typographie	Satz	Taste	Beispiel
Bindestrich	Viertelgeviertstrich	kompess	„-“	Beide Verbindungen sind Methanol-Addukte.
Trennstrich	Viertelgeviertstrich	linksseitig kompess	„-“	Die Substanz wurde im Ölpumpenvakuum getrocknet.
Ergänzungsstrich	Viertelgeviertstrich	linksseitig kompess	„-“	Besonders gut eignen sich Stand- und Messkolben.
Gedankenstrich	Halbgeviertstrich	Zwischenraum	„Alt“ + 0150	Die Kristallisation erfolgt sofort – es sei denn, die Lösung ist zu stark übersättigt.
Bis-Strich	Halbgeviertstrich	kompess	„Alt“ + 0150	Methanol: 5–10 %
Schrägstrich	Solidus	kompess	„/“	Dann erfolgte die Zugabe von Methanol und/oder Wasser.

Die Typographie von **Strichen** bereitet vielen Studierenden anfangs einige Schwierigkeiten. Während für das allgemeine (s. Tabelle 1) und naturwissenschaftliche Deutsch (s. Tabelle 2) die Regeln strikt sind, ist der Gebrauch im Englischen (s. Tabelle 3) nicht so stark kodifiziert. Unterschiedliche Stilratgeber empfehlen hier unterschiedliche Verfahrensweisen.

Tabelle 2. Darstellungen naturwissenschaftlicher Zusammenhänge.^[1]

Art	Typographie	Satz	Taste	Beispiel
Einfachbindung	Geviertstrich	kleiner Zwischenraum	„Alt“ + 0150	H ₃ C – COOH
Minus (Rechenzeichen)	Halbgeviertstrich	Zwischenraum	„Alt“ + 0150	$\Delta T = T - T_0$
Minus (Vorzeichen und Ladungen)	Halbgeviertstrich	kompess	„Alt“ + 0150	$\Delta T = -13 \text{ K}$ CO ₃ ²⁻

Eine hervorragende und umfassende „Kurze Anleitung für den Schriftsatz“ – speziell auf die Bedürfnisse von Chemikerinnen und Chemikern zugeschnitten – finden Sie auf der Internetseite der Arbeitsgruppe von Herrn Professor Peter Klüfers an der Ludwig-Maximilians-Universität München.

[1] Dudenredaktion, *Die deutsche Rechtschreibung*, 25. Auflage, Dudenverlag, Mannheim, 2009, S. 99–121.

Tabelle 3. Striche in der englischen Sprache.^[1]

Art	Typographie	Satz	Taste	Beispiel
Compound Adjectives	Viertelgeviertstrich, Halbgeviertstrich bei bereits verbundenen Wörtern	kompres	„-“, „Alt“ + 0150	Bose-Einstein statistics, pre-Bose-Einstein condensation
Line-Wrapping	Viertelgeviertstrich	linksseitig kompres	„-“	The substance was subsequently dried in vacuo.
Suspended Hyphen	Viertelgeviertstrich	linksseitig kompres	„-“	This has been the nineteenth- and twentieth-century explanation of the phenomena.
Parenthesis	Geviertstrich	kompres	„Alt“ + 0151	Crystallization occurs immediately—unless the solution is strongly oversaturated.
Range of Values	Halbgeviertstrich	kompres	„Alt“ + 0150	methanol: 5–10 %
Slash	Solidus	kompres für Einzelwörter, Zwischenraum für Satzfügungen	„/“	It was followed by the addition of methanol/water. It was followed by the fast addition of methanol / the slow addition of water.

5 Grafiken und Formeln – Ein Bild sagt mehr

Grafiken sind eine hervorragende Möglichkeit, Ergebnisse kompakt und eingängig zu präsentieren. Wissenschaftliche Veröffentlichungen kommen ohne sie nicht mehr aus – oder können Sie sich einen längeren Artikel allein mit Substanznamen statt Strukturformeln vorstellen?

Bevor Sie aber Grafiken in Ihre Arbeit einbinden, machen Sie sich mit den **verwendbaren Formaten** vertraut. Diese hängen stark von der benutzten Textverarbeitung und deren Importfiltern ab. Grundsätzlich unterscheidet man zwischen zwei Klassen: den Raster- und den Vektorformaten. Bei *Rastergrafiken* werden die Farben der einzelnen Bildpunkte gespeichert und danach gegebenenfalls Komprimierungsalgorithmen unterworfen (z. B. Bitmap, JPEG, GIF, PNG oder TIFF). Solche Bilder sollten Sie immer in einer Auflösung erzeugen, die mindestens so

[1] a) Wikipedia-Autoren/-innen, „Dash“, Wikipedia—The Free Encyclopedia, 2013, <http://en.wikipedia.org/wiki/Dash> (Stand: 05.02.2013); b) Wikipedia-Autoren/-innen, „Hyphen“ Wikipedia—The Free Encyclopedia, 2013, <http://en.wikipedia.org/wiki/Hyphen> (Stand: 05.02.2013); c) Wikipedia-Autoren/-innen, „Slash (punctuation)“, Wikipedia—The Free Encyclopedia, 2013, http://en.wikipedia.org/wiki/Slash_%28punctuation%29 (Stand: 05.02.2013).

hoch ist wie die des Drucks (meist 300 dpi). Beim Vergrößern oder Verkleinern der Bilder treten Artefakte auf: Sie werden „pixelig“ oder feine Strukturen verschwinden. Rasterformate sind für detailreiche Darstellungen (z. B. Molekülstrukturen mit Raytracing, Fotografien) geeignet; es empfehlen sich die Formate PNG, JPEG und komprimiertes TIFF. Bei *Vektorgrafiken* werden nicht die Bildpunkte, sondern Zeichenanweisungen – wie „gelbe schmale Linie von hier bis dort“ – gespeichert (z. B. EPS, SVG, EMF, WMF oder PDF). Sie sind ohne Qualitätsverlust skalierbar und bei Grafiken, die vor allem aus Linien oder Flächen bestehen (z. B. Strukturformeln, ORTEP-Moleküldarstellungen, Diagramme oder Graphen), zu bevorzugen. Empfehlenswert sind die Formate EPS und PDF.^[1]

Alle Grafiken und Formeln tragen eine **Bezeichnung und Nummer** sowie eine **Unter-** (Abbildungen, Schemata, Gleichungen) bzw. **Überschrift** (Tabellen), die jeweils mit einem Punkt endet (s. Abb. 1).

Zur Erstellung von **chemischen Formeln** und **Reaktionsgleichungen** hat sich das proprietäre Programm CHEMBIODRAW der Firma „PerkinElmer Informatics“ als Quasistandard etabliert. Die schlechte Nachricht: Es handelt sich um ein sehr teures Programm. Die gute Nachricht: Die Technische Universität Berlin verfügt über eine Campuslizenz, so dass alle Studierenden es nutzen können. Wählen Sie im Programm die *Vorlage „Wiley Document“* aus und arbeiten Sie ruhig mit Kopieren und Einfügen; dies liefert im Allgemeinen gute Ergebnisse. *Einfache, sehr kurze Reaktionsgleichungen* können Sie übrigens auch im Fließtext benutzen. Achten Sie dann aber darauf, dass Sie einen wohlproportionierten Pfeil verwenden („2 H₂O₂ → 2 H₂O + O₂“) und nicht etwa Umschreibungen wie „-->“.

Benutzen Sie für die Darstellung von **physikalischen** und **mathematischen Gleichungen** bitte den *Formeleditor* Ihrer Textverarbeitung oder die entsprechenden Pakete im Textsatzprogramm. Gleichungen gehören – wie auch Abbildungen – in eine *separate Zeile* (s. Gl. 1). Achten Sie darauf, dass nur Größen kursiv gesetzt werden (s. Abschnitt 4.2). Die Darstellung von Größensymbolen oder Einheiten in Form von Brüchen ist zu vermeiden – oder wissen Sie, was bei einer Angabe wie „12 J / mol · K“ im Zähler und was im Nenner steht?

$$\Delta G_m = \Delta H_m - T \cdot \Delta S_m \approx 22 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Gl. 1. Eine Beispielgleichung.

Für **Plots** von Daten und Funktionen steht eine Vielzahl an Programmen unterschiedlicher Qualität zur Verfügung. Spitzenreiter ist das äußerst kostspielige Werkzeug ORIGIN von „OriginLabs“, dessen Funktionsumfang Sie aber in der Regel nicht benötigen werden. Kompakter und vollkommen ausreichend ist das quelloffene Programm QTIPLLOT von I. Vasilef, für das

[1] Probieren Sie das Einfügen und Drucken (in Papierform oder in ein PDF) unbedingt vorher aus! In MICROSOFT WORD importierte EPS-Dateien sehen beispielsweise auf dem Bildschirm gruselig aus, auf dem Papier oder als PDF jedoch hervorragend.

ebenfalls eine [Campuslizenz](#) vorliegt. Das benutzte Programm sollten Sie im Literaturverzeichnis zitieren; wenn Sie es auch zur Datenmanipulation (Ableitungen, Regressionen etc.) benutzt haben, müssen Sie das sogar (s. Abschnitt 6.2).

6 Inhalte – Die inneren Werte

6.1 Substanzbezeichnungen

Benennen Sie **neue Substanzen** im Fließtext einmal nach der jeweils gängigen Nomenklatur, vorzugsweise derjenigen der IUPAC (Programme wie CHEMBIODRAW leisten hier für organische Moleküle oder Liganden nützliche Dienste).

Da die Namen chemischer Verbindungen (besonders von Komplexen) schnell sehr lang und unübersichtlich werden können, hat es sich in der Chemie eingebürgert, **Substanznummern** zu verwenden. Sie werden stets *fett* gedruckt und in Grafiken unter die (Halb-)Strukturformel gesetzt. Im Fließtext müssen Sie zwischen *attributivem* und *generischem Gebrauch* unterscheiden: Steht die Nummer *zusätzlich* zum Namen oder einer vollwertigen Abkürzung, wird sie dahinter in Klammern gesetzt („Nach Zugabe von Diphenylether (**5**) erfolgte [...]“). Steht sie hingegen *anstatt* einer konkreten Bezeichnung, wird sie ohne Klammern geschrieben („Nach Hydrolyse des Esters **13** wurde [...]“). Taucht eine Verbindung nur einmal in Ihrer Arbeit auf (z. B. in der Einleitung), brauchen Sie keine Substanznummer zu vergeben.

Führen Sie während des Schreibens konsequent das **Abkürzungsverzeichnis**. Es hilft Leserinnen und Lesern, schnell in den Fluss zu finden, wenn sie in der Arbeit blättern. *Allgemeinsprachlich gängige Abkürzungen* (z. B., ca., etc., usw.) gehören jedoch nicht dorthin.

6.2 Zitierweise

Einer der am stärksten formalisierten Teile einer Arbeit ist das Literaturverzeichnis. Und das aus gutem Grund: Niemand hat alles erforscht und alle müssen sich auf die Ergebnisse anderer stützen. Das Überblicken von Literaturquellen und die Formatierung der Verweise in einem Dokument können aufwendig sein. Erleichtern Sie sich die Arbeit (und ordnen Sie Ihre eigene Sammlung), indem Sie eine **Literaturverwaltungssoftware** benutzen! Das meistgenutzte proprietäre Programm dafür ist [ENDNOTE](#) von „Thompson Reuters“, das sehr gut mit MICROSOFT WORD und LIBREOFFICE WRITER zusammenarbeitet. (Leider gibt es keine Campuslizenz, aber eine [günstigere Version für Studierende](#).) Beliebte sind darüber hinaus die quelloffenen Programme [ZOTERO](#) des „Roy Rosenzweig Center for History and New Media“ und [JABREF](#) als Gemeinschaftsprojekt, das sich besonders gut zum Einsatz mit LATEX eignet.

Um die wichtigsten Daten auf einen Blick zu erfassen und – immer wichtiger – auch elektronisch auswertbar zu machen, ist eine einheitliche Form der Zitate nötig. Die hier vorgestellte Zitierweise stützt sich auf eine der wichtigsten Chemiezeitschriften weltweit, die überdies neben der englischsprachigen Version auch noch auf Deutsch veröffentlicht wird: die *Angewandte Chemie*.^[1]

Der **Verweis im Fließtext** wird *hochgestellt in eckigen Klammern* gesetzt. Eventuell vorhandenen Satzzeichen wird er nachgestellt. Literaturquellen werden als Endnoten (im Literaturverzeichnis) geführt; erklärende Anmerkungen können Sie als Fuß- oder Endnoten setzen. Wird im Text später noch einmal auf ein Segment einer mehrteiligen Quellenangabe Bezug genommen, wird der entsprechende Kleinbuchstabe angeführt. Wird später hingegen nochmals auf Quellen, die über mehrere Nummern verteilt sind, hingewiesen, listet man jene auf. Das klingt komplizierter, als es in der Praxis ist; Ihre Literaturverwaltung übernimmt das gern für Sie!

Die Arbeiten der Gruppe decken ein breites Spektrum an Themen ab.^[1-3, 5] Unter ihnen befasst sich allerdings nur die neueste Veröffentlichung,^[1b] die soeben erschienen ist, mit Komplexen der genannten Art.

Für **Quellenangaben im Allgemeinen** gilt: Sie enden mit einem *Punkt*. Enthält eine Angabe mehrere Quellen, werden diese mit *Kleinbuchstaben mit nachgestellter Klammer* durchnummeriert und durch *Semikola* getrennt.

[1] a) A. Grohmann, *Dalton Trans.* **2010**, 39, 1432–1440; b) P. Stock, T. Pędziński, N. Spintig, A. Grohmann, G. Hörner, *Chem. Eur. J.* **2013**, 19, 839–842.

Die wichtigste Quelle für Forschungsergebnisse sind **Zeitschriftenartikel**. Für einen Verweis auf sie müssen Sie zunächst die offizielle Abkürzung des Zeitschriftentitels in Erfahrung bringen; nutzen Sie dazu gegebenenfalls das „[CAS Source Index Search Tool](#)“. Außerdem enthält ein Zitat die komplette Liste der Autoren und Autorinnen (nicht mit „*et al.*“ abkürzen), das Jahr der Veröffentlichung, den Band („*Volume*“, zu unterscheiden von der Ausgabe bzw. Heftnummer oder „*Issue*“) und den kompletten Seitenumfang (verbunden mit einem Geviertstrich, keinem Divis [s. Abschnitt 4.2]). In Zeitschriften, die nur online erscheinen, werden statt Seitenzahlen hin und wieder laufende Nummern vergeben. Sie ersetzen dann den Seitenumfang im Zitat.

[2] A. Grohmann, *Dalton Trans.* **2010**, 39, 1432–1440.

Noch nicht gedruckte Zeitschriftenartikel (z. B. zur Veröffentlichung angenommene Manuskripte oder bereits online abrufbare Dokumente, oft *Early View* oder *ASAP* [*as soon as publishable*] genannt) werden unter Angabe des Jahres und ihres *Digital Object Identifier* (DOI) zitiert.

[1] P. Göllitz, N. Compton, H. Ross, „Angewandte Chemie – Autorenrichtlinien“, **2001**, http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/%28ISSN%291521-3757/homepage/2001_guideline.html (Stand: 05.02.2013).

[3] M. Schmidt, D. Wiedemann, B. Moubaraki, N. F. Chilton, K. S. Murray, K. R. Vignesh, G. Rajaraman, A. Grohmann, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2013**, DOI: 10.1002/ejic.201201149.

Die zweithäufigste Quelle sind **Bücher**. Korrekt angeführt werden sie mit Autorinnen und Autoren, Titel und – so vorhanden – Band, Auflage, Verlag und Verlagssitz. Sollte nur ein *Kapitel* oder eine *Seite* Inhalt des Zitates sein, ist dies durch den Seitenumfang mit vorangestelltem „S.“ kenntlich zu machen.

[4] A. F. Holleman, E. Wiberg, N. Wiberg, *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, 102. Aufl., Walter de Gruyter, Berlin, **2007**, S. 457–462.

Es ist zudem üblich, Bücher zu veröffentlichen, in denen jedes Kapitel von anderen Autoren und Autorinnen stammt. (Sie erkennen das daran, dass jedes Kapitel einen eigenen Titel und Autor/-innen hat.) Solche Werke nennt man **Bücher mit Herausgeber/-innen**.

[5] A. Grohmann, H. Schmidbaur in *Comprehensive Organometallic Chemistry II, Vol. 3* (Hrsg.: E. W. Abel, F. G. A. Stone, G. Wilkinson), Pergamon, Oxford, **1995**, S. 1–56.

Bei noch nicht anderweitig veröffentlichten Ergebnissen wird es vorkommen, dass Sie **Abschlussarbeiten** (Bachelor-, Master-, Diplomarbeiten, Dissertationen oder Habilitationen) zitieren müssen. Genannt werden in diesem Fall Verfasserin bzw. Verfasser, Art der Arbeit, Universität und Jahr (sowie gegebenenfalls der Seitenumfang). Beachten Sie, dass nur Dissertationen und Habilitationen uneingeschränkt zitierfähig sind, da für sie eine Publikationspflicht besteht – aber auch für Bachelor-, Master- und Diplomarbeiten geht der Trend zur Veröffentlichung (s. Abschnitt 8).

[6] A. Grohmann, Dissertation, Technische Universität München, **1991**.

Patente zählen zu den Quellen, die sich mäßiger Beliebtheit erfreuen. Zwar gebietet der Gesetzgeber die vollständige und nachvollziehbare Offenlegung von Erfindungen, jedoch stellt man im Labor nicht selten fest, dass solche Ergebnisse kaum oder gar nicht zu reproduzieren sind. Genannt werden müssen Erfinder/-innen, Anmelder/-in (meist eine Firma), Länderkürzel, Patentnummer und Jahr. Sollten Ihnen diese Daten fehlen, können Sie sie mittels der weltweiten Patentsuche des Europäischen Patentamtes in Erfahrung bringen. Die Volltexte sind dort in der Regel ebenfalls erhältlich.

[7] H. Schumann, U. Böttger, H. Gries, J. Platzek, B. Radüchel (Schering AG), DE-4403039, **1995**.

Verwendete **Software** muss ebenfalls zitiert werden. Für die meisten gängigen Programme existieren bereits beschreibende Artikel in computerorientierten Fachzeitschriften. Diese sind bevorzugt zu zitieren und gehen aus dem „Hilfe“-Menü oder dem Internetauftritt der Software hervor. Sollte ein solcher Artikel nicht existieren, werden Autoren/-innen, Name (häufig in Kapitelchen, s. Abschnitt 4.1) und Kurzbeschreibung des Programms, Einrichtung – so vorhanden – und Ort der Erstellung (mit Staat) sowie das Jahr der genutzten Version genannt.

[8] I. Vasilef, QTIPLLOT, Data Analysis and Scientific Visualisation, Universiteit Utrecht, Utrecht (Niederlande), 2011.

Internetquellen sind mit äußerster *Vorsicht* und *Sparsamkeit* einzusetzen. Sie sind flüchtig, also nach geraumer Zeit nur noch mühsam oder gar nicht mehr zu recherchieren. Dazu kommt, dass es sich bei ihnen meist um Sekundärquellen unbekannter Qualität handelt. *Keinesfalls akzeptabel* ist die Angabe eines Internetverweises, wenn eine gedruckte oder anderweitig veröffentlichte Primärquelle zur Verfügung steht. Vorstellbar hingegen wäre zum einen das Anführen einer Seite, *über* die Sie schreiben, von der Sie also keine Inhalte für Ihre Arbeit beziehen („Dieser im Internet weit verbreitete Irrtum findet sich auch auf prominenten Portalen wie der Wikipedia.^[9]“). Zum anderen mag es sein, dass eine Wissenschaftlerin oder ein Wissenschaftler den Abstract eines Posters, der ansonsten unveröffentlicht ist, auf ihrer oder seiner Internetpräsenz bereithält. Oder Sie wollen ein Bild in ihrer Arbeit verwenden, das jemand unter der Bedingung lizenziert hat, dass Name und Quelle genannt werden. In solchen Fällen sind Autoren/-innen, Titel des Dokuments, Name der Seite – so vorhanden – und URL anzugeben. Der Flüchtigkeit wegen ist es besonders wichtig, dass Sie das *Datum des Abrufs* nennen.

[9] Wikipedia-Autoren/-innen, „Chemie“, Wikipedia – Die freie Enzyklopädie, 2013, <http://de.wikipedia.org/wiki/Chemie> (Stand: 05.02.2013).

[10] S. Novick, „Biography of Rotational Spectra for Weakly Bound Complexes“, 2012, <http://www.wesleyan.edu/chem/faculty/novick/vdw.html> (Stand: 05.02.2013).

6.3 Zahlen und Einheiten

Ein zweites Gebiet, das stark der Formalisierung und Standardisierung unterliegt, ist die Präsentation experimenteller Vorschriften und analytischer Daten. Dass dies jedoch eher ein Segen als ein Fluch ist, werden Sie feststellen, wenn Sie sehr alte – vorzugsweise physikochemische – Literatur lesen: Die Einheiten stammen aus anderen Systemen, wie dem CGS, und scheinen zum Teil nicht zur Größe zu passen. (Oder erschließt sich Ihnen sofort, warum man die Kapazität eines Kondensators in der Einheit $[C] = 1 \text{ cm}$ gemessen hat?) Wenn Sie Glück haben, unterscheidet sich die Maßzahl nur in der Größenordnung von der im SI-Einheitensystem. In der Elektrodynamik treten aber auch Faktoren wie 4π oder Naturkonstanten mit vollkommen anderem Wert auf ...

Nutzen Sie bei Ihrer Arbeit deshalb ausschließlich **SI-Einheiten** und deren Präfixe („Giga-“, „Kilo-“, „Zenti-“, „Nano-“ etc.). Erlaubte Ausnahmen sind das Grad (1°) für Winkel, der Liter (1 L) für Flüssigkeitsvolumina, das Grad Celsius (1°C) für Reaktionstemperaturen, das Bar (1 bar) für abgelesene Drücke und das Ångström (1 \AA) für Längen auf interatomarer Skala.

Zur **Darstellung** von Größenwerten dient der *Punkt als Dezimaltrennzeichen*. Einheitenzeichen werden als Produkt mit negativen Exponenten geschrieben („ $25.8 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ “). *Mengenan-*

gaben im experimentellen Teil folgen in Klammern der Substanz: „Amin **5** (2.0 g, 20 mmol) wurde mit Ethanol (50 mL) versetzt“, nicht „2.0 g (20 mmol) des Amins **5** wurden mit 50 mL Ethanol versetzt.“

Achten Sie darauf, dass die **signifikanten Stellen** Ihrer Angaben mit der Messgenauigkeit konsistent sind. Ein Beispiel: Wenn Ihnen eine Grob- und eine Feinwaage zur Verfügung stehen, könnten Sie auf erstgenannter für große Mengen drei signifikante Stellen („6.80 g“), auf letztgenannter für mittlere Mengen fünf („1.0368 g“), für kleine Mengen aber ebenfalls nur drei signifikante Stellen („0.0752 g“) ablesen. Es gelten folgende Regeln: *Summen* und *Differenzen* haben die kleinste Zahl der Nachkommastellen ihrer Operanden ($0.10\text{ g} + 0.024\text{ g} = 0.12\text{ g}$). *Produkte* und *Quotienten* haben die kleinste Zahl an signifikanten Stellen ihrer Operanden ($86.2\text{ g} \div 2.0\text{ mol} = 43\text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$). Es wird jeweils entsprechend gerundet. Bei *Multiplikation oder Division mit exakten Werten* (dazu zählen auch molare Massen) trägt das Ergebnis so viele signifikante Stellen wie der Messwert (z. B. die Einwaage). Im Spezialfall des *dekadischen Logarithmus* trägt die Mantisse (also die Zahl nach dem Dezimaltrennzeichen) so viele signifikante Stellen wie der Numerus ($\log 2.45 = 0.389$). Umgekehrt trägt eine *Potenz zur Basis 10* so viele signifikante Stellen wie die Mantisse des Exponenten ($10^{12.389} = 2.45 \cdot 10^{12}$) Für *komplexere Funktionen* lassen sich keine allgemeinen Regeln aufstellen.^[1]

6.4 Analytische Daten

Für die Darstellung analytischer Daten in der präparativen Chemie hat sich eine stark komprimierte Schreibweise durchgesetzt. Sie ermöglicht es, in aller Kürze die gemessenen Eigenschaften einer Substanz zur *Charakterisierung, Identifizierung* und *Reinheitsbestimmung* anzugeben.

Die **Präsentation der Analysedaten** erfolgt geschlossen in *einem* Absatz nach der Synthesvorschrift. Jeder Abschnitt wird durch eine *Abkürzung in Fettdruck*, die die Art der Analytik angibt, eingeführt. Einzelne Abschnitte werden durch *Semikola* getrennt; am Ende steht ein Punkt. Achten Sie in den folgenden Beispielen besonders darauf, wohin Abstände, Größen- und Einheitenzeichen gehören! Es ist zwischen zwei Zwecken der Analytik zu unterscheiden: Wird sie zur *Charakterisierung* einer bisher unbekanntten Verbindung eingesetzt, umfasst sie mindestens die NMR-Daten für alle gängigen Kerne, ein IR- und Massenspektrum sowie eine Elementaranalyse. Soll lediglich die *Identität und Reinheit* einer bereits bekannten Verbindung nachgewiesen werden, reichen in der Regel auch NMR-Spektren oder eine stimmige Elementaranalyse aus.

[1] P. Atkins, J. Jones, *Chemical Principles*, 3. Aufl., Freeman, New York, **2005**, S. A6–A7.

Die **Zuordnung von spektralen Signalen oder Absorptionen** kann mitunter ein Projekt für sich sein. Zum Glück gibt es aber Helferlein, die das Leben leichter machen. (Bei ihnen handelt es sich um „Hilfsmittel“ im Sinne von § 7 Abs. 7 PO, so dass Sie mit einer Quellenangabe versehen werden müssen.) Gute Vergleichswerte für viele Arten der Spektroskopie liefern *Spektrendatenbanken* wie die SDBS^[1] oder *Lehrbücher* wie der „Hesse-Meier-Zeeh“.^[2] Besonders für ¹H- und ¹³C-NMR-Spektren sind Abschätzungen mittels halbempirischer *Inkrementensysteme*, wie dem in CHEMBIODRAW implementierten CHEMNMR,^[3] beliebt. Einen anderen Ansatz verfolgt die *strukturierte Datenbank* NMRShiftDB:^[4] Sie speichert ausgewertete NMR-Spektren und die chemische Umgebung der zugeordneten Kerne. Dadurch kann sie für die chemische Verschiebung in unbekanntem Verbindungen Mittel- und Medianwerte, Wertebereiche und Standardabweichungen angeben, die auf der statistischen Auswertung von Daten ähnlich umgebener Kerne beruhen. Schwingungsspektroskopische Gruppenfrequenzen – besonders für die anorganische Chemie – findet man in *Tabellenwerken* wie dem „Socrates“.^[5] Die Zuordnung der Signale in Massenspektren können Sie sich durch *Simulation* innerhalb einer Spektrometersoftware (z. B. XCALIBUR von „Thermo Scientific“) sowie mit dem Fragmentierungswerkzeug von CHEMBIODRAW erleichtern.

Bei **¹H-NMR-Spektren** sind zunächst die Frequenz des Spektrometers und das verwendete Lösemittel (z. B. CDCl₃, [D₆]DMSO oder [D₈]Toluol) anzugeben. Die Signale werden von der größten zur kleinsten Verschiebung (gegen Tetramethylsilan) geordnet und mit Multiplizität (s: Singulett, d: Duplett, t: Triplet, q: Quartett, m: Multiplett), Kopplungskonstanten *J*, Atomanzahl (aus der Integralhöhe auf Ganze gerundet) und Zuordnung zu den Protonen aufgelistet. Den *Kopplungskonstanten* wird die Anzahl der Bindungen, über die die skalare Kopplung erfolgt, voran- und die Sorte der koppelnden Kerne nachgestellt. Die *Zuordnung* muss eindeutig sein. Fügen Sie gegebenenfalls eine Abbildung mit Nummerierungsschema ein; die entsprechenden Zahlen werden in den Spektralangaben dann vor den Kern gestellt und mit einem geschützten Trennstrich (s. Abschnitt 4.2) angebunden. Sollte eine eindeutige Zuordnung nicht möglich sein, muss dies in einer Fuß-/Endnote oder im Fließtext des Allgemeinen Teils erklärt werden.

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 8.56 (m, 2H, 6'-H), 7.69 (dd, ³J_{HH} = 8.0, 7.6 Hz, 1H, 4-H), 7.64 (m, 2H, 4'-H), 7.53 (dd, ³J_{HH} = 7.6 Hz, ⁴J_{HH} = 1.1 Hz, 1H, 3-H), 7.18–7.13 (m, 4H, 5'-H, 3'-H), 7.47 (dd, ³J_{HH} = 8.0 Hz, ⁴J_{HH} = 1.1 Hz, 1H, 5-H), 2.31 ppm (s, 3H, CH₃).

-
- [1] T. Yamaji, T. Saito, K. Hayamizu, M. Yanagisawa, O. Yamamoto, N. Wasada, K. Someno, S. Kinugasa, K. Tanabe, T. Tamura, J. Hiraiishi, „SDBSWeb“, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, **2013**, <http://sdb.sriodb.aist.go.jp>.
- [2] M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie*, 8. Aufl., Thieme, Stuttgart, **2011**.
- [3] R. B. Schaller, M. E. Munk, E. Pretsch, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **1996**, *36*, 239–243.
- [4] C. Steinbeck, S. Krause, S. Kuhn, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **2003**, *43*, 1733–1739.
- [5] G. Socrates, *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies*, 3. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, **2004**.

Bei Entkopplung ist deren Art in der Bezeichnung anzugeben. Anders als für ^1H - kann für $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektren die Atomanzahl nicht angeführt werden, da der NOE (Intensitätstransfer) Integralhöhen verändert. Wenn keine NMR-aktiven Heterokerne anwesend sind, kann auch auf die Angabe von Multiplizität und Kopplungskonstanten verzichtet werden. Wenn Sie ein längeres Molekülfragment angeben müssen, wird die signalgebende Kernsorte kursiv gesetzt.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR (50 MHz, CDCl_3): $\delta = 166.3$ (2'-C), 164.6 (6-C), 157.8 (2-C), 148.7 (6'-C), 136.3 (4-C), 135.7 (4'-C), 123.6 (3'-C), 121.5 (5-C), 121.1 (5'-C), 120.5 (3-C), 65.6 (CH_2), 60.1 ($\text{C}-\text{CH}_3$), 45.4 ($\text{N}-\text{CH}_3$), 27.2 ppm ($\text{C}-\text{CH}_3$).

Enthält eine Verbindung Bor-, Fluor-, Silicium- oder Phosphoratome, so sind auch **Heterokern-NMR-Spektren** (^{11}B , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P) auszuwerten.

^{19}F -NMR (188 MHz, CD_3CN): $\delta = -72.8$ ppm (d, $^1J_{\text{FP}} = 706$ Hz, PF_6^-); ^{31}P -NMR (81 MHz, CD_3CN): $\delta = -144.6$ ppm (sept, $^1J_{\text{PF}} = 706$ Hz, PF_6^-).

Bei **IR-Spektren** muss stets das *Medium* (z. B. Presslinge in KBr oder CsCl, Verreibung in Nujol, Lösemittel oder „pur“) bzw. das Messverfahren (z. B. ATR) angegeben werden. Sie sollten nur prägnante oder bedeutende Maxima auflisten und sie mit relativen Intensitätsangaben (vs: sehr stark, s: stark, m: mittel, w: schwach) versehen. Charakteristische *Gruppenfrequenzen* müssen zugeordnet und mit gängigen Symbolen (ν : Streckschwingung, δ : Deformationsschwingung, γ : *Out-of-plane*-Deformationsschwingung, ρ : Schaukelschwingung, τ : Drehschwingung, ω : Wipp-schwingung) bezeichnet werden. Achten Sie hier auch auf die korrekte Verwendung des griechischen Buchstabens ν (Ny), der nicht durch υ (Ypsilon) wiedergegeben werden darf.

IR (KBr): $\tilde{\nu} = 3057, 2998, 2976, 2940, 2818, 2771$ (vs, $\nu[\text{CH}]$), 1574, 1585 (vs, $\nu[\text{C}=\text{C}]$, $\nu[\text{C}=\text{N}]$), 1467, 1453, 1429 (vs, $\delta[\text{CH}_2]$), 1364, 1348 (vs, $\delta[\text{CH}_3]$), 786, 769, 748 (s, $\gamma[\text{CH}]$), 645, 617, 582 cm^{-1} (m, $\delta[\text{C}=\text{C}]$, $\delta[\text{C}=\text{N}]$).

Da **Massenspektren (MS)** sich erheblich in der Art der erzeugten und detektierten Ionen unterscheiden können, ist eine Angabe der *Ionisierungsmethode* zwingend. Dazu kommen weitere Daten wie die Stoßenergie bei EI- oder das Lösemittel bei ESI-Spektren. Für die Signale wird jeweils das Masse-zu-Ladung-Verhältnis, die relative Intensität (in Prozent) und die *Zusammensetzung des Ions* aufgeführt. Es ist üblich, vom erwarteten vollständigen Molekül *M* auszugehen und die Veränderungen durch Abspaltung (–) oder Anlagerung (+) zu beschreiben. Halbstruktur-, Komplex- oder Summenformeln sind ebenfalls möglich. Achten Sie darauf, dass die *Genauigkeit* der Angaben dem Detektor entspricht. So kann ein Sektorfeldanalysator maximal auf eine halbe atomare Masseneinheit, eine Orbitrap (wie zurzeit üblich) nach Kalibrierung bis auf wenige *Parts per million* (ca. 4 ppm) genau sein.

MS (EI, 70 eV): m/z (%) = 156 (100, $[\text{M}]^{2+}$), 139 (7, $[\text{M}-\text{OH}]^+$), 138 (4, $[\text{M}-\text{H}_2\text{O}]^{2+}$); MS (ESI+, MeOH): m/z (%) = 875.24 (11, $[2\text{M}+\text{Na}]^+$), 853.26 (8, $[2\text{M}+\text{H}]^+$), 826.25 (18, $[2\text{M}-\text{CN}]^+$), 449.11 (40, $[\text{M}+\text{Na}]^+$), 427.13 (15, $[\text{M}+\text{H}]^+$), 400.12 (100, $[\text{M}-\text{CN}]^+$).

Hochauflösende Massenspektren (HRMS) werden in Kombination mit NMR-Spektren hin und wieder als Ersatz für Elementaranalysen akzeptiert. Bei ihnen wird nur ein Signal angegeben, das möglichst intensiv sein und in einfacher Weise aus dem Molekül M hervorgehen muss (z. B. $[M]^{•+}$ bei EI-, $[M+H]^+$ oder $[M-H]^-$ bei ESI-Quellen). Neben dem mit *kalibriertem Analysator* gemessenen wird das theoretische Masse-zu-Ladung-Verhältnis des Hauptisotopomers – nicht die relative Molekülmasse der natürlichen Mischung – aufgeführt. Außerdem sind die Summenformel und die Zuordnung des Ions anzugeben.

HRMS (ESI[-], MeOH): $m/z = 154.99808$ (ber. 154.99750 für $C_6H_3O_5$, $[M-H]^-$).

Die **Elementaranalyse (EA)** umfasst als Standardverfahren (Verbrennungsanalyse) die Elemente Wasserstoff, Kohlenstoff, Stickstoff, Schwefel und möglicherweise Sauerstoff. In der hier vorgestellten Form lässt sich aber auch der Anteil jedes anderen Elements angeben, egal auf welche Weise er ermittelt wurde. Neben den berechneten und gefundenen Massenanteilen werden Summenformel (gegebenenfalls mit eingelagertem Lösemittel) und relative Molekülmasse aufgeführt. CHEMBIODRAW erleichtert Ihnen auch hier die Berechnung.

EA ($C_{20}H_{22}Cl_2N_4Zn \cdot MeOH$, 486.74): ber. C 51.82, H 5.38, N 11.51 %, gef. C 52.03, H 5.32, N 11.49 %.

Für **UV/Vis-Spektren** werden die Wellenlänge und die linearen Absorptionskoeffizienten – nicht die dimensionslosen Absorbanzen – an den Absorptionsmaxima angegeben. Diese sind mitunter stark abhängig vom Lösemittel, so dass es benannt werden muss. Vergessen Sie nicht, die Einheit für den linearen Absorptionskoeffizienten aufzuführen, da mehrere Einheiten in Gebrauch sind.

UV/Vis (MeOH): $\lambda_{max} (\epsilon) = 416 (1100), 262 (13100), 209 \text{ nm } (32200 \text{ cm}^2 \cdot \text{mmol}^{-1})$.

Die Bestimmung von **Schmelz-, Siede- oder Zersetzungspunkten (Schmp., Sdp., Zersp.)** ist ein wenig aus der Mode gekommen, kann aber wertvolle Hinweise auf die Reinheit oder Empfindlichkeit einer Substanz geben. Sein Sie aber ehrlich: Treten Bereiche statt scharfer Punkte auf, geben Sie jene auch an.

Zersp.: 220 °C.

Auch für **weniger gängige analytische Daten** – wie Raman-Spektren, Drehwerte, Suszeptibilitäten oder EPR-Spektren – gibt es Konventionen oder zumindest übliche Formen der komprimierten Wiedergabe. Sollte eine entsprechende Technik Teil Ihrer Arbeit sein, so richten Sie sich nach *modernen Literaturvorbildern* und sorgen Sie für eine konsistente Darstellung.

7 Stil – Ganz ohne Blüten

Zu Fragen des Stils beim wissenschaftlichen Schreiben existiert eine Fülle von Ratgebern großen und kleinen Umfangs. Diese mögen zwar hilfreich sein, aber letztlich kommen Sie für die Entwicklung Ihres eigenen Stils um zwei Dinge nicht herum: erstens um das Lesen und zweitens um das Schreiben von Fachliteratur. Trotzdem sei an dieser Stelle auf einige ausgewählte Aspekte hingewiesen.

Die **Sprache** Ihrer Bachelorarbeit wird in aller Regel Deutsch sein – außer Sie haben sich mit Ihrer Betreuerin/Ihrem Betreuer und dem Prüfungsausschuss anders geeinigt (§ 7 Abs. 7 S. 3 PO). Im Deutschen haben Sie grundsätzlich die Wahl zwischen zwei **Tempusstufen**: dem Präsens (Vorzeitigkeit im Perfekt) und dem Präteritum (Vorzeitigkeit im Plusquamperfekt). Das Präsens drückt aus, dass ein Sachverhalt *allgemeingültig* oder *reproduzierbar* ist. Deshalb wird es vor allem in der Einleitung und im Allgemeinen Teil von Forschungsarbeiten benutzt.

*„Im oktaedrischen Feld spalten die d-Orbitale in die Symmetrierassen t_{2g} und e_g auf.“
„Hat man hingegen vorher auf vollständigen Luftausschluss geachtet, bleibt die Lösung gelb.“*

Im Gegensatz dazu ist das Präteritum rein *deskriptiv*: Es wird benutzt, um wertungsfrei Beobachtungen und Vorgänge zu beschreiben. Man trifft es darum vornehmlich im Experimentellen Teil und der Zusammenfassung an.

*„Die Möglichkeit, mutmaßlich instabile Eisen(II)-Komplexe darzustellen, wurde aufgezeigt.“
„Nachdem die Farbe zu Rot umgeschlagen war, wurde Methanol (50 mL) zugegeben.“*

Einige kurze Hinweise, die schneller gelesen als befolgt sind, sollten Sie im Interesse der Lesbarkeit noch beherzigen:

- Benutzen Sie – ganz besonders im Experimententeil – **kurze, prägnante Sätze**. Vermeiden Sie Floskeln und Bandwurmsätze!
- Lassen Sie die **Bedeutung in den Verben**! Ein Stoff wurde analysiert, nicht einer Analyse unterworfen. Eine Lösung siedet und wird nicht am Siedepunkt gehalten.
- Achten Sie auf den Unterschied von **Verbalsubstantiven mit und ohne Suffix**! So wirkt erstgenanntes oft recht hölzern (vgl. „Schätzung“ statt „Schützen einer funktionellen Gruppe“); außerdem bezeichnen sie in der Regel unterschiedliche Dinge: Während das Verbalsubstantiv mit Suffix ein Abstraktum oder Ergebnis darstellt („die Festlegung“), hat dasjenige ohne Suffix einen Verlaufscharakter („das Festlegen“).
- Vermeiden Sie **gestelzte Formulierungen** („Der Alkohol wird zum Aldehyd oxidiert.“ statt „Die Hydroxymethylfunktionalität wird in eine Formyleinheit überführt.“) und **Jargon** („Das NMR-Spektrum zeigte keine weiteren Signale.“ statt „Das NMR war sauber.“).

Einen hervorragenden Überblick über weitere Stilfragen finden Sie übrigens in den von Herrn Dr. Thomas Lehmann gepflegten [Unterlagen und Formularen der Organisch-Chemischen Grundausbildung](#) an der Freien Universität Berlin (Dokumente „Anleitung zum Anfertigen von

Praktikumsprotokollen“, „Zum Unterschied von Vorschrift und Protokollen“ und „Sinnlose Protokollformulierungen“).

8 Alles, was Recht ist

Dass eine Examensarbeit an rechtliche Rahmenbedingungen gebunden ist, wurde bereits in Abschnitt 1 aufgezeigt. Und Sie müssen sich mindestens rudimentär mit ihnen auskennen – nicht nur, aber besonders, wenn Sie über eine **Veröffentlichung Ihrer Bachelorarbeit** nachdenken. (Die Technische Universität Berlin bietet die Möglichkeit, dies recht bequem in ihrem [Digitalen Repositorium](#) zu tun.) *Wenn Sie publizieren möchten, sprechen Sie auf jeden Fall zuerst mit Ihrer Betreuerin oder Ihrem Betreuer!* Bei einer Arbeit, die unter intensiver Betreuung stattfindet und oft Teil eines größeren Forschungsvorhabens ist, ist nämlich nicht immer klar, wer an den Ergebnissen welche Rechte hat.

Damit befinden Sie sich auch schon mitten im unübersichtlichen Dschungel der **Urheberrechte**. In ihm gibt es eine Goldene Regel: *Wenn Sie sich nicht vollständig sicher sind, ob und unter welchen Bedingungen Sie einen Text oder eine Grafik (z. B. aus einer anderen Publikation oder aus der werdenden Dissertation einer Kollegin) benutzen dürfen, dann **unterlassen** Sie es tunlichst!* Natürlich gibt es auch Sammlungen wie die [Wikimedia Commons](#), die den Gebrauch der verzeichneten Werke kostenlos und ausdrücklich erlauben. Aber auch hier ist diese Erlaubnis (Lizenz) an Bedingungen geknüpft: Beispielsweise müssen Sie meist den Namen/das Pseudonym des Urhebers/der Urheberin angeben oder die Arbeit (das Werk), für das Sie eine Grafik nutzen, unter dieselbe Lizenz stellen. Sollten Sie also ein Orbitalschema verwenden, das unter einer solch liberalen Lizenz steht, dann jedoch Ihre Bachelorarbeit restriktiv (z. B. ohne Veränderungserlaubnis) veröffentlichen, brechen Sie die Lizenz des Bildes und können dafür kostenpflichtig belangt werden.

Aber selbst wenn Sie die Urheberrechte beachten, ist längst nicht alles erlaubt. Weitere juristische Anforderungen regeln nämlich die bereits in Abschnitt 1 vorgestellten Ordnungen, aus denen hier an einen Absatz erinnert sei:

„Die oder der Studierende hat bei der Abgabe der eigenständig angefertigten Bachelorarbeit schriftlich zu erklären, dass die Arbeit ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt wurden. Entlehnungen aus anderen Arbeiten sind an den betreffenden Stellen in der Bachelorarbeit kenntlich zu machen. [...]“

§ 7 Abs. 7 PO (18. Januar 2012)

Nehmen wir einmal an, Sie verwendeten ein gemeinfreies Werk (also ein solches, an dem die Urheberrechte erloschen sind oder nie bestanden haben) – z. B. eine Textpassage oder Grafik von einem vor 75 Jahren verstorbenen Autor. Übernehmen Sie diese ohne entsprechende

Kennzeichnung – d. h. ohne Kenntlichmachung als Zitat und gleichzeitige Quellenangabe – in Ihre Arbeit, könnte Sie der Verlag des toten Autors zwar nicht belangen. Sie verstießen aber gegen die Prüfungsordnung, weil Sie noch andere „als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt“ hätten. Auf den Punkt gebracht: Sie hätten anderer Leute Werke als die eigenen ausgegeben – und das nennt man gemeinhin ein **Plagiat**.

Um auch im rechtlichen Sinne einwandfrei zu arbeiten, gibt es zwei simple Handlungsanweisungen, die zur guten wissenschaftlichen Praxis gehören. *Machen Sie Textstellen, die Sie wörtlich aus anderen Arbeiten übernommen haben, in vollem Umfang als solche kenntlich* (Anführungszeichen, Quellenangabe, eventuell Kursivdruck oder Unterlegung wie in diesem Dokument). Viel häufiger werden Sie in den Naturwissenschaften aber Grafiken oder Gedankengänge/Argumentationen aus anderen Veröffentlichungen reproduzieren, um Ihre eigenen Ergebnisse zu untermauern und einzuordnen. In diesem Fall müssen Sie nicht jeden Satz, *aber jeden Sinnzusammenhang mit einer passgenauen Quellenangabe versehen*. Abbildungen, die selbst oder deren dargestellte Inhalte von anderen stammen, müssen *in der Bildunterschrift klar gekennzeichnet* werden. Wenn Sie sich daran halten, können Sie getrost einer Zukunft – sogar in der Bundespolitik – entgegensehen, ohne den Entzug eines akademischen Grades fürchten zu müssen.

9 Zum Weiterlesen

9.1 Internetverweise

- „Gute wissenschaftliche Praxis – Eine Resolution des DHV und der Fakultätentage“ in „Forschung & Lehre“ (August 2012).
- „Gute wissenschaftliche Praxis für das Verfassen wissenschaftlicher Qualifikationsarbeiten“ von 2012 auf der Internetpräsenz des Deutschen Hochschulverbandes.
- Unterlagen- und Formularsammlung der Organisch-Chemischen Grundausbildung (Abschnitt „Protokolle“) von Herrn Dr. Thomas Lehmann mit Stilratgeber und amüsant-lehrreicher Sammlung sinnloser Protokollformulierungen.
- „Kurze Anleitung für den Schriftsatz“ von Herrn Professor Klüfers

9.2 Bücher

- H. F. Ebel, C. Bliefert, *Bachelor-, Master- und Doktorarbeit – Anleitung für den naturwissenschaftlich-technischen Nachwuchs*, 4. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, **2009**.
- P. Atkins, J. Jones, L. Lavermann, *Chemical Principles*, 6. Aufl., Palgrave Macmillan, Basingstoke, **2013**.