

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis.....	I
Zusammenfassung.....	III
1 Einleitung.....	1
2 Theoretische Grundlagen.....	5
2.1 Chemische Elementarreaktionen.....	5
2.1.1 Molekularität und Zeitgesetz	5
2.1.2 Temperatur- und Druckabhängigkeit von Geschwindigkeitskonstanten	7
2.1.3 Theorie des Übergangszustandes.....	9
2.2 Chemische Thermodynamik.....	10
2.2.1 Chemisches Gleichgewicht.....	10
2.2.2 Bildungsenthalpien.....	11
2.3 Massenspektrometrie.....	13
2.3.1 Elektronenstoßionisierung	13
2.3.2 Quadrupol-Massenspektrometrie.....	14
2.4 Klassifizierung von Strömungsprozessen	16
2.4.1 Kontinuumsströmung.....	16
2.4.2 Molekularströmung.....	17
2.5 Quantenchemische Methoden	18
2.5.1 Born-Oppenheimer-Näherung	19
2.5.2 Hartree-Fock-Theorie.....	21
2.5.3 Coupled-Cluster-Theorie	24
2.5.4 Explizit-korrelierte Methoden.....	28
2.5.5 Dichtefunktionaltheorie	29
2.5.6 Composite-Verfahren: Das HEAT-Protokoll.....	32
2.5.7 Potenzialhyperflächen und Geometrieoptimierungen.....	35
2.5.8 Solvatationsmodelle.....	38
3 Aufbau und Test einer Strömungsapparatur.....	41
3.1 Einleitung	41
3.2 Experimenteller Aufbau	43
3.2.1 Strömungsrohr.....	43
3.2.2 Molekularstrahl-Probenahme.....	47
3.2.3 Massenspektrometrische Detektion	51
3.3 Charakterisierung	54
3.3.1 Strömung und Durchmischung	54
3.3.2 Druck- und Temperaturverlauf	57
3.3.3 Probenahme und Detektion.....	62

3.4	Validierung: Das Reaktionssystem $\text{NO} + \text{O}_2$	68
3.4.1	Einleitung	68
3.4.2	Herstellung der Gasmischungen	71
3.4.3	Dimerisierung von NO_2	73
3.4.4	Kalibriermessungen	75
3.4.5	Ergebnisse und Diskussion	76
3.5	Fazit und Ausblick	81
4	Bildungsenthalpien von Harnstoffderivaten	83
4.1	Einleitung	83
4.2	Methodik	85
4.2.1	Isodesmische Reaktionen	85
4.2.2	Quantenchemische Rechnungen	88
4.2.3	Fehlerbetrachtung	90
4.3	Ergebnisse und Diskussion	92
4.3.1	Methanimin und Methylamin	92
4.3.2	Harnstoffderivate	95
4.4	Fazit und Ausblick	97
5	Kondensationsreaktionen von Harnstoff unter Beteiligung von Wasser	101
5.1	Einleitung	101
5.2	Methodik	105
5.2.1	Quantenchemische Rechnungen	105
5.2.2	Fehlerbetrachtung	105
5.3	Ergebnisse und Diskussion	107
5.3.1	Bildung von Biuret	107
5.3.2	Bildung von Triuret	110
5.3.3	Bildung von Cyanursäure	113
5.4	Fazit und Ausblick	117
6	Ausblick	119
A	Anhang	121
A.1	Aufbau und Test einer Strömungsapparatur	121
A.1.1	Parameter des Massenspektrometers	121
A.1.2	Gasmischungen	121
A.1.3	Temperaturprofile im Strömungsrohr	122
A.1.4	Messdaten des Reaktionssystems $\text{NO} + \text{O}_2$	123
A.2	Bildungsenthalpien von Harnstoffderivaten	124
A.2.1	Energien der HEAT-Protokolle	124
A.2.2	Kartesische Koordinaten der stationären Punkte der HEAT-Protokolle	125
A.2.3	Harmonische Schwingungswellenzahlen und Rotationskonstanten der HEAT-Protokolle	126
A.2.4	Energien der Harnstoffderivate	127

A.2.5	Kartesische Koordinaten der Harnstoffderivate.....	128
A.2.6	Harmonische Schwingungswellenzahlen und Rotationskonstanten der Harnstoffderivate	133
A.3	Kondensationsreaktionen von Harnstoff unter Beteiligung von Wasser	136
A.3.1	Energien der stationären Punkte	136
A.3.2	Kartesische Koordinaten der stationären Punkte	138
A.3.3	Rotationskonstanten der stationären Punkte	163
A.3.4	Harmonische Schwingungswellenzahlen der stationären Punkte.....	165
Literaturverzeichnis		183
Veröffentlichungen		201

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis.....	VII
1 Einleitung	1
1.1 Thematische Hinführung	1
1.2 Problemstellung.....	6
1.3 Gang der Arbeit	11
2 Theoretische Zugänge zu einem Referenzmodell.....	15
2.1 Bedeutung von Innovationen für Unternehmen	15
2.1.1 Innovationsgrade	17
2.1.2 Bedeutung radikaler Innovationen für Organisationen.....	18
2.2 Das Unternehmen als soziales System.....	20
2.3 Subjektive Theorien als Wahrnehmungen von Interaktionsmustern.....	23
2.4 Intrapreneurship als internes Unternehmertum.....	29
2.4.1 Begriffsbestimmung des Konzeptes Entrepreneurship	29
2.4.2 Entrepreneurship innerhalb von Unternehmen	32
2.4.3 Inkrementelle Intrapreneurship-Perspektive	34
2.4.4 Radikale Intrapreneurship-Perspektiven	35
2.4.5 Verständnis von Intrapreneurship für diese Arbeit	36
2.4.6 Organisationale Rahmenbedingungen unternehmerischen Handelns	38
2.4.7 Interaktives Modell zum Corporate Entrepreneuring.....	40
3 Bedeutung der Motivation im Kontext unternehmerischer Handlungen	55
3.1 Motivation und Motive	56
3.1.1 Leistungs-, Macht- und Anschlussmotiv.....	57
3.1.2 Hoffnung und Furcht, die zwei Seiten von Motiven.....	59
3.1.3 Implizite und explizite Motive.....	61
3.1.4 Korrelation von impliziten und expliziten Motiven	62
3.1.5 Motivanregende Anreize	63
3.2 Motiv und Situation, eine Begriffsbestimmung	65
3.2.1 Erwartungshaltung und Handlungsmotivation.....	66
3.2.2 Motiv, Erwartung und Wert.....	67

3.2.3	Motive in unternehmerischen Handlungen.....	68
3.3	Motivation durch Tätigkeitsanreiz.....	70
3.4	Intrinsische Motivation als Teil der Selbstbestimmung	73
3.4.1	Individuelle Motive innerhalb der Selbstbestimmungstheorie	75
3.4.2	Intrinsische und extrinsische Motivation.....	76
3.5	Organisationale Rahmenbedingungen und individuelle Selbstbestimmung...78	
3.5.1	Die Auswirkung externer Anreize auf die Selbstbestimmtheit der Motivation	79
3.5.2	Intrinsische Motivation durch Interesse.....	82
4	Zusammenführung der theoretischen Erkenntnisse.....	87
4.1	Darstellung der Zusammenhänge der einzelnen Konzepte.....	87
4.2	Konkretisierung der Fragestellung	94
5	Methodisches Vorgehen	97
5.1	Untersuchungsdesign.....	98
5.2	Fallbeschreibung	98
5.2.1	Fallauswahl.....	98
5.2.2	Anonymisierung.....	102
5.2.3	Teilnehmende Unternehmen.....	103
5.3	Ablauf und Erhebungsinstrumente	105
5.3.1	Pre-Test.....	105
5.3.2	Vorgehen	108
5.3.3	Wahrgenommenes Handlungsangebot und tatsächlich realisierte Handlungen	108
5.3.4	Motivmessung	113
5.3.5	Motivationsfragebogen	115
5.4	Auswertung.....	117
5.4.1	Auswertung Motiverhebung.....	118
5.4.2	Auswertung der Ergebnisse des Motivationsfragebogens.....	123
5.4.3	Auswertung Dialog-Konsens-Verfahren	126
5.5	Qualitative Inhaltsanalyse nach Kuckartz	127
5.5.1	Inhaltlich-strukturierende Inhaltsanalyse.....	131
5.5.2	Entwickeln von Hauptkategorien	134
5.5.3	Induktives Bestimmen von Subkategorien am Material	135
5.6	Gütekriterien	136

6	Ergebnisdarstellung	141
6.1	Wahrgenommenes organisationales Handlungsangebot	144
6.1.1	Wahrgenommene (Top-)Management-Unterstützung	144
6.1.2	Wahrgenommene Autonomie/Ermessensfreiheit	155
6.1.3	Wahrgenommene freie Zeiteinteilung	160
6.1.4	Wahrgenommene Belohnung und Bestärkung	167
6.1.5	Wahrgenommene organisationale Grenzen	174
6.1.6	Ergebnisse der Analyse wahrgenommener organisationaler Handlungsangebote	182
6.1.7	Zwischenresümee: wahrgenommene organisationale Handlungsangebote	189
6.2	Realisierte Handlungen	190
6.2.1	Tatsächlich genutzte (Top-)Management-Unterstützung	190
6.2.2	Tatsächliche Autonomie/Ermessensfreiheit	199
6.2.3	Tatsächliche freie Zeiteinteilung	205
6.2.4	Tatsächliche Belohnung und Bestärkung	211
6.2.5	Tatsächliche organisationale Grenzen	219
6.2.6	Ergebnisse der Analyse realisierter Handlungen	228
6.2.7	Zwischenresümee: realisierte Handlungen	240
6.3	Zusammenhänge und der Einfluss auf die Selbstbestimmtheit der Motivation	242
6.3.1	Ergebnisse Motivationsausprägungen	243
6.3.2	Einfluss wahrgenommener organisationaler Handlungsangebote auf die Motivation	245
6.3.3	Einfluss tatsächlich realisierter Handlungsangebote auf die Motivation	252
6.3.4	Zusammenfassung: unternehmerische Handlungsangebote und der Einfluss auf die Selbstbestimmtheit	261
6.3.5	Einfluss von Motiven auf die Entscheidung als Intrapreneur/-in tätig zu werden	263
6.4	Zusammenführung der Ergebnisse	264
7	Zusammenfassung und Ausblick	269
8	Literaturverzeichnis	281
	Anhang	304