

Inhalt der Vorlesung

0. Einführung

- 0.1 Themen der Physikal. Chemie
- 0.2 Grundbegriffe/
Zentrale Größe: Energie
- 0.3 Molekulare Deutung der inneren
Energie $U \leftrightarrow$ Molekülstruktur,
Energieniveaus und elektromagn.
Spektrum
- 0.4 Boltzmann-Verteilung
- 0.5 Gleichverteilungssatz der
klassischen Physik $\leftrightarrow$ Freiheitsgrade

1. Eigenschaften der Gase

1.1 Das ideale Gas

- 1.1.1 Der Gaszustand
- 1.1.2 Die Gasgesetze – ideales Gas
- 1.1.3 Kinetische Gastheorie
- 1.1.4 Stoßzahl und mittlere freie Weglänge
- 1.1.5 Mischungen idealer Gase

1.2 Reale Gase

- 1.2.1 Intermolekulare Wechselwirkungen
- 1.2.2 van der Waalsgleichung
- 1.2.3 Kompressionsfaktor und Boyle-Temp.
- 1.2.4 Theorem der übereinstimmenden
Zustände

2. Der Erste Hauptsatz

2.1 Grundbegriffe der Thermodynamik

- 2.1.1 Arbeit, Wärme und **innere Energie U**
- 2.1.2 Der Erste Hauptsatz der Thermod.
- 2.1.3 Zustandsfunktionen und vollständige
Differentialle

2.2 Arbeit und Wärme

2.2.1 Volumenarbeit und Reversibilität

2.2.2 Kalorimetrie – Messung von Änderungen der inneren Energie

2.2.3 Die Enthalpie H

2.2.4 Wärmekapazitäten – Änderungen von U und H mit der Temperatur

2.2.5 Expansion eines idealen Gases ins Vakuum

2.2.6 Adiabatische Expansion eines idealen Gases

2.2.7 Zustandfunktionen und vollständige Differentiale – Teil 2

2.2.8 Joule-Thomson-Effekt

2.3 Thermochemie

2.3.1 Die Standardenthalpie

2.3.2 Hessscher Satz

2.3.3 Standard-Bildungsenthalpie

2.3.4 Kirchhoffsches Gesetz: Temperaturabhängigkeit von Reaktionsenthalpien

3. Der Zweite Hauptsatz

3.1 Zwei Formulierungen

3.2 Carnotscher Kreisprozess u. die Energetik von Maschinen

3.2.1 Teilschritte des Carnot-Zyklus

3.2.2 Wirkungsgrad von Maschinen

3.3 Die Asymmetrie natürlicher Prozesse und die Entropie S

3.3.1 Entropie und Energieverteilung

3.3.2 Thermodynamische Definition von S

3.3.3 Entropieänderung bei speziellen Prozessen

3.3.4 Entropie und Unordnung/Irreversibilität

3.3.5 Expansion eines Gas aus statistischer Sicht

3.3.6 Temperaturgleichgewicht aus statistischer Sicht

3.3.7 Statistische Definition von S

3.3.8 Nullpunksentropien einfacher Feststoffe

3.3.9 Experimentelle Bestimmung von Entropien

3.3.10 Standardreaktionsentropien

3.3.11 Entropieänderungen der Umgebung

4. Freie Enthalpie G und chemisches Potential μ

- 4.1 Definition der freien Enthalpie und Gibbs-Helmholtz-Gleichung
- 4.2 Freie Standardenthalpien
- 4.3 Eigenschaften von G
- 4.4 Die freie Energie F
- 4.5 Definition d. chemischen Potentials
- 4.6 Chemisches Potential von Reinstoffen

5. Phasendiagramme von Reinstoffen

- 5.1 Begriffsdefinitionen
- 5.2 Thermodyn. Betrachtung von Phasenumwandlungen
- 5.3 Phasendiagramme und Phasengrenzlinien
- 5.4 Beispiel-Phasendiagramme
- 5.5 Druckabhängigkeit des Schmelzpunktes
- 5.6 Berechnung von Phasendiagrammen

6. Thermodynamik einfacher Mischungen

- 6.1 Ideale Gasmischungen
 - 6.1.1 Freie Mischungsenthalpie und Daltons Gesetz
 - 6.1.2 Mischungsentropie und –enthalpie
- 6.2 Ideale flüssige Mischungen
 - 6.2.1 Chemisches Potential flüssiger Phasen
 - 6.2.2 Freie Mischungsenthalpie und das Raoult'sche Gesetz
- 6.3 Reale Mischungen – Fugazität und Aktivität
- 6.4 Kolligative Eigenschaften
 - 6.4.1 Siedepunktserhöhung und Gefrierpunktniedrigung
 - 6.4.2 Osmotischer Druck

7. Chemisches Gleichgewicht

- 7.1 Freiwilligkeit bei chem. Reaktionen
- 7.2 Minimum der freien Enthalpie und die freie Reaktionsenthalpie ΔG_R
- 7.3 Die Gleichgewichtskonstante K
- 7.4 Prinzip von LeChatelier

- 7.4.1 Einfluss des Druck auf das Gleichgewicht
- 7.4.2 Einfluss der Temperatur auf das Gleichgewicht – **van't Hoff'sches Gesetz**
- 7.4.3 Mikroskopische Interpretation des Prinzips von LeChatelier
- 7.4.4 Druckabhängigkeit von K – flüssige Mischungen, Lösungen u. reale Systeme

8. Chemische Kinetik

8.1 Definition der

Reaktionsgeschwindigkeit

- 8.1.1 Reaktionslaufzahl
- 8.1.2 Momentane Rx-Geschwindigkeit
- 8.1.3 Anfangsgeschwindigkeit
- 8.2 **Reaktionsordnung, Geschwindigkeitskonstante u. Geschwindigkeitsgesetze**

8.3 Zeitabhängigkeit der Konzentration und **Halbwertszeit**

8.4 Beeinflussung von Reaktionsgeschwindigkeiten

- 8.4.1 Oberfläche
- 8.4.2 Temperatur – das **Gesetz von Arrhenius**
- 8.4.3 Mikroskopische Interpretation des Arrheniusgesetz

8.4.3 Katalysatoren und die Theorie des aktivierten Komplexes

8.4.4 Enzymkatalyse – **Michaelis-Menten-Kinetik**

8.5 Mechanismen verschiedener Reaktionen

8.5.1 **Lindemann-Mechanismus**

8.5.2 Kettenreaktionen

9 Diffusion

9.1 Phänomenologische Beschreibung/Transportgesetze – 1. **Ficksches G.**

9.2 Zeitabhängigkeit der Konzentration **2. Ficksches Gesetz**

9.3 Transporteigenschaften idealer Gase

9.3.1 Diffusion – molekulare Interpretation des Diffusionskoeffizienten

9.4 Transportprozesse in Flüssigkeiten

9.4.1 Diffusion

9.4.1.1 Thermodynamische Ableitung des 1. Fickschen Gesetzes - **Stokes-Einstein-Gleichung**

9.4.1.2 Wahrscheinlichkeitsbetrachtung
der Diffusion – Wahrscheinlich-
keitsdichte $P(x,t)$, mittleres
Verschiebungsquadrat, Einstein-
Smoluchowski-Gleichung

10. Reale Mischphasen (binäre Mischungen)

- 10.1 Partielle molare Größen (V , μ)
- 10.2 Experimentelle Bestimmung partiell
molarer Größen (Bsp.: Volumen)
- 10.3 Gibbs-Duhem-Gleichung
- 10.4 Thermodyn. Beschreibung realer
Mischphasen – Exzessgrößen u.
Modell der regulären Lösung
- 10.5 Dampfdruckdiagramme und Hebel-
regel
- 10.6 Siedediagramme
- 10.7 Flüssig-Flüssig-Phasendiagramme
- 10.8 Schmelzdiagramme

Bücher zur Vorlesung

1. P.W. Atkins, "Physikalische Chemie", 3. Auflage, Verlag Chemie (Kap.0 – Kap.9, Kap.24.1, 24.2.2, 24.3, Kap.25)
Neu: P.W. Atkins, J. de Paula, "Physikalische Chemie", 4. Auflage, Verlag Chemie, 2006
(Kap.1-7.2, 21.1.+21.3, 22.1, 23.3.2; Kap.0 hier leider nicht mehr enthalten)
2. P.W. Atkins, J.A. Beran, "Chemie einfach alles", 2. korr. Auflage, VCH, Weinheim 1998
(Kap.7 und - teilweise – Kap.8)
3. G. Wedler, "Lehrbuch der Physikalischen Chemie" 5. Aufl., Wiley/VCH, Weinheim 2004
(als Ergänzung zum punktuellen Nachlesen)
4. T. Engel, P. Reid, "Physikalischen Chemie", Pearson, München, 2006