

# Inhalt der Vorlesung PC2 WS2011\_12

## Nachtrag PC 1

### 11. Reale Mischphasen (binäre Mischungen)

- 11.1 Partielle molare Größen ( $V$ ,  $\mu$ )
- 11.2 Experimentelle Bestimmung partiell molarer Größen (Bsp.: Volumen)
- 11.3 Gibbs-Duhem-Gleichung
- 11.4 Thermodyn. Beschreibung realer Mischphasen – Exzessgrößen u. Modell der regulären Lösung
- 11.5 Dampfdruck über Mischungen ideale Mischungen, reale Misch., ideal verdünnte Lösungen, Raoult-sches Gesetz, Henry-Gesetz
- 11.6 Aktivität und Aktivitätskoeffizient
- 11.7 Dampfdruckdiagramme und Hebelregel
- 11.8 Siedediagramme
- 11.9 Flüssig-Flüssig-Phasendiagramme
- 11.10 Schmelzdiagramme

### 12. Elektrochemie/Elektrische Leitfähigkeit

- 12.1 Eigenschaften von Elektrolytlösungen - Einleitung
- 12.2 Faradaysche Gesetze
- 12.3 Leitfähigkeit von Elektrolyten
  - 12.3.1 Ionenwanderung im elektrischen Feld
  - 12.3.2 Molare Leitfähigkeit von Elektrolyten (1. Kohlrauschsches Gesetz der unabhängigen Ionenwanderung)
  - 12.3.3 Konzentrationsabhängigkeit der spezifischen Leitfähigkeit (2. Kohlrauschsches Gesetz/Quadratwurzelgesetz)
  - 12.3.4 Schwache Elektrolyte – Bestimmung der Gleichgewichtskonstante der Dissoziation aus Leitfähigkeitsmessungen)
  - 12.3.5 Molekulare Interpretation der Parameter des 2. Kohlrausch-Gesetzes

- 12.3.5.1 Einfluss der Hydrathülle
- 12.3.5.2 Grotthuß-Mechanismus des schnellen Protonentransports
- 12.3.5.3 Interpretation von  $k$  – Debye-Hückel-Theorie der Ionenwolke
- 12.3.5.4 Elektrophoretischer Effekt
- 12.3.5.5 Relaxationseffekt

## 13 Diffusion

- 13.1 Phänomenologische Beschreibung/Transportgesetze – 1. Ficksches G.
- 13.2 Zeitabhängigkeit der Konzentration  
2. Ficksches Gesetz
- 13.3 Transporteigenschaften idealer Gase
  - 13.3.1 Diffusion – molekulare Interpretation des Diffusionskoeffizienten
  - 13.3.2 Wärmeleitfähigkeit – molekulare Interpretation des Wärmeleitfähigkeitskoeff.
  - 13.3.3 Viskosität idealer Gase – molekulare Interpretation des Viskositätskoeff.
- 13.4 Transportprozesse in Flüssigkeiten
  - 13.4.1 Viskosität – Arrhenius-Gesetz, Vogel-Fulcher-Gesetz
  - 13.4.2 Diffusion

- 13.4.2.1 Thermodynamische Ableitung des 1. Fickschen Gesetzes - Stokes-Einstein-Gleichung
- 13.4.2.2 Ionenlösungen – Einstein-Gleichung und Nernst-Einstein-Gleichung
- 13.4.2.3 Wahrscheinlichkeitsbetrachtung der Diffusion – Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(x,t)$ , mittleres Verschiebungsquadrat, Einstein-Smoluchowski-Gleichung

## PC 2 Aufbau der Materie – Einführung in die Quantenmechanik

### 1. Einleitung

- 1.1 Historische Entwicklung
- 1.2 Hinweise auf die atomistische Struktur der Materie
  - 1.2.1 Bestimmung der Avogadro-Konstante aus der Struktur von Kristallen

- 1.2.2 Bestimmung der Elementarladung – Millikan-Versuch
- 1.2.3 Masse des Elektrons
- 1.2.4 Anwendung: Massenspektrometrie
- 1.3 Versagen der klassischen Physik
  - 1.3.1 Schwarze-Körper-Strahlung
    - 1.3.1.1 Experimentelle Beobachtungen
      - Stefans Gesetz
      - Wiensches Verschiebungsgesetz
      - Spektrale Strahlungsdichte
    - 1.3.1.2 Jeans-Rayleigh-Gesetz
    - 1.3.1.3 Plancksches Strahlungsgesetz
  - 1.3.2 Photoelektrischer Effekt
    - 1.3.2.1 Experimentelle Befunde
    - 1.3.2.2 Einsteins Quanten-Theorie des photoelektrischen Effekts
    - 1.3.2.3 Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums über den photoel. Effekt
    - 1.3.2.4 Photoelektrischer Effekt und elektromagnetisches Spektrum
  - 1.3.3 Compton-Effekt
  - 1.3.4 Welle-Teilchen-Dualismus – Wellennatur des Elektrons u. DeBroglie-Beziehung

## Einschub:

## 2. Grundlagen d. Spektroskopie

### 2.1 Allgemeines

### 2.2 Absorptions- und Emissionsspektren

### 2.3 Konzentrationsabhängigkeit der Absorption – Lambert-Beer-Gesetz

### 2.4 Aufbau von Spektrometern

### 1.3.5 Atom-Spektren

### 1.3.6 Stabilität der Atome – frühe Atommodelle

### 1.3.7 Bohrsches Atommodell – Energieniveau-Schema des Wasserstoffatoms

## 3. Schrödingergleichung (SGL)

### 3.1 Plausibilitäts-Ableitung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

### 3.2 Bornsche Interpretation von $\psi^2$

## 4. Anwendung der SGL auf einfache Systeme

### 4.1 Teilchen im eindimensionalen Potentialtopf

## 4.2 Axiome der Quantenmechanik

### 4.2.1 Wellenfunktion

### 4.2.2 Bornsche Interpretation

### 4.2.3 Normierung von $\psi$

### 4.2.4 Anforderungen an erlaubte Wellenfunktionen

### 4.2.5 Operatoren, Eigenwerte und Eigenfunktionen; Erwartungswerte

### 4.2.6 Heisenbergsche Unschärferelation

## 4.3 Teilchen im Kasten (3D Potentialtopf)

## 4.4 Tunneleffekt

## 4.5 Harmonischer Oszillator

## 4.6 Starrer Rotator

### 4.6.1 Starrer Rotator mit raumfester Achse

### 4.6.2 Starrer Rotator mit raumfreier Achse

## 4.7 Das Wasserstoff-Atom

## 4.8 Drehimpuls, Bahndrehimpuls, Spin u. Gesamtdrehimpuls

# 5. Atomaufbau und Periodensystem

## 5.1 Historische Entwicklung des Periodensystems

## 5.2 Wasserstoffähnliche Atome

### 5.2.1 Einelektronen-Atome

### 5.2.2 Alkalimetalle

## 5.3 Mehrelektronen-Atome

## 5.4 Näherungsverfahren

### 5.4.1 Variationsprinzip

### 5.4.2 Hartree-Fock-Methode des selbstkonsistenten Felds

## 5.5 Energieschema von Mehrelektronen-Atomen

## 5.6 Aufbau des Periodensystems

# 6. Moleküle und chemische Bindung

## 6.1 Verschiedene Bindungstypen eine Übersicht

### 6.1.1 Ionische Bindung

### 6.1.2 Kovalente Bindung

### 6.1.3 Metallische Bindung

### 6.1.4 van der Waals Bindung

## 6.2 Kovalente Bindung

## 6.3 Born-Oppenheimer-Näherung

6.4 VB-Methode versus MO-Methode

6.5 Berechnung des  $\text{H}_2^+$ -Moleküliions nach  
der LCAO-Methode

## Literatur zur Vorlesung

1. P. Gräber, "Thermodynamik", Skript zur Vorlesung "Physikalische Chemie I", Freiburg, 2009, Teil 2
2. P. Gräber, "Elektrochemie", Skript zur Vorlesung "Physikalische Chemie I", Freiburg, 2010
3. P. Gräber, "Aufbau der Materie – Einführung in die Quantenmechanik", Skript zur Vorlesung "Physikalische Chemie II", Freiburg, 2010
4. P.W. Atkins, J. de Paula, "Physikalische Chemie, 4. Auflage, Verlag Chemie, 2006
5. G. Wedler, "Lehrbuch der Physikalischen Chemie" 5. Aufl., Wiley/VCH, Weinheim 2004
6. T. Engel, P. Reid, "Physikalischen Chemie", Pearson, München, 2006
7. Robert Eisberg, Robert Resnik: „Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles“, 2<sup>nd</sup> Edition, Wiley, 1985

