

Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC)				Stand: 18.01.2012		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
10	300	1 Semester	SoSe	4.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
PC I		V	3	90	45	250
PC II		V	3	90	45	250
GPC-Übungen		Üb	2	120	30	30
Modulverantwortlicher		Prof. Dr. Karl Kleinermanns/Prof. Dr. C. Seidel				
Beteiligte Dozenten		Die Dozenten des Instituts für Physikalische Chemie im Wechsel				
Sprache		Deutsch (Fachwörter: englisch)				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie			Pflicht	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflicht	
Lernziele und Kompetenzen		Experimentelle und theoretische Bearbeitung der physikalisch-chemischen Grundlagen (Spektroskopie/ Thermodynamik/ Kinetik)				
Inhalte		<p>Vorlesung PC I : Vom Atom zur kondensierten Materie</p> <ol style="list-style-type: none"> Motivation und historische Einleitung: Entdeckung der Elementarteilchen, Bestimmung von q/m und der Elementarladung, Anschauung zu Atomkern und Elektronenhülle. Teilchen- und Wellennatur von Materie und elektromagnetischer Strahlung: Compton-Effekt, photoelektrischer Effekt, Impuls von Lichtquanten, Lichtbeugung, De-Broglie-Beziehung, Elektronenbeugung an Kristallen, Beugung am Einfachspalt, Heisenbergsche Unschärferelation. Schrödinger-Gleichung: Teilchen im Potentialkasten, der Tunneleffekt harmonischer und anharmonischer Oszillator, interne Rotation und starrer Rotator, Art und Zahl der Freiheitsgrade. Wasserstoffatom mit empirischer Beschreibung, Bohrsches Atommodell und quantenmechanischer Behandlung. Aufbau des Periodensystems und Atomspektren: Elektronenspin und Pauli Prinzip, Termsymbole, der Grundzustand von Atomen. Intra- und intermolekulare Bindungen: Kovalente Bindung, H_2^+, Born-Oppenheimer Näherung, Hückelmodell, chemische Struktur von Molekülen, Hybridisierung und Bindungswinkel, Ionische und Metallische Bindung, Van der Waals-Bindung, reales Gases, Wasserstoffbrückenbindung, Flüssigkeit. Übergang zum Festkörper. Spektroskopie: Wechselwirkung von Materie mit elektromagnetischer Strahlung: permanentes Dipolmoment, Polarisierbarkeit. Nicht-resonante Anregung: der Raman-Effekt. Bohrsche Frequenzbedingung. Übergangswahrscheinlichkeiten. Rotations-, Schwingungs- und elektronische Übergänge, das Franck-Condon-Prinzip. Verbotene Übergänge, Chromphore Qualitativ: Umgebungseffekte, Dynamik, Jablonski-Diagramm, strahlungslose Prozesse, Fluoreszenz. Kasha-Regel, <i>energy gap rule</i> Ausblick: Spektroskopische Methoden bei Makromolekülen. <p>Vorlesung PC II: Thermodynamik und chemische Kinetik</p> <p>Thermodynamik:</p> <ol style="list-style-type: none"> Gasgesetze: Empirische Gasgesetze und das ideale Gase, reale Gase, kinetische Gastheorie, Boltzmann-Gesetz, Molwärme und Freiheitsgrade, der Gleichverteilungssatz, Wärmeleitung, reales Gas, van der Waals Gleichung, der Joule-Thompson-Effekt. 				

	<p>2. Die drei Hauptsätze der Thermodynamik: Zustandsfunktionen (innere Energie, Enthalpie, Entropie, freie Energie/Enthalpie), Arbeit, Wärme, Kreisprozesse, Wirkungsgrad.</p> <p>3. Energieformen, Energiegewinnung und Energierückgewinnung</p> <p>4. Phasengleichgewichte: Ein-Stoff-Phasengleichgewichte, Zustandsdiagramme, chemisches Potential, Aktivitäten, Mischphasen - thermodynamik.</p> <p>5. Chemische Reaktionsthermodynamik: Massenwirkungsgesetz, Nernstsche Gleichung, Gleichgewichtselektrochemie.</p> <p>Kinetik:</p> <p>1. Formale Kinetik: Reaktionsgeschwindigkeit und Geschwindigkeitsgleichung, grundlegende Messmethoden, Reaktionen erster, zweiter und dritter Ordnung.</p> <p>2. Komplexere Reaktionsmechanismen, Quasistationarität. Katalyse, Biokatalyse, Michaelis-Menten-Kinetik, fortgeschrittene Messmethoden</p> <p>3. Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten: Arrhenius Stoßtheorie, Theorie diffusionskontrollierter Reaktionen.</p> <p>Übungen</p> <p>Vertiefende Rechenübungen zu den Themen der zwei Vorlesungen. Gestellte Aufgaben werden selbständig bearbeitet und abgegeben. Die Übungsaufgaben werden gemeinsam mit der Darstellung der Lösungswege besprochen.</p>		
Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen Mathematische Methoden in der Chemie I u. PCO oder äquivalente Studienleistungen.		
Studienleistungen (u.a. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung)	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Vorlesungen und besonders an den Übungen (Teilnehmerliste, Abgabe der bearbeiteten Übungsaufgaben).		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur zum Gesamtmodul	120	benotet
Stellenwert der Note für die Endnote			10/180
Medienformen	Tageslichtprojektor, Powerpoint, Tafel, Videos, Demonstrationsexperimente		
Website	http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Physikalische_Chemie		
Literatur	<p>Umfangreiche Materialien (Videokurse, multimediales Lehrmaterial im Internet angeboten, EDV-unterstütztes Physikalisch-Chemisches Praktikum). Wissenschaftsfilme (Google: <i>Science-Forum</i> Düsseldorf).</p> <p>Fachbücher:</p> <ul style="list-style-type: none"> • P.W. Atkins, „Physikalische Chemie“, Wiley-VCH • P.W. Atkins, „Molecular Quantum Mechanics“, Oxford University Press • G. Wedler, „Lehrbuch der Physikalischen Chemie“, Verlag Chemie • W.J. Moore, D.O. Hummel, „Physikalische Chemie“, W. de Gryter • G.M. Barrow, G.W. Herzog, „Physikalische Chemie I-III, Vieweg • H. Kuhn, H.-D. Försterling, „Principles of Physical Chemistry“, Wiley. 		