

<b>Grundlagen der Physikalischen Chemie (GPC)</b>					Stand: 15.05.2018	
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
GPC I		V	3	90	45	250
GPC II		V	3	90	45	250
GPC-Übungen		Üb	2	120	30	30
<b>Modulverantwortliche:r</b>		Prof. Dr. Matthias Karg / Prof. Dr. Claus Seidel				
<b>Beteiligte Dozierende</b>		Die Dozierende der Physikalischen Chemie im Wechsel.				
<b>Sprache</b>		Deutsch (Fachwörter: englisch)				
<b>Weitere Verwendbarkeit des Moduls</b>		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Biochemie			Pflichtmodul	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Pflichtmodul	
<b>Lernziele und Kompetenzen</b>						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> <li>die experimentellen und theoretischen Grundlagen der Physikalischen Chemie in den Bereichen Spektroskopie und Thermodynamik wiedergeben,</li> <li>die erarbeiteten physikalischen Konzepte auf Probleme in der Chemie anwenden,</li> <li>thermodynamische Kenngrößen errechnen und verstehen die Zusammenhänge bei Phasenübergängen von Stoffen.</li> </ul>						
<b>Inhalte</b>						
<i>Vorlesung GPC I:</i>						
<ul style="list-style-type: none"> <li>Motivation und historische Einleitung: Entdeckung der Elementarteilchen, Bestimmung von <math>q/m</math> und der Elementarladung, Anschauung zu Atomkern und Elektronenhülle.</li> <li>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.</li> <li>Wasserstoffatom mit empirischer Beschreibung, Bohr'sches Atommodell und quantenmechanische Behandlung.</li> <li>Aufbau des Periodensystems und Atomspektren: Elektronenspin und Pauli Prinzip, Termsymbole, der Grundzustand von Atomen.</li> <li>Intra- und intermolekulare Bindungen: Kovalente Bindung, <math>H_2^+</math>, 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.</li> <li>Spektroskopie: Wechselwirkung von Materie mit elektromagnetischer Strahlung: permanentes Dipolmoment, Polarisierbarkeit. Nicht-resonante Anregung: der Raman-Effekt. Bohr'sche Frequenzbedingung. Übergangswahrscheinlichkeiten. Rotations-, Schwingungs- und elektronische Übergänge, das Franck-Condon-Prinzip. Verbotene Übergänge, Chromophore.</li> </ul>						
<i>Vorlesung GPC II:</i>						
Grundlagen der Thermodynamik						
<ul style="list-style-type: none"> <li>Rekapitulation chemische Gleichgewichte, Massenwirkungsgesetz. Bezug zwischen kinetischen und thermodynamischer Definition.</li> </ul>						

- Die drei Hauptsätze der Thermodynamik: Zustandsfunktionen (innere Energie, Enthalpie, Entropie, freie Energie/Enthalpie), Arbeit, Wärme, Kreisprozesse, Wirkungsgrad.
- Chemische Reaktionsthermodynamik, Standardreaktionsenthalpie, Verbrennungsenthalpie, Satz von Hess.

Phasenübergänge und Mischphasenthermodynamik:

- Vom idealen zum realen Gas, kinetische Gastheorie, van der Waals Gleichung, kritischer Punkt, Lennard-Jones Potential, Joule-Thompson Effekt.
- Reinstoffphasengleichgewichte, Zustandsdiagramme, Phasenübergänge, Klassifikation nach Ehrenfest, Gibbs'sche Phasenregel, Anomalie des Wassers.
- Chemisches Potential, Aktivitäten.
- Henry- und Raoult'sches Gesetz.
- Kolligative Eigenschaften, Gefrierpunktniedrigung, Siedepunkterhöhung, osmotischer Druck, Destillation.

<b>Teilnahmevoraussetzungen</b>	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC1 und PC0.		
<b>Studienleistungen</b>	Aktive und regelmäßige Teilnahme an den Vorlesungen und Übungen, schriftliche Bearbeitung von Übungsaufgaben.		
<b>Zulassungsvoraussetzung</b> zur Modulprüfung	keine		
<b>Prüfungen</b>	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
<b>Stellenwert der Note für die Gesamtnote</b>			10/180
<b>Sonstige Informationen</b>			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF. Weitere Informationen finden Sie unter folgender Webadresse: <a href="http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html">http://www.chemie.hhu.de/institute-und-lehrstuehle/institute/physikalische-chemie.html</a>			
<b>Literatur</b>			
P.W. Atkins, J. De Paula, J. J: Keeler, <i>Physikalische Chemie</i> , Wiley-VCH, 6. Aufl., Weinheim, <b>2022</b> .			
P. W. Atkins, R. Friedman, <i>Molecular quantum mechanics</i> , Oxford University Press, 5. Ed., Oxford, <b>2011</b> .			
H.-J. Freund, G. Wedler, <i>Lehrbuch der Physikalischen Chemie</i> , Wiley-VCH, 6., vollst. überarb. und aktual. Aufl., Weinheim, <b>2012</b> .			
W.J. Moore, D.O. Hummel, <i>Physikalische Chemie</i> , de Gruyter, 2., durchges. und verb. Aufl., Berlin, <b>1986</b> .			
G.M. Barrow, G.W. Herzog, <i>Physikalische Chemie I-III</i> , Vieweg, 6., ber. Aufl., Heidelberg, <b>1984</b> .			
H. Kuhn, H.-D. Försterling, D. H. Waldeck, <i>Principles of Physical Chemistry</i> , John Wiley & Sons, 2 Ed., New York, <b>2009</b> .			