



Physikalische Chemie ohne Mathematik?

Eine anschauliche Einführung in die Physikalische Chemie für Erstsemester

Christian Mayer

Lehre in der PC: Verbreitete Probleme

- Mathematik-Vorkenntnisse der Studienanfänger meistens unzureichend
- Studierende werden durch die Formel-Sprache der PC abgeschreckt
- Die meisten Zusammenhänge im Bereich der PC sind sehr abstrakt
- Abstrakte Zusammenhänge prägen sich schwer ein
- Lernarbeit in der PC wird als sehr anstrengend empfunden
- Schriftliche PC-Prüfungen werden häufig als Rechenaufgaben formuliert
- In der Summe entsteht eine intuitive Abneigung gegen das Fach (PC? Nein danke!)
- Im allgemeinen gehört die PC zu den unbeliebtesten Fächern im Kanon der Chemie

Physikalische Chemie im ersten Semester, das Konzept:

- Vorlesung (fast) ohne Mathematik: nur Grundrechenarten werden vorausgesetzt
- Inhalte und Zusammenhänge werden weitgehend anschaulich vermittelt
- Die Erklärung der Phänomene stützt sich dabei auf Modelle und Analogien
- Mathematische Beschreibungen werden erwähnt, aber nicht weiter ausgeführt
- Inhalte werden eng mit der Vorlesung „Allgemeine Chemie“ verzahnt
- Die Abschlussprüfung fragt das generelle Verständnis der Zusammenhänge ab
- Die wenigen Rechenaufgaben beschränken sich auf Grundrechenarten

Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

1.1 Das Elektron als Elementarteilchen

1.2 Die Ladung des Elektrons

1.3 Die Masse des Elektrons

1.4 Der Radius des Elektrons

1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf



Vorlesung:
Übungen:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02
Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**
Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

- 1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen**
 - 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
 - 1.2 Die Ladung des Elektrons
 - 1.3 Die Masse des Elektrons
 - 1.4 Der Radius des Elektrons
 - 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
 - 1.6 Das Wasserstoffatom
 - 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
 - 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
 - 1.9 Elektronegativität und Polarität
- 2 Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen**
 - 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
 - 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
 - 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
 - 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
 - 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen
- 3 Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen**



- 1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen**
 - 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
 - 1.2 Die Ladung des Elektrons
 - 1.3 Die Masse des Elektrons
 - 1.4 Der Radius des Elektrons
 - 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
 - 1.6 Das Wasserstoffatom
 - 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
 - 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
 - 1.9 Elektronegativität und Polarität
- 2 Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen**
 - 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
 - 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
 - 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
 - 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
 - 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen
- 3 Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen**
 - 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
 - 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
 - 3.3 Das kinetische Gasmodell
 - 3.4 Die korrigierte Gasgleichung nach van der Waals
 - 3.5 Andere Zustandsgleichungen für reale Gase
 - 3.6 Beschreibung von Flüssigkeiten



- 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen

- 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
- 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
- 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
- 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
- 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen

3

Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen

- 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
- 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
- 3.3 Das kinetische Gasmodell
- 3.4 Die korrigierte Gasgleichung nach van der Waals
- 3.5 Andere Zustandsgleichungen für reale Gase
- 3.6 Beschreibung von Flüssigkeiten
- 3.7 Beschreibung von Festkörpern
- 3.8 Übergänge zwischen den Phasen: das Phasendiagramm



Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

1.1 Das Elektron als Elementarteilchen

1.2 Die Ladung des Elektrons

1.3 Die Masse des Elektrons

1.4 Der Radius des Elektrons

1.5 **Die Doppelnatur des Elektrons** und der eindimensionale Potentialtopf

1.6 Das Wasserstoffatom

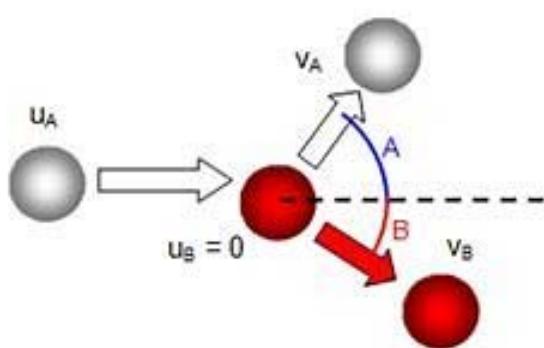
1.7 Atome mit mehreren Elektronen

1.8 Chemische Bindungen und Moleküle

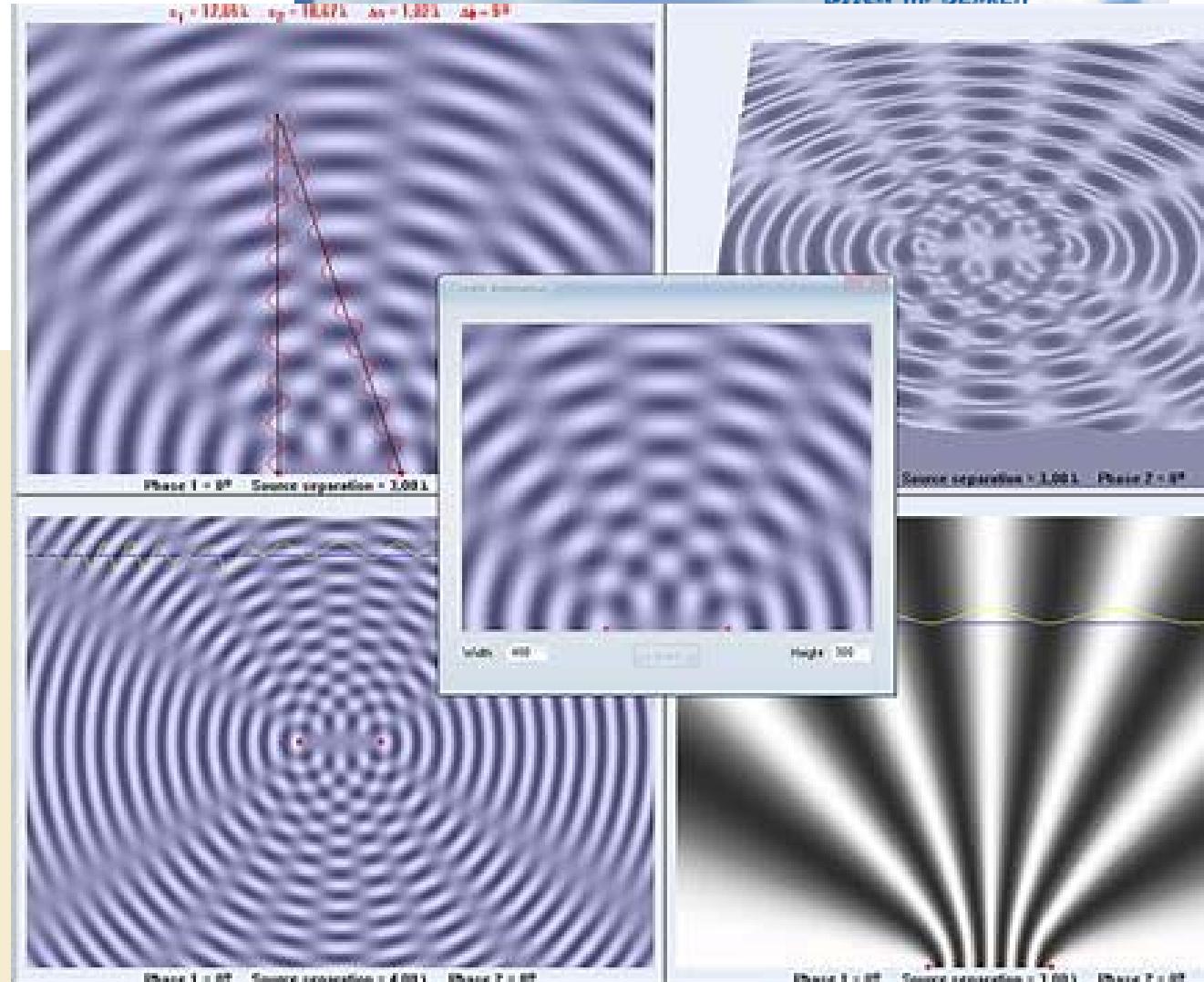
1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenverteilung in Atomen und Molekülen



Teilchen- und Wellennatur des Elektrons





Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

1.1 Das Elektron als Elementarteilchen

1.2 Die Ladung des Elektrons

1.3 Die Masse des Elektrons

1.4 Der Radius des Elektrons

1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der **eindimensionale Potentialtopf**

1.6 Das Wasserstoffatom

1.7 Atome mit mehreren Elektronen

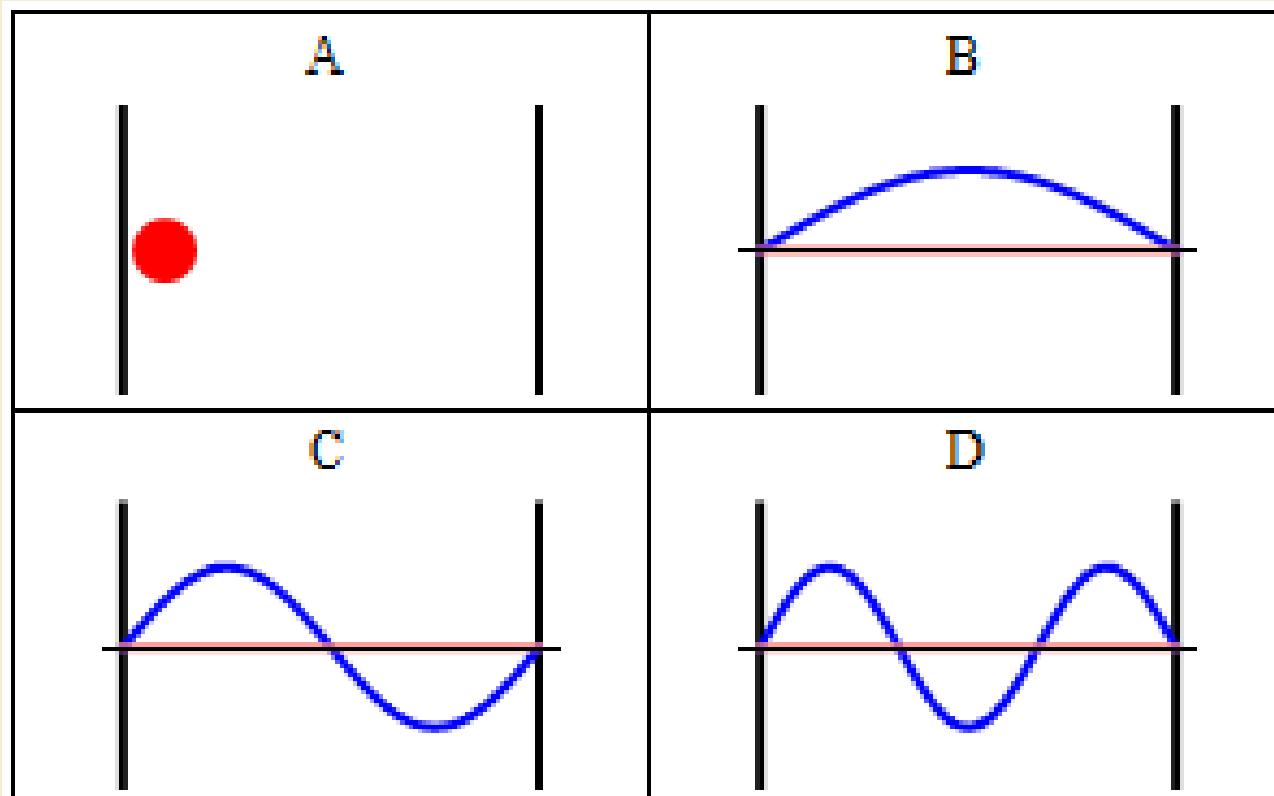
1.8 Chemische Bindungen und Moleküle

1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenkonfektions- und Atom- und Molekül-

Elektronenfunktionen im eindimensionalen Potentialtopf





Die bislang anschaulich formulierte Gleichung

$$\text{Energie des Elektrons als Teilchen} = \text{Energie des Elektrons als Welle}$$

lässt sich für die Wellenfunktion $\Psi(x)$ im eindimensionalen Potentialtopf auch mathematisch darstellen und lautet dann nach Erwin Schrödinger (ohne Herleitung und weitere Erklärung):

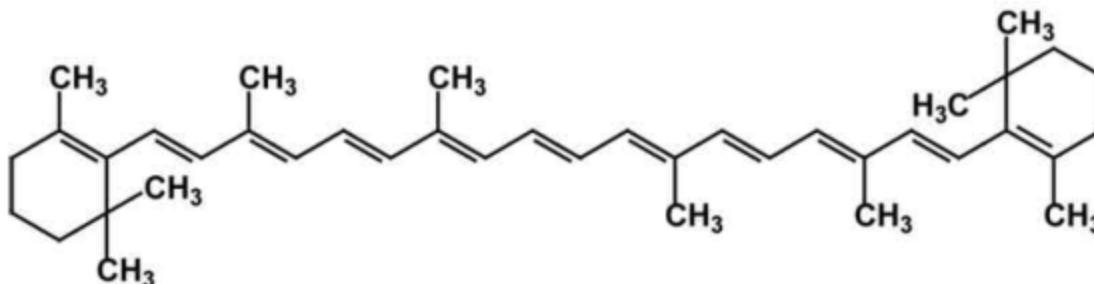
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = i\hbar \dot{\Psi}$$

Erwin Schrödinger

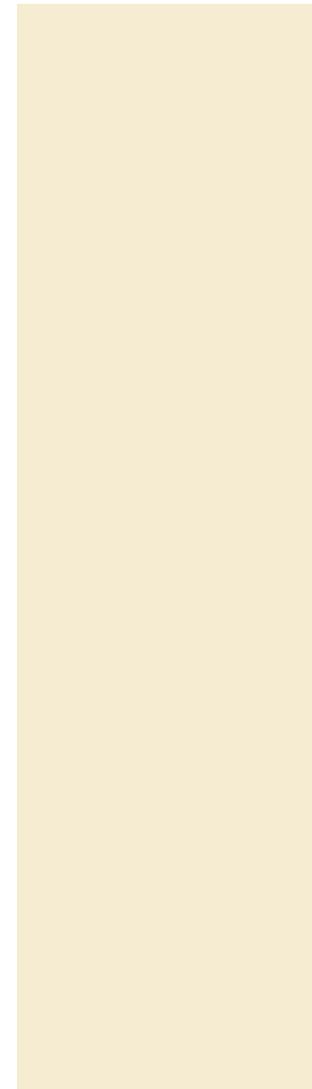


Diese sehr wichtige Gleichung (sie braucht an dieser Stelle im mathematischen Sinne noch nicht verstanden zu werden) wird als Schrödinger-Gleichung bezeichnet und besitzt die in Abbildung 5 gezeigten Lösungen $\Psi_n(x)$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$. Diesen Zuständen zugeordnet sind die Energieniveaus 1, 2, 3, ..., zwischen denen keine weiteren Zustände möglich sind. Man sagt, die Energie des Elektrons ist „gequantelt“. Der Wert für $E(n)$ ist proportional zu n^2 (s. Formel in Abb. 5 rechts), die Abstände zwischen aufeinanderfolgenden Energieniveaus werden damit mit steigendem n größer.

Der noch recht einfache Fall des eindimensional beweglichen Elektrons hat durchaus eine realistische Entsprechung in der Chemie: er beschreibt in sehr guter Näherung das Verhalten der Elektronen in Molekülen mit alternierenden einfach- und Doppelbindungen, z.B. in Butadien $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ oder in β -Carotin:



Bei einem solchen Molekül kann man durch einfaches Abzählen die Zahl der Elektronen bestimmen, die sich innerhalb des Delokalisationsgebiets befinden (pro Doppelbindung sind es zwei). Anschließend besetzt man die Orbitale des eindimensionalen Potentialtopfes mit aufsteigender Reihenfolge für jedes n jeweils doppelt. Bei dem gezeigten β -Carotin besetzen die vorhandenen 22 Elektronen des Delokalisationsgebiets damit im Grundzustand die ersten





Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

1.1 Das Elektron als Elementarteilchen

1.2 Die Ladung des Elektrons

1.3 Die Masse des Elektrons

1.4 Der Radius des Elektrons

1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf

1.6 **Das Wasserstoffatom**

1.7 Atome mit mehreren Elektronen

1.8 Chemische Bindungen und Moleküle

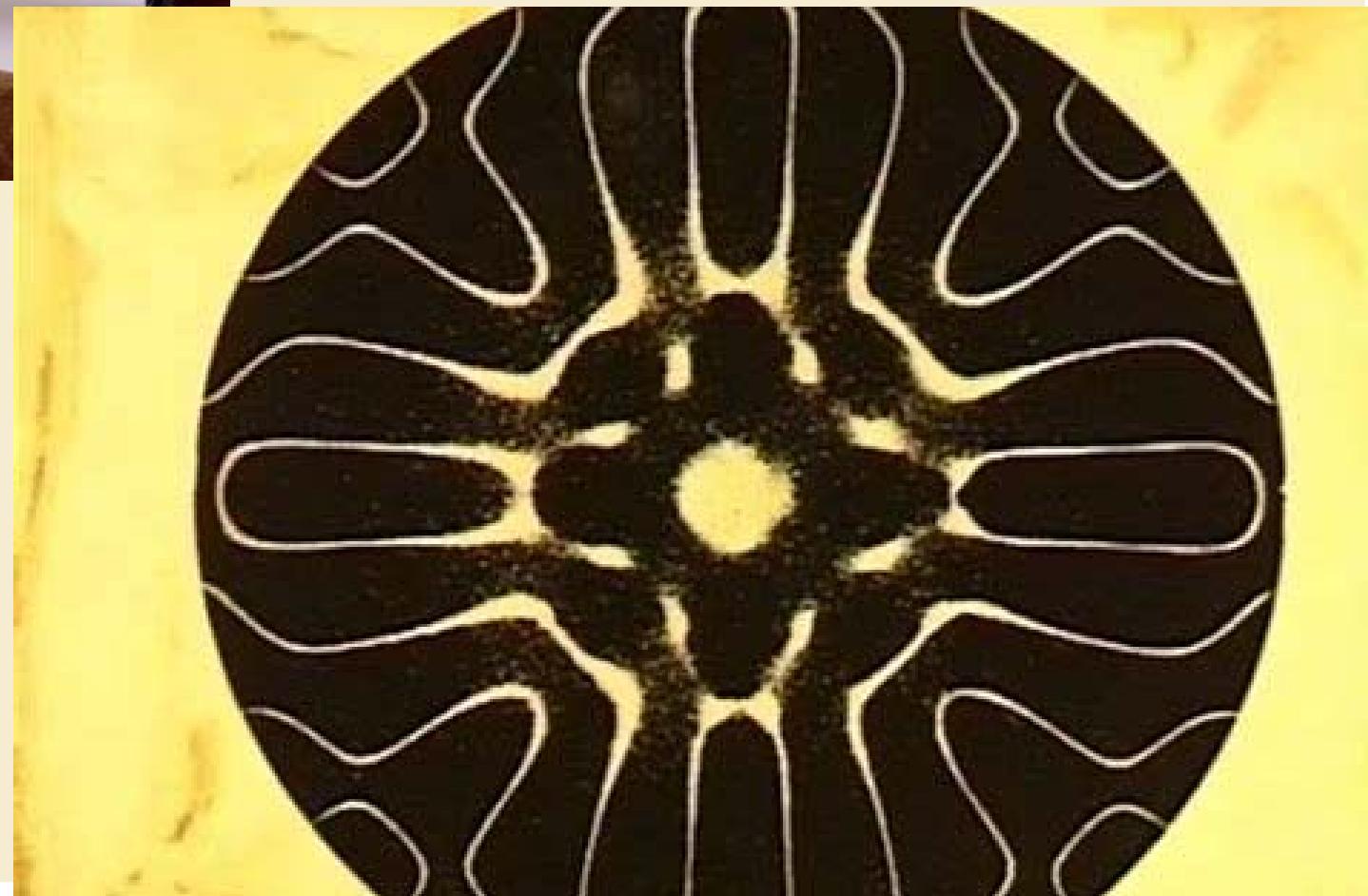
1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenverteilung in Atomen und Molekülen



Schwingungsfunktionen in zwei Dimensionen: Chladny-Figuren



Abstände zwischen $E(n)$ und $E(n+1)$ beim Potentialtopf mit steigendem n immer größer werden, so werden sie beim Wasserstoff immer kleiner. Der Grenzwert von E für n gegen unendlich wird beim Wasserstoff Ionisierungsenergie genannt.

Die Energie ist beim Wasserstoff (im Gegensatz zu allen anderen Elementen) völlig unabhängig von den weiteren Quantenzahlen, obwohl die Wellenfunktionen sehr unterschiedlich aussehen können. Man nennt solche Zustände mit unterschiedlicher Wellenfunktion aber gleicher Energie **entartet**. Ein Beispiel für entartete Zustände wären also die Wellenfunktionen mit den Quantenzahlsätzen $(2,0,0,-1/2)$ und $(2,1,-1,-1/2)$. Wie lassen sich die verschiedenen Zustände nun anschaulich darstellen? Am besten gelingt das, indem man die Bereiche, innerhalb derer die Wellenfunktion einen bestimmten Betrag besitzt, räumlich abbildet. In Abbildung 6 ist dies für die Wellenfunktionen mit den Quantenzahlen $n = 1$ bis 7 , für $l = 0$ bis 2 und für $m = 0$ bis 2 zeichnerisch umgesetzt worden.

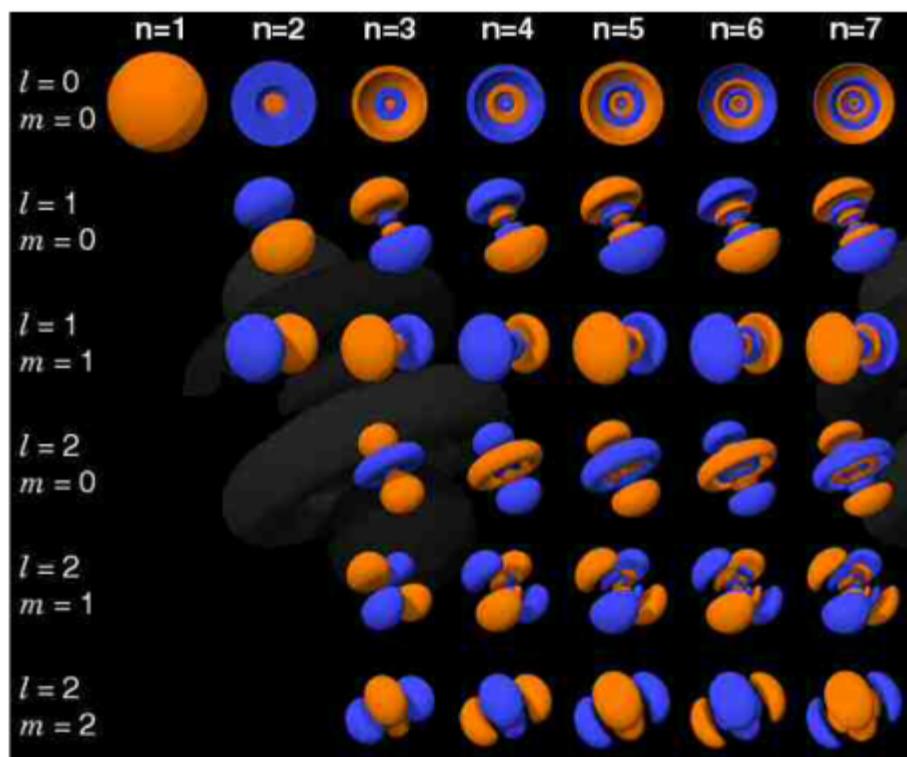


Abb. 6: Darstellung der elektronischen Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms für die Quantenzahlen $n = 1$ bis 7 , für $l = 0$ bis 2 und für $m = 0$ bis 2 . Aus Gründen der Vergleichbarkeit sind alle Orbitale in gleicher Größe dargestellt (ansonsten müsste die Größe mit der Quantenzahl n ansteigen). Der Atomkern befindet sich jeweils im Schwerpunkt jeder Orbitalstruktur. Die Farbe Orange bedeutet ein positives, die Farbe Blau ein negatives Vorzeichen der Wellenfunktion (aus <http://chemlinks.beloit.edu/Stars/pages/orbitals.html>).

Die räumlichen Strukturen, die durch die drei Quantenzahlen n , l und m festgelegt werden, heißen **Orbitale**. Grob zusammenfassend kann man sagen, dass im Wasserstoffatom die



Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

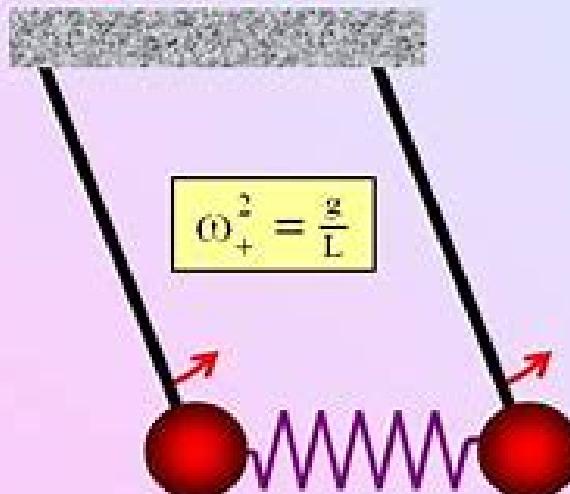
Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

- 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
- 1.2 Die Ladung des Elektrons
- 1.3 Die Masse des Elektrons
- 1.4 Der Radius des Elektrons
- 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
- 1.6 Das Wasserstoffatom
- 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
- 1.8 **Chemische Bindungen und Moleküle**
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

Veranschaulichung der Normalmoden $\xi_{\pm} = \frac{1}{2}(\varphi_1 \pm \varphi_2)$

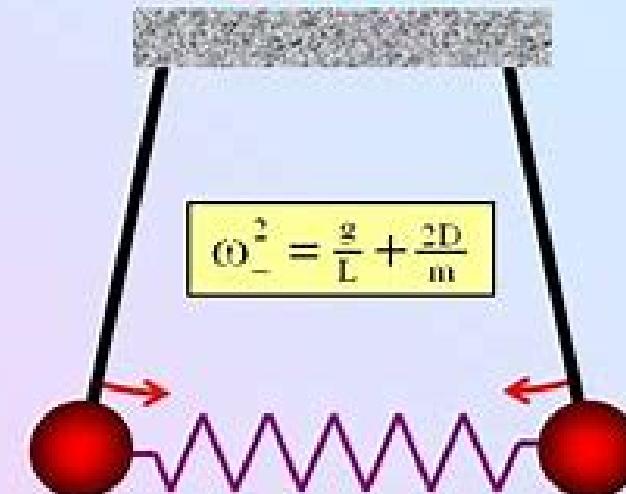
ξ_+ -Mode



$$\omega_+^2 = \frac{g}{L}$$

$$\varphi_1 = \varphi_2, \xi_- = 0$$

ξ_- -Mode



$$\omega_-^2 = \frac{g}{L} + \frac{2D}{m}$$

$$\varphi_1 = -\varphi_2, \xi_+ = 0$$

Überlagerung der Moden \Rightarrow Schwebung \rightarrow Demo-Experiment

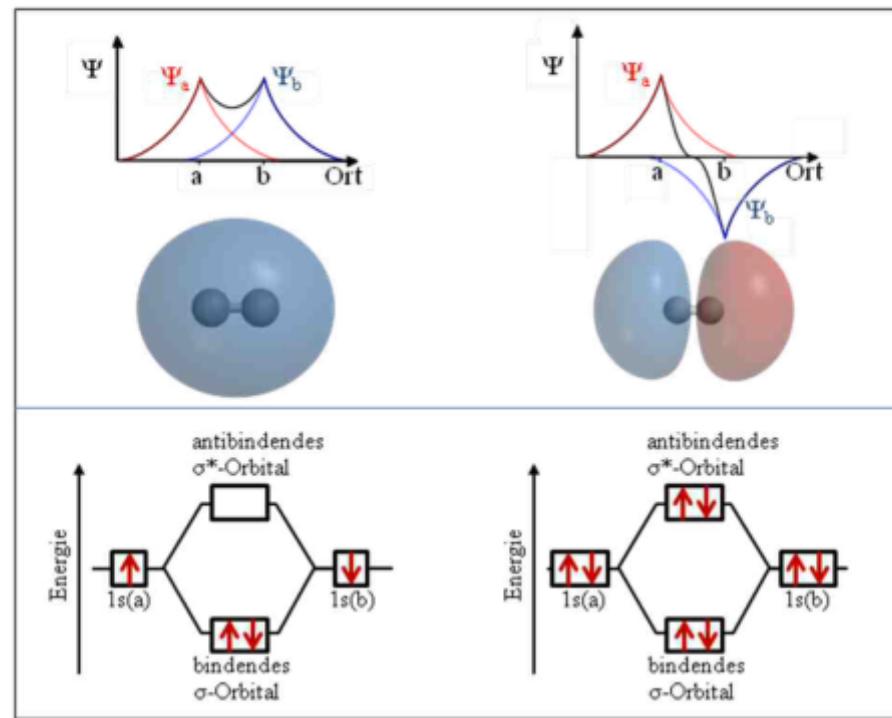
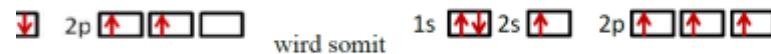


Abb. 9: Darstellung von bindenden (links oben) und antibindenden Molekülorbitalen (rechts oben) im Wasserstoffmolekül H_2 . Das Energiediagramm links unten veranschaulicht die Bildung eines bindenden σ -Molekürlitals im Fall von Wasserstoff H_2 . Das Diagramm rechts unten verdeutlicht die Situation in einem fiktiven Helium-Molekül He_2 , bei dem neben dem bindenden σ -Molekürlital auch das antibindende σ^* -Molekürlital besetzt würde. Zweiatomiges Helium ist demzufolge nicht stabil.

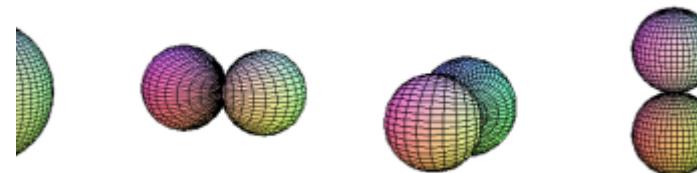
Die hohe Elektronendichte des bindenden σ -Orbitals im Bereich zwischen den Kernen bewirkt, dass sich anziehende elektrostatische Wechselwirkungen Kern-Elektron-Kern ausbilden können, es hält also das Molekül zusammen (deswegen „bindend“). Da das bindende σ -Orbital die niedrigere Energie besitzt, wandern die zwei Elektronen des Wasserstoffmoleküls beide (mit unterschiedlichen Spins) in diese Position. Damit verbunden ist ein Energiegewinn, der den gebundenen Zustand begünstigt. Zur Trennung des Moleküls muss Energie aufgebracht werden.

Das antibindende σ^* -Orbital weist am Ort zwischen den Kernen die Elektronendichte Null auf. Damit dominiert hier die abstoßende elektrostatische Wechselwirkung Kern-Kern, dazuhin ist es energetisch ungünstiger. Bei einem fiktiven Helium-Molekül (Abb. 9 unten rechts) muss, wegen der Zahl von vier Elektronen, auch dieses σ^* -Orbital doppelt besetzt sein. Dadurch wird sowohl der Energiegewinn als auch die anziehende Wechselwirkung des bindenden σ -Orbitals kompensiert, so dass dieses Molekül insgesamt nicht stabil ist.

Grundsätzlich sind alle ursprünglichen Atomorbitale nach der Bildung des Moleküls verschwunden, alle insgesamt vorhandenen Elektronen werden auf die neu gebildeten Molekülorbitale verteilt. Ist das Niveau der Atomorbitale vor der Bildung eines gemeinsamen Mole-

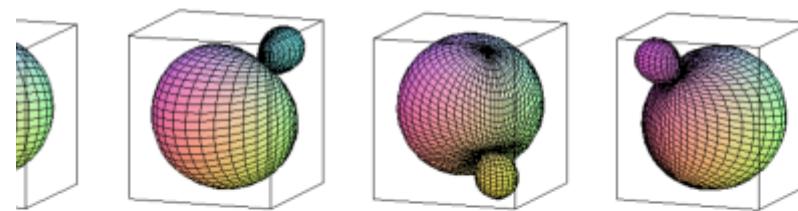


Bei diesem Vorgang kommt einer gewissen Energieerhöhung gleich, die allerdings mildert wird, dass ein nach der ersten Hundschen Regel („bus seat rule“) günstig unpaarigen Spins entsteht. Die vier nunmehr halbbesetzten Orbitale sind in grau dargestellt.



ing der vier an der sp^3 -Hybridisierung des Kohlenstoffs beteiligten Orbitale 2s, 2p_x, 2p_y und 2p_z (siehe).

erfolgt nun die **Hybridisierung**, eine Art Vermischung (oder mathematisch Bildung von Linearkombinationen) des s- mit den drei p-Orbitalen. Dadurch entstehen in gleicher Anzahl, aber mit völlig neuer Form, Symmetrie und Orientierung:



ung der vier aus der sp^3 -Hybridisierung des Kohlenstoffs resultierenden Hybridorbitale. Die sp^3 -Hybridorbital folgt den vier Raumdiagonalen eines Würfels oder – wenn man nur die Ecken der Orbitale betrachtet – den Ecken eines Tetraeders (Quelle: Chemgapedia).

, wiederum jeweils halbbesetzten Orbitale zeigen vom Kern aus zu den Ecken hin. Mit ihrer Hilfe lässt sich nun zwangsläufig die Bildung des bekannten Methanmoleküls erklären: jedes einzelne sp^3 -Hybridorbital überlappt mit jeweils einem s-Orbital des Wasserstoffatoms, wodurch eine tetraedrische Molekülgeometrie mit vier völlig neuen Bindungen entsteht. Das Ergebnis kommt den tatsächlich vorhandenen vier Bindungen, die sich gemäß dem MO-Modell formulieren lassen, sehr nahe. Festzuhalten ist, dass es sich sowohl bei der Promotion als auch bei der Hybridisierung um Prozesse handelt, die lediglich postuliert werden, um den VB-Ansatz zu „retten“. Ein großer Mangel, der darin besteht, dass das VB-Modell überwiegend auf Atomebene basiert, die eigentlich nicht mehr existieren, bleibt bestehen. Viele Molekülgeometrien



Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung:

Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Übungen:

Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: **Mittwoch, den 11. Oktober 2017**

Ende der Vorlesung: **Mittwoch, den 31. Januar 2018**

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

- 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
- 1.2 Die Ladung des Elektrons
- 1.3 Die Masse des Elektrons
- 1.4 Der Radius des Elektrons
- 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
- 1.6 Das Wasserstoffatom
- 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

Beginn der Vorlesung: Mittwoch, den 11. Oktober 2017

Ende der Vorlesung: Mittwoch, den 31. Januar 2018

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

- 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
- 1.2 Die Ladung des Elektrons
- 1.3 Die Masse des Elektrons
- 1.4 Der Radius des Elektrons
- 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
- 1.6 Das Wasserstoffatom
- 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

2 Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen

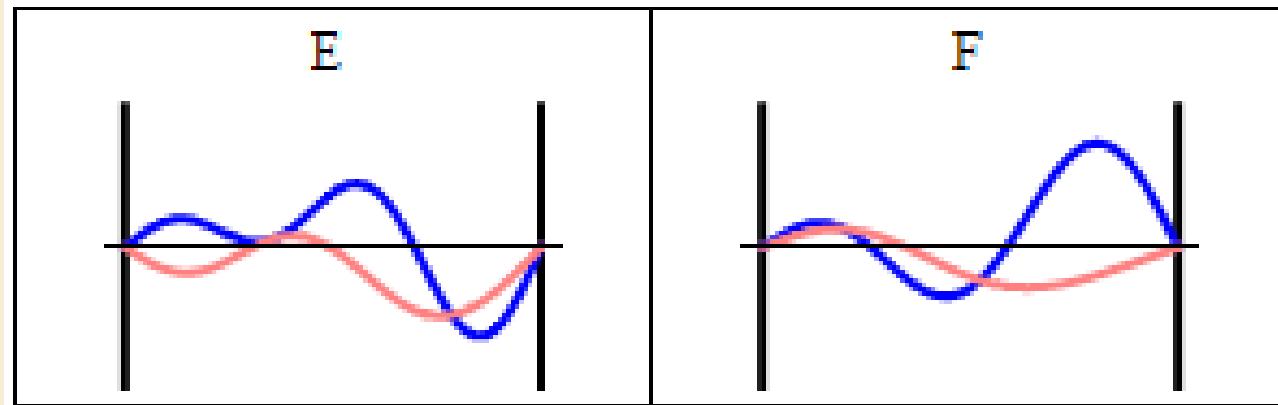
- 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
- 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
- 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
- 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
- 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen

3 Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen

- 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
- 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
- 3.3 Das kinetische Gasmodell
- 3.4 Die komplizierte Gleichung nach van der Waals



Strahlungsindizierte Übergänge zwischen Elektronenfunktionen



Beginn der Vorlesung: Mittwoch, den 11. Oktober 2017

Ende der Vorlesung: Mittwoch, den 31. Januar 2018

1 Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen

- 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
- 1.2 Die Ladung des Elektrons
- 1.3 Die Masse des Elektrons
- 1.4 Der Radius des Elektrons
- 1.5 Die Doppelnatur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf
- 1.6 Das Wasserstoffatom
- 1.7 Atome mit mehreren Elektronen
- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

2 Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen

- 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
- 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
- 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
- 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
- 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen

3 Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen

- 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
- 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
- 3.3 Das kinetische Gasmodell
- 3.4 Die komplizierte Gleichung nach van der Waals



... Atome mit mehreren Elektronen

- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen

- 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
- 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
- 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
- 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
- 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen

3

Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen

- 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
- 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
- 3.3 Das kinetische Gasmodell
- 3.4 Die korrigierte Gasgleichung nach van der Waals
- 3.5 Andere Zustandsgleichungen für reale Gase
- 3.6 Beschreibung von Flüssigkeiten
- 3.7 Beschreibung von Festkörpern
- 3.8 Übergänge zwischen den Phasen: das Phasendiagramm



... Atome mit mehreren Elektronen

- 1.8 Chemische Bindungen und Moleküle
- 1.9 Elektronegativität und Polarität

2

Die Elektronenspektroskopie an Atomen und Molekülen

- 2.1 Grundlagen der Spektroskopie
- 2.2 Elektronenspektroskopie am eindimensionalen Potentialtopf
- 2.3 Elektronenspektroskopie am Wasserstoffatom
- 2.4 Elektronenspektroskopie an Atomen mit mehreren Elektronen
- 2.5 Elektronenspektroskopie an Molekülen

3

Das Zusammenwirken von Atomen und Molekülen

- 3.1 Der makroskopische Zustand von Materie
- 3.2 Zustandsgleichung für Gase: die ideale Gasgleichung
- 3.3 **Das kinetische Gasmodell**
- 3.4 Die korrigierte Gasgleichung nach van der Waals
- 3.5 Andere Zustandsgleichungen für reale Gase
- 3.6 Beschreibung von Flüssigkeiten
- 3.7 Beschreibung von Festkörpern
- 3.8 Übergänge zwischen den Phasen: das Phasendiagramm

Nach der kinetischen Gastheorie besteht der Druck eines Gases aus der Summe aller Kräfte (pro Flächeneinheit), die durch auf eine Fläche aufprallende Gasteilchen (bzw. durch deren Impulsänderung) ausgeübt werden (Abb. 21).

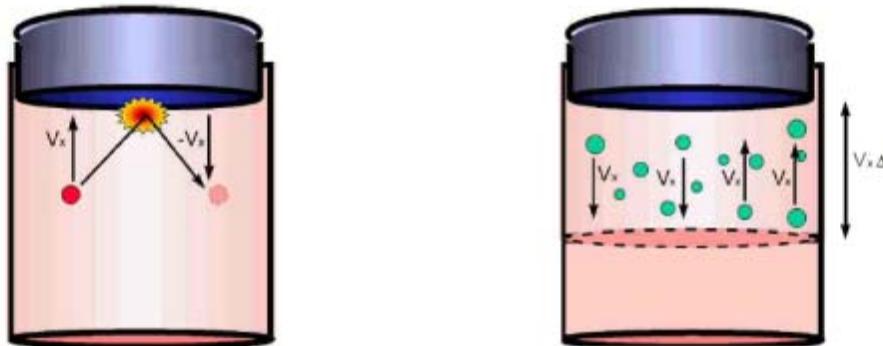


Abb. 21: Links: schematische Darstellung der Impulsänderung bei dem Auftreffen eines Gasteilchens auf der Gefäßwand. Viele solche Stöße führen in der Summe zum Entstehen einer messbaren, dem Gasdruck zugeordneten Kraft. Rechts: Die Geschwindigkeitskomponente v_x der Teilchen bestimmt nicht nur die Größe der Impulsänderung, sondern auch die Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit auf die Wand stoßen. Daher geht die Geschwindigkeit der Teilchen bei der Berechnung des Drucks insgesamt quadratisch ein.

Dabei wird zunächst davon ausgegangen, dass alle Teilchen die gleiche Geschwindigkeitskomponente v_x aufweisen. Diese Geschwindigkeitskomponente bestimmt zum einen die Heftigkeit der Stöße, zum anderen, wie viele Gasteilchen pro Zeiteinheit auf die Wand prallen. Insgesamt hängt der Druck damit vom Quadrat der Geschwindigkeitskomponente v_x ab. Führt man nun ein mittleres Geschwindigkeitsquadrat c^2 ein, (mit $v_x^2 = 1/3 c^2$) so erhält man für den an dem beweglichen Kolben spürbaren Druck die Gleichung:

$$P = 1/3 M c^2 (n/V)$$

oder, in der Schreibweise der idealen Gasgleichung:

$$P V = 1/3 n M c^2$$

Vorlesung PC I

Einführung in die Physikalische Chemie

für Studierende der Bachelor-Studiengänge
„Chemie“ und „Water Science“

Vorlesung: Mittwoch, 08:00 bis 10:00, S04 T01 A02
Übungen: Dienstag, 09:00 bis 10:00, S04 T01 A02

Beginn der Vorlesung: Mittwoch, den 11. Oktober 2017
Ende der Vorlesung: Mittwoch, den 31. Januar 2018

- 1 **Chemie: die Physik der Elektronen in Atomen und Molekülen**
 - 1.1 Das Elektron als Elementarteilchen
 - 1.2 Die Ladung des Elektrons
 - 1.3 Die Masse des Elektrons
 - 1.4 Der Radius des Elektrons
 - 1.5 Die Doppelnatrur des Elektrons und der eindimensionale Potentialtopf



Klausur vom 21.3.2018

- a) Skizzieren Sie die Form der im Grundzustand dieses Systems besetzten Elektronenfunktionen in einem einfachen Diagramm. Beschriften Sie das Diagramm und benennen Sie wichtige Punkte.
- b) Skizzieren Sie in einem zweiten Diagramm die dazugehörigen Funktionen, welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten beschreiben.
- c) Versuchen Sie, in einem dritten Diagramm die zeitlichen Entwicklungen der in Aufgabenteil a) gezeigten Funktionen anzudeuten. Zeichnen Sie dazu jede gezeigte Funktion zu drei verschiedenen Zeitpunkten.
- 15 Punkte
- 2) Diskutieren Sie den Wahrheitsgehalt folgender Aussagen:
- Ein Orbital beschreibt den dreidimensionalen Raum, in dem sich ein Elektron aufhält.
 - Ein Orbital beschreibt eine Wellenfunktion, die einem elektronischen Zustand zugeordnet ist.
 - Ein Wasserstoffatom besitzt ein s-Orbital aber kein p-Orbital.
- 15 Punkte
- 3) Angenommen, Sie messen ein Elektronenspektrum an einem einfachen Wasserstoffmolekül H₂.
- Können Sie aus dem Elektronenspektrum den Energieunterschied zwischen dem bindenden und dem antibindenden Orbital ableiten? Wie würden Sie dazu vorgehen?
 - Inwieweit können Sie aus dem gegebenen Elektronenspektrum den elektronischen Besetzungszustand im Grundzustand des Moleküls ableiten?
- 15 Punkte
- 4) Im kinetischen Gasmodell wird der Druck eines Gases über die Stöße der Gasteilchen mit den Behälterwänden interpretiert. Warum ist nach diesem Modell...
- der Druck proportional zur Masse der Teilchen

Physikalische Chemie ohne Mathematik?

Eine anschauliche Einführung in die Physikalische Chemie für Erstsemester

Erfahrungen

- + Vorlesung ist insgesamt wesentlich beliebter als die Vorgängerversion
- Inhaltlich ist sie allerdings „flacher“ geworden
- + Bildhafte Analogien bleiben im Gedächtnis, die Ideen „bleiben hängen“
- Studierende fokussieren manchmal sehr auf Analogien oder bildhafte Darstellungen
- + Studierende gewinnen ein anschauliches Verständnis von abstrakten Phänomenen
- + Die Durchfallquote bei der schriftlichen Prüfung sinkt
- Die vergleichende Bewertung von Prüfungsleistungen ist recht subjektiv
- Der Schritt zur mathematischen Beschreibung wird lediglich aufgeschoben
- + Die negative Grundeinstellung zur PC schwindet,
Studierende stehen dem Fach aufgeschlossener gegenüber