

Physikalische Chemie I

Elstner/Kappes

Organisatorisches

Marcus Elstner, Gesa Lüdemann, Tino Wolter
Physikalische Chemie
<http://www.ipc.uni-karlsruhe.de/tcb>

marcus.elstner@kit.edu, gesa.luedemann@kit.edu, tino.wolter@kit.edu

Mi 9.45-11.15 10.50, grosser HS und Fr 9.45 - 11.15 Criegee HS
UND Do., 15.45-17.15 Gr. HS Chemie.

Skript, Übungsblätter: <https://studium.kit.edu/>
passwd: pcI-2012

Übungen: Gesa Lüdemann, Tino Wolter

[Di, 17.30-19.00 HSI und HSII](#)

5 Tutorien: werden in der ersten Übung angekündigt

1. Klausur: ca. 7.12 zur Thermodynamik

2. Klausur: Semesterende zur Kinetik

Schein = 1.+2. Klausur + Übungen (genaueres in der Übung)

Modulabschlussprüfung (mündl.) : Ende September - Anfang Oktober
Anmeldung mit PC-Praktikumsschein

'Konzept' der Veranstaltung

Vorlesung: Skript im Studienportal: V1.pdf, V2.pdf

Übung: a) Vertiefung wichtiger Konzepte der Vorlesung
b) Anwendungsbeispiele, Lösen einfacher Aufgaben
c) Diskussion der Aufgabenblätter

Tutorien: Rechnen eines Teils der Aufgaben der Übungsblätter
Hilfestellung der Tutoren bei der Lösung

Nachbereitung: Lerngruppen

- Konzepte wiederholen und verstehen
- Zusammenfassung des Skriptes: Formelsammlung, Konzepte
- restliche Übungsaufgaben rechnen

Das kontinuierliche Mitarbeiten ist essentiell!!

Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Übungen ist ein Garant für den Erfolg in der Abschlussprüfung!

PC-Note

1.0

2.0

3.0

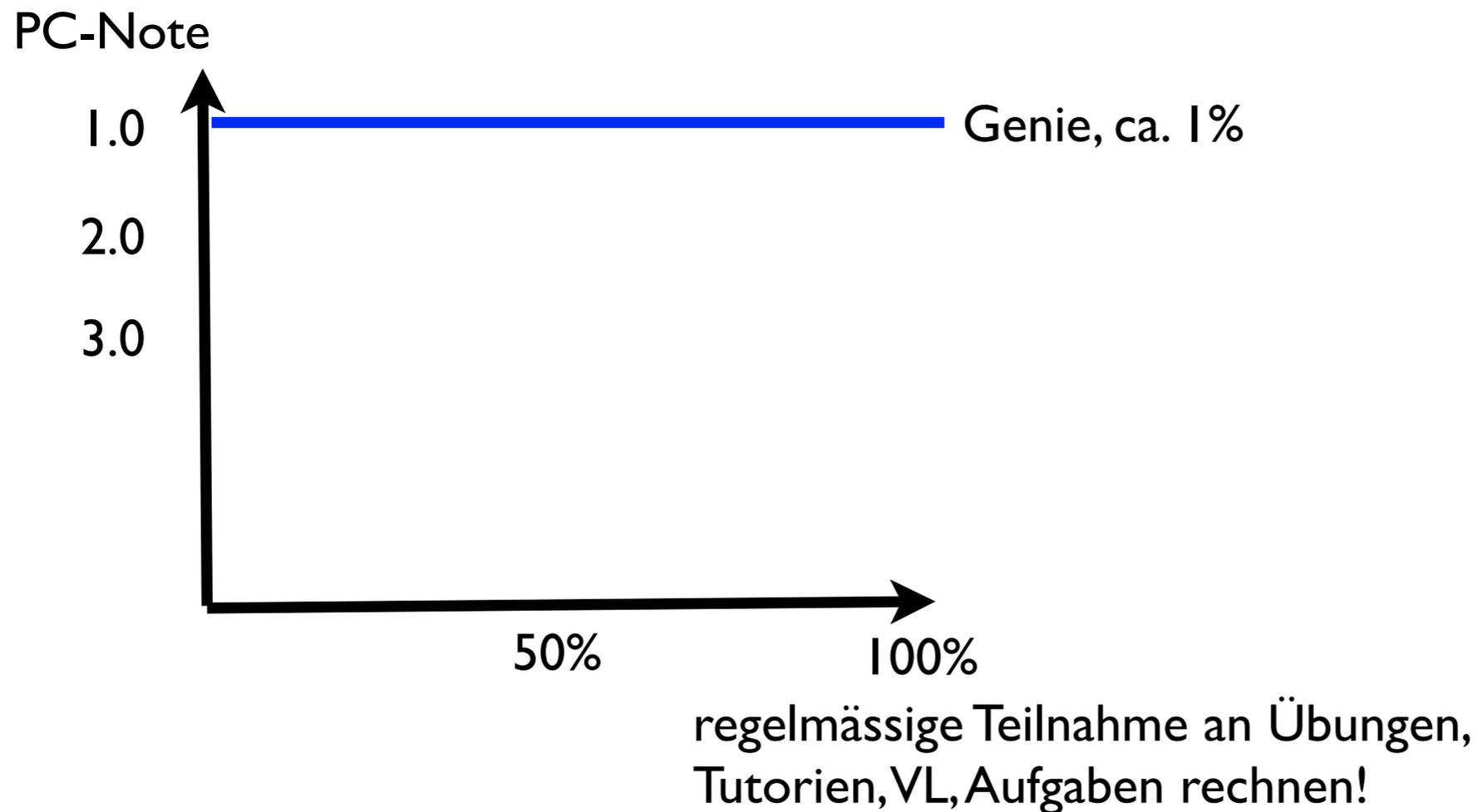
50%

100%

regelmässige Teilnahme an Übungen,
Tutorien, VL, Aufgaben rechnen!

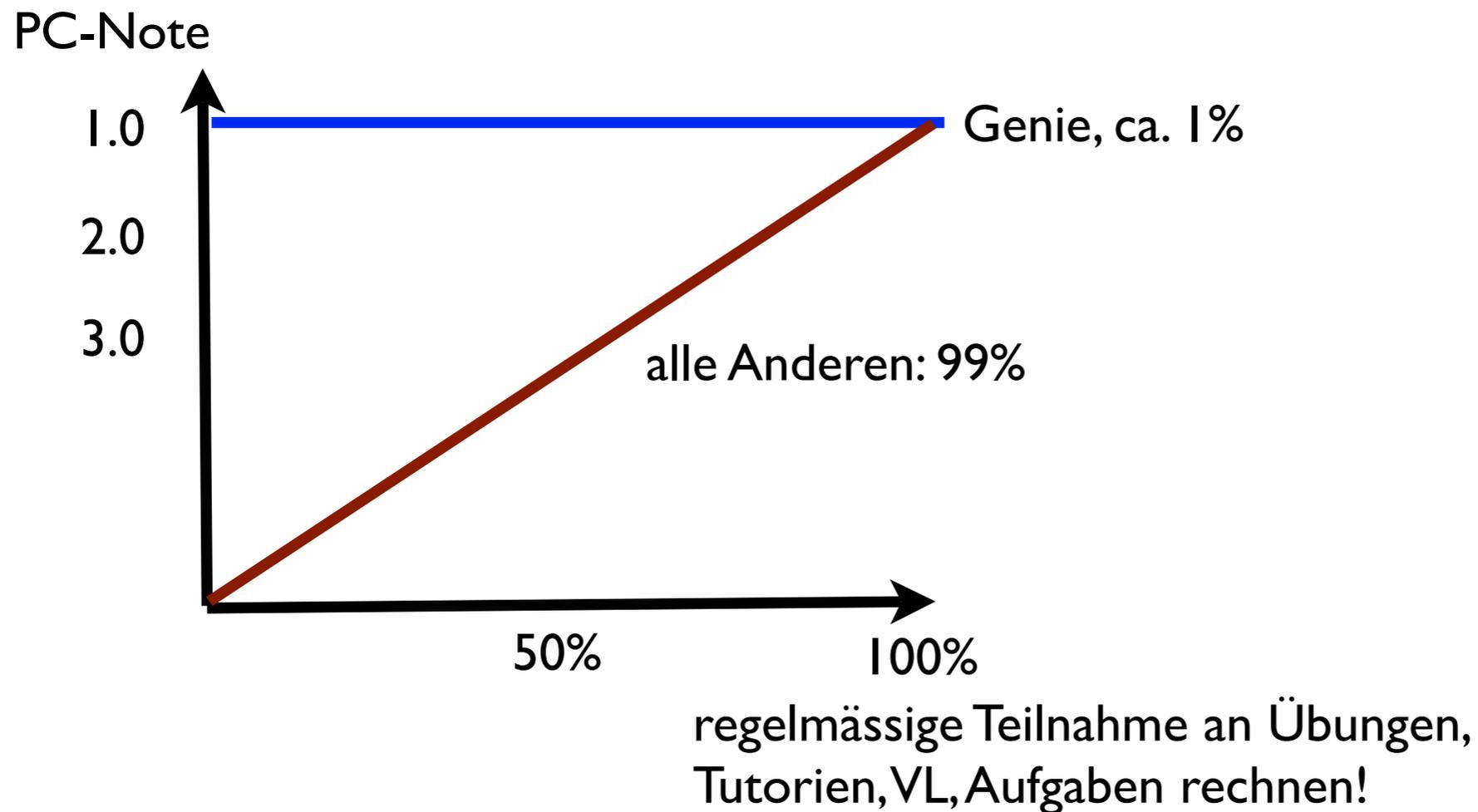
Das kontinuierliche Mitarbeiten ist essentiell!!

Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Übungen ist ein Garant für den Erfolg in der Abschlussprüfung!



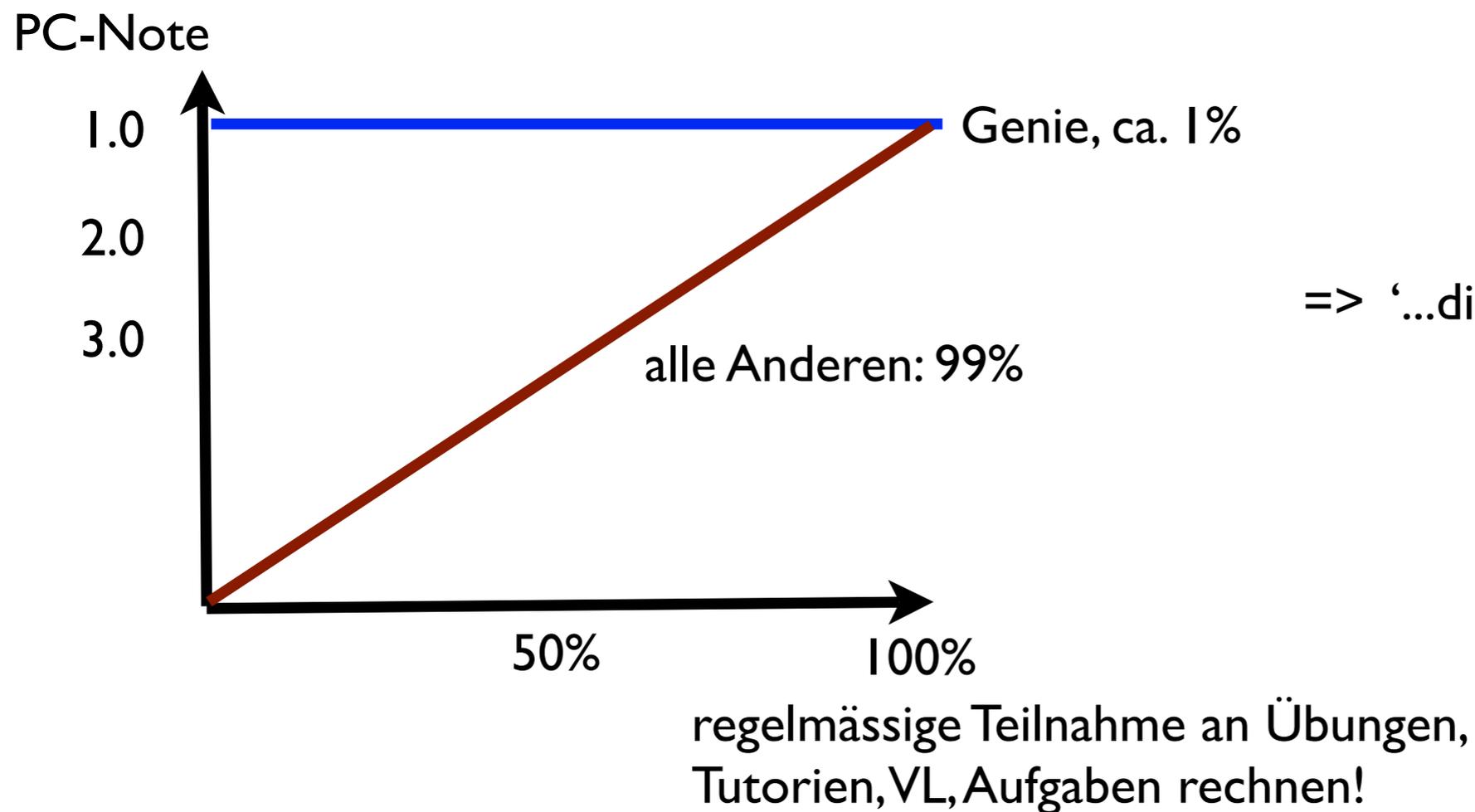
Das kontinuierliche Mitarbeiten ist essentiell!!

Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Übungen ist ein Garant für den Erfolg in der Abschlussprüfung!



Das kontinuierliche Mitarbeiten ist essentiell!!

Aktive, regelmäßige Teilnahme an den Übungen ist ein Garant für den Erfolg in der Abschlussprüfung!



=> '...die PC verstehe ich einfach nicht'
GIBT ES NICHT!

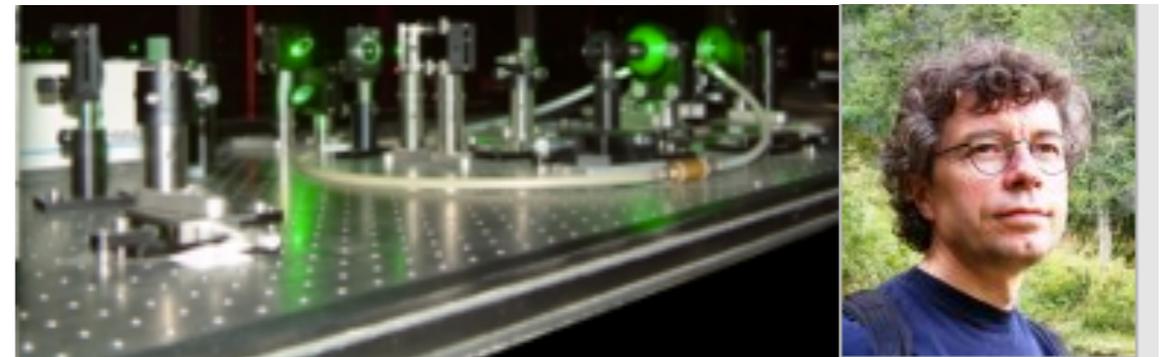
Die Arbeitsgruppen der PC

<http://www.ipc.kit.edu/>

AG Schuster: PC kondensierter Materie



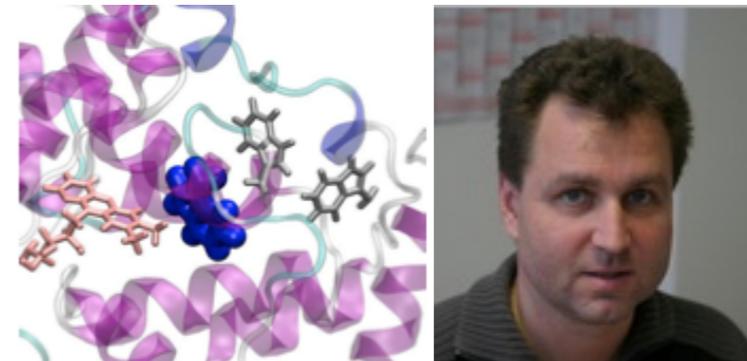
AG Olzmann: Molekulare PC



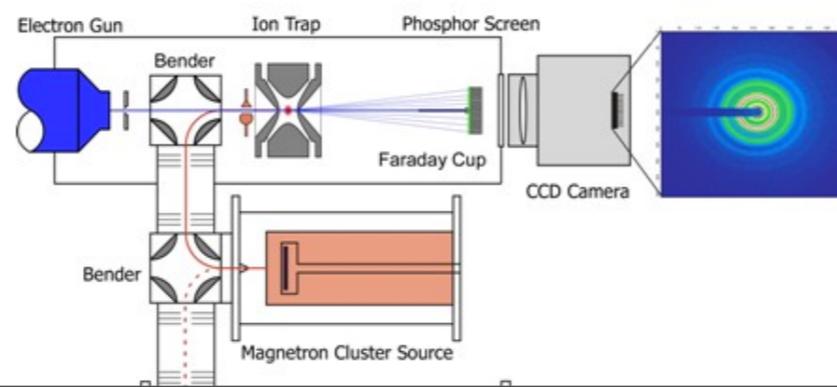
AG Klopfer: Theoretische Chemie



AG Elstner: Theoretische Chemische Biologie



AG Kappes: PC mikroskopischer Systeme

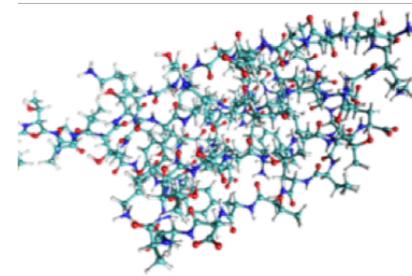


Mit der PC assoziierte Arbeitsgruppen

Center for Functional Nanostructures (CFN): Dr. Christoph Jacob www.ipc.kit.edu/cfn-ysg/



Theoretische Chemie



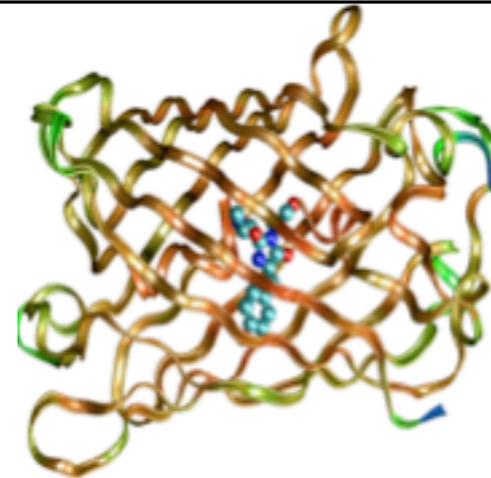
CFN

Angewandte Physik: Prof. Ulrich Nienhaus

www.aph.kit.edu/nienhaus/21_170.php



Biophysik



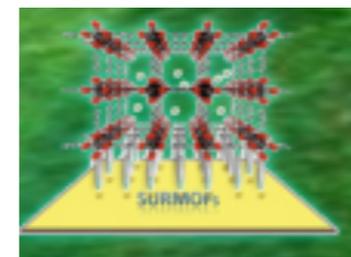
Physik

Institut f. Funktionelle Grenzflächen : Prof. Christof Wöll

http://www.ifg.kit.edu/21_264.php



PC der Grenzflächen



Campus Nord

In diesen 7 Gruppen können Sie eine PC-Bachelorarbeit machen.

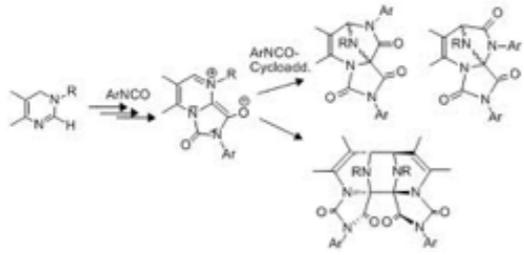
ab 5./6. Semester 3 Monate die Forschung der Gruppe näher kennen lernen

- geht auch für Physiker und Chemische Biologen

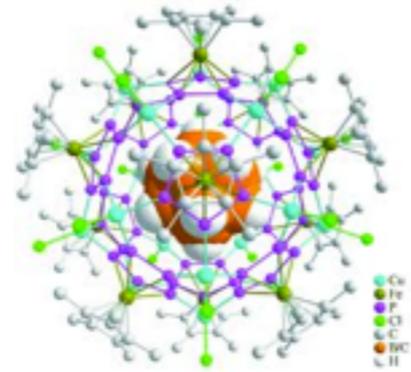
-> sprechen Sie uns an!

Was ist PC?

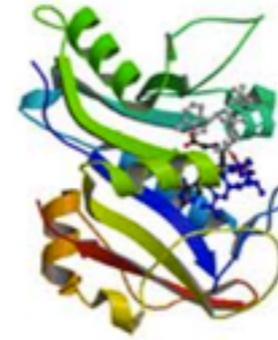
OC



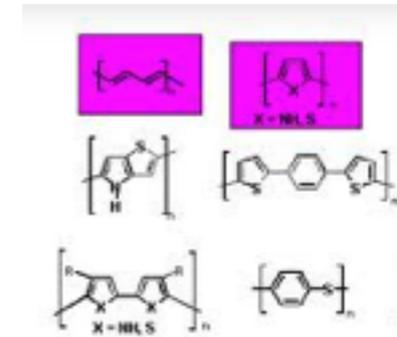
AC



BC

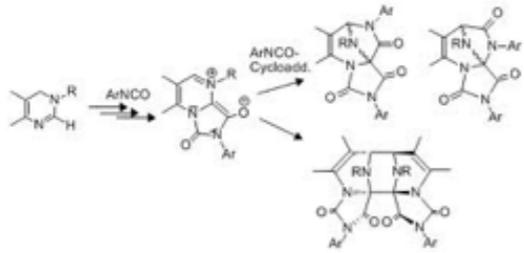


TC

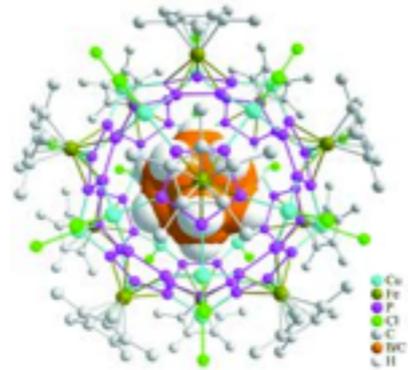


Was ist PC?

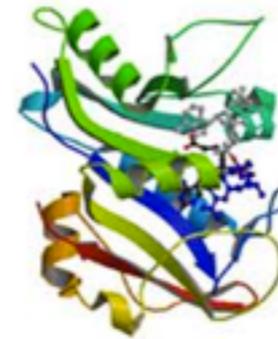
OC



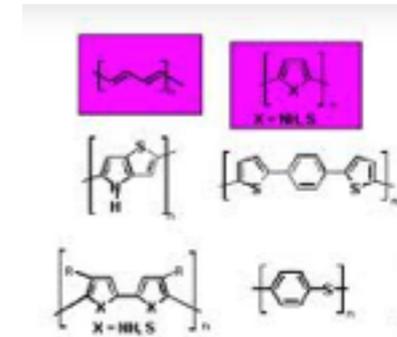
AC



BC



TC



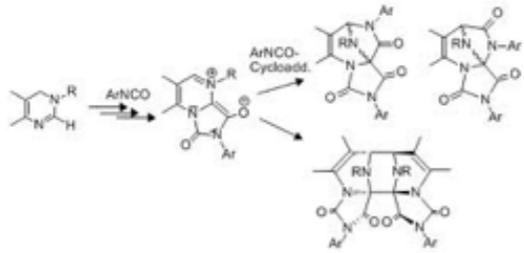
offensichtlich ist die PC nicht durch eine Stoffklasse definiert:

PC in Karlsruhe:

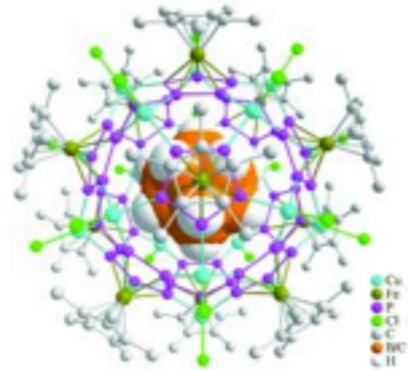
Biomoleküle, Metallcluster, Kohlenstoffnanoröhrchen, anorganische Festkörper, organische und anorganische Moleküle, Polymere

Was ist PC?

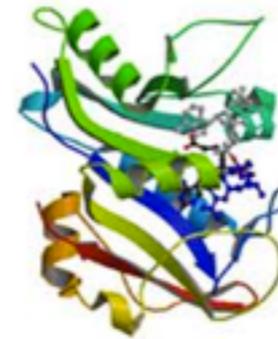
OC



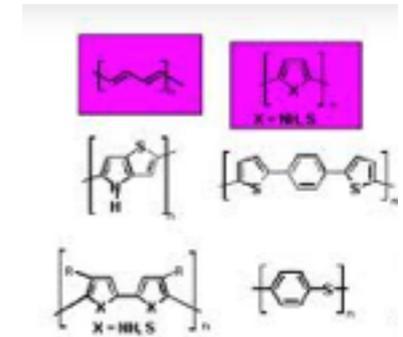
AC



BC



TC



offensichtlich ist die PC nicht durch eine Stoffklasse definiert:

PC in Karlsruhe:

Biomoleküle, Metallcluster, Kohlenstoffnanoröhrchen, anorganische Festkörper, organische und anorganische Moleküle, Polymere

... und auch nicht durch Reaktionstypen!

Was sagt Wikipedia?

Die **physikalische Chemie** (kurz: **PC**) ist neben der [anorganischen](#) und der [organischen Chemie](#) eines der “klassischen” Teilgebiete der [Chemie](#). Sie behandelt den Grenzbereich zwischen [Physik](#) und [Chemie](#), insbesondere um die Anwendung von Methoden der [Physik](#) auf Objekte der [Chemie](#). Während in der Präparativen Chemie Fragestellungen der [Methodik](#) der [chemischen Synthese](#) bekannter und neuer Substanzen im Vordergrund stehen, versucht die physikalische Chemie mit Hilfe [theoretischer](#) und experimenteller Methoden die Eigenschaften von Stoffen und deren Umwandlung zu beschreiben, mit dem Ziel, für alle relevanten Vorgänge allgemein gültige mathematische Formeln mit klar definierten Einheiten und exakten Zahlenwerten aufzustellen.

Was sagt Wikipedia?

Die **physikalische Chemie** (kurz: **PC**) ist neben der [anorganischen](#) und der [organischen Chemie](#) eines der “klassischen” Teilgebiete der [Chemie](#). Sie behandelt den Grenzbereich zwischen [Physik](#) und [Chemie](#), insbesondere um die Anwendung von Methoden der [Physik](#) auf Objekte der [Chemie](#). Während in der Präparativen Chemie Fragestellungen der [Methodik](#) der [chemischen Synthese](#) bekannter und neuer Substanzen im Vordergrund stehen, versucht die physikalische Chemie mit Hilfe [theoretischer](#) und experimenteller Methoden die Eigenschaften von Stoffen und deren Umwandlung zu beschreiben, mit dem Ziel, für alle relevanten Vorgänge allgemein gültige mathematische Formeln mit klar definierten Einheiten und exakten Zahlenwerten aufzustellen.

Teilgebiete:

Chemische Thermodynamik

Kinetik

Elektrochemie

Theoretische Chemie

Spektroskopie

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die chemischen Verbindungen des Kohlenstoffs untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die chemischen Verbindungen des Kohlenstoffs untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Bereich der **Synthese** untersuchen organische Chemiker die Einwirkung von Reagenzien (Säuren, Basen, anorganischen und organischen Stoffen) auf organische Stoffe, um Gesetzmäßigkeiten von chemischen Reagenzien auf bestimmte funktionelle Gruppen und Stoffgruppen herauszufinden.

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die [chemischen Verbindungen](#) des [Kohlenstoffs](#) untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Bereich der **Synthese** untersuchen organische Chemiker die Einwirkung von Reagenzien (Säuren, Basen, anorganischen und organischen Stoffen) auf organische Stoffe, um Gesetzmäßigkeiten von chemischen Reagenzien auf bestimmte funktionelle Gruppen und Stoffgruppen herauszufinden.

In der organischen **Analytik** erfolgt zunächst aus einem Gemisch von Stoffen eine physikalische Trennung und Charakterisierung ([Schmelzpunkt](#), [Siedepunkt](#), [Brechungsindex](#)) von Einzelstoffen, dann wird die elementare Zusammensetzung ([Elementaranalyse](#)), [Molekülmasse](#), funktionellen Gruppen (chemische Reagenzien, [NMR](#)-, [IR](#)-, [UV-Spektroskopie](#)) bestimmt, so dass sich bei wenig komplexen Verbindungen die Struktur der organischen Verbindung sicher angeben lässt.

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die chemischen Verbindungen des Kohlenstoffs untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Bereich der **Synthese** untersuchen organische Chemiker die Einwirkung von Reagenzien (Säuren, Basen, anorganischen und organischen Stoffen) auf organische Stoffe, um Gesetzmäßigkeiten von chemischen Reagenzien auf bestimmte funktionelle Gruppen und Stoffgruppen herauszufinden.

In der organischen **Analytik** erfolgt zunächst aus einem Gemisch von Stoffen eine physikalische Trennung und Charakterisierung (Schmelzpunkt, Siedepunkt, Brechungsindex) von Einzelstoffen, dann wird die elementare Zusammensetzung (Elementaranalyse), Molekülmasse, funktionellen Gruppen (chemische Reagenzien, NMR-, IR-, UV-Spektroskopie) bestimmt, so dass sich bei wenig komplexen Verbindungen die Struktur der organischen Verbindung sicher angeben lässt.

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die [chemischen Verbindungen](#) des [Kohlenstoffs](#) untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Bereich der **Synthese** untersuchen organische Chemiker die Einwirkung von Reagenzien (Säuren, Basen, anorganischen und organischen Stoffen) auf organische Stoffe, um Gesetzmäßigkeiten von chemischen Reagenzien auf bestimmte funktionelle Gruppen und Stoffgruppen herauszufinden.

In der organischen **Analytik** erfolgt zunächst aus einem Gemisch von Stoffen eine physikalische Trennung und Charakterisierung ([Schmelzpunkt](#), [Siedepunkt](#), [Brechungsindex](#)) von Einzelstoffen, dann wird die elementare Zusammensetzung ([Elementaranalyse](#)), [Molekülmasse](#), funktionellen Gruppen (chemische Reagenzien, [NMR](#)-, [IR](#)-, [UV-Spektroskopie](#)) bestimmt, so dass sich bei wenig komplexen Verbindungen die Struktur der organischen Verbindung sicher angeben lässt.

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die [chemischen Verbindungen](#) des [Kohlenstoffs](#) untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Bereich der **Synthese** untersuchen organische Chemiker die Einwirkung von Reagenzien (Säuren, Basen, anorganischen und organischen Stoffen) auf organische Stoffe, um Gesetzmäßigkeiten von chemischen Reagenzien auf bestimmte funktionelle Gruppen und Stoffgruppen herauszufinden.

In der organischen **Analytik** erfolgt zunächst aus einem Gemisch von Stoffen eine physikalische Trennung und Charakterisierung ([Schmelzpunkt](#), [Siedepunkt](#), [Brechungsindex](#)) von Einzelstoffen, dann wird die elementare Zusammensetzung ([Elementaranalyse](#)), [Molekülmasse](#), funktionellen Gruppen (chemische Reagenzien, [NMR](#)-, [IR](#)-, [UV-Spektroskopie](#)) bestimmt, so dass sich bei wenig komplexen Verbindungen die Struktur der organischen Verbindung sicher angeben lässt.

Wie das nun geht, das lernen Sie bei uns in der PC

Offensichtlich ist ein wichtiger Teil der OC (genauso AC, TC, BC) die Anwendung der Methoden der PC!

Was sagt Wikipedia beispielsweise zur OC?

Die **organische Chemie** (kurz: **OC**), häufig auch kurz **Organik**, ist ein Teilgebiet der Chemie, in dem die [chemischen Verbindungen](#) des [Kohlenstoffs](#) untersucht werden. [...]Die Chemie ist nach Georg Ernst Stahl die Wissenschaft der **Analyse** und **Synthese** von Stoffen.

Im Be
Reage
organ
bestim

In der
eine p
[Sieder](#)

Zusan
(chem
bei we

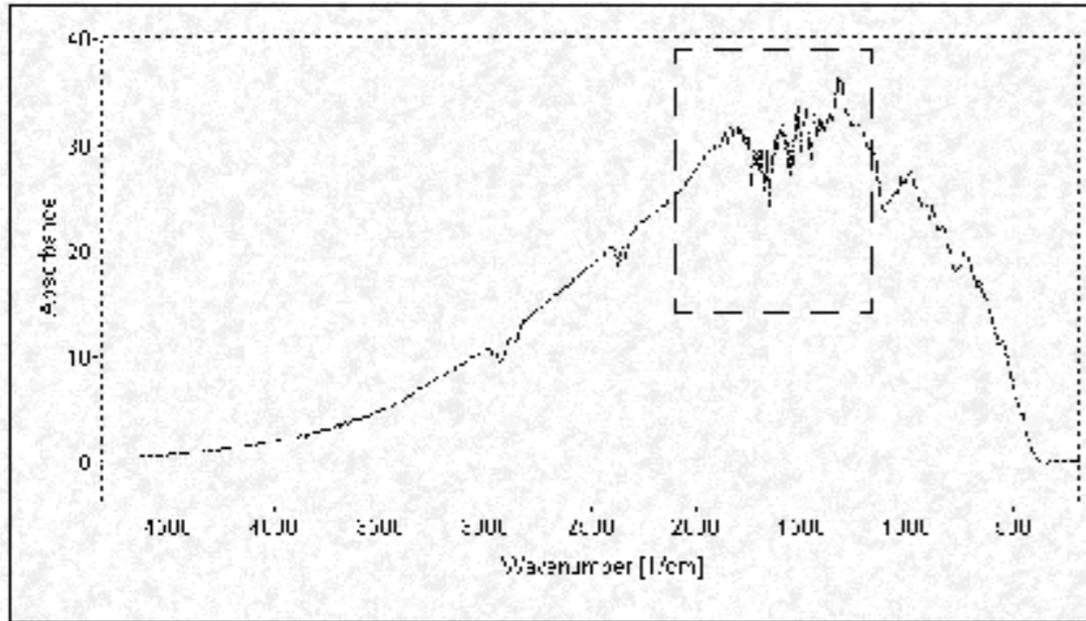
sicher angeben lässt.

Muss ich die PC nun wirklich verstehen, oder reicht es, wenn ich die Methoden anwenden kann?

Wie das nun geht, das lernen Sie bei uns in der PC

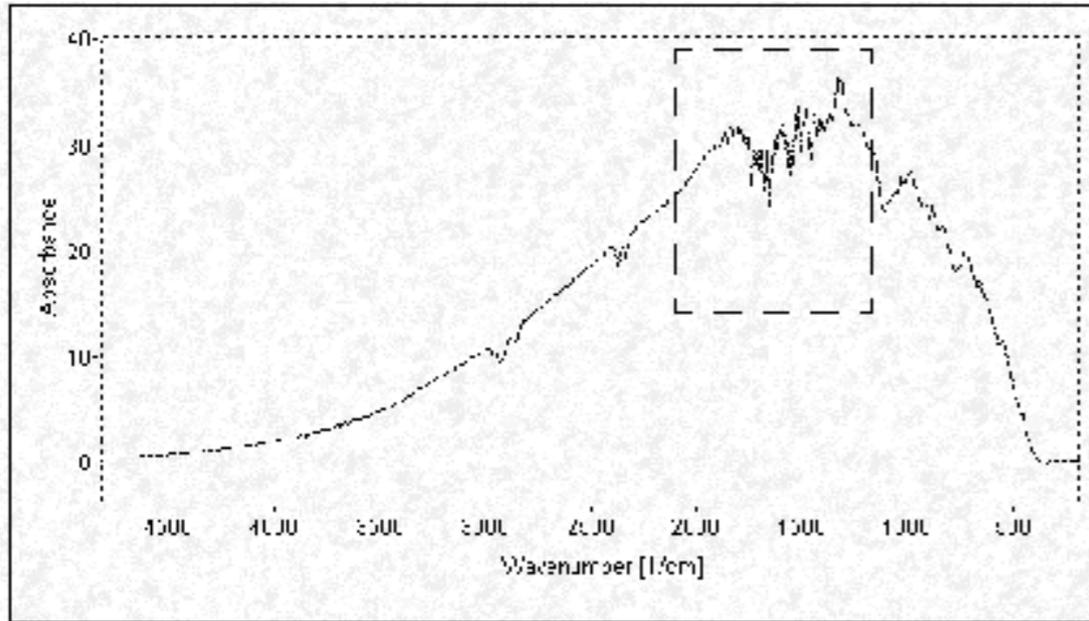
Offensichtlich ist ein wichtiger Teil der OC (genauso AC, TC, BC) die Anwendung der Methoden der PC!

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



da ist eine Keto-Gruppe drin

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



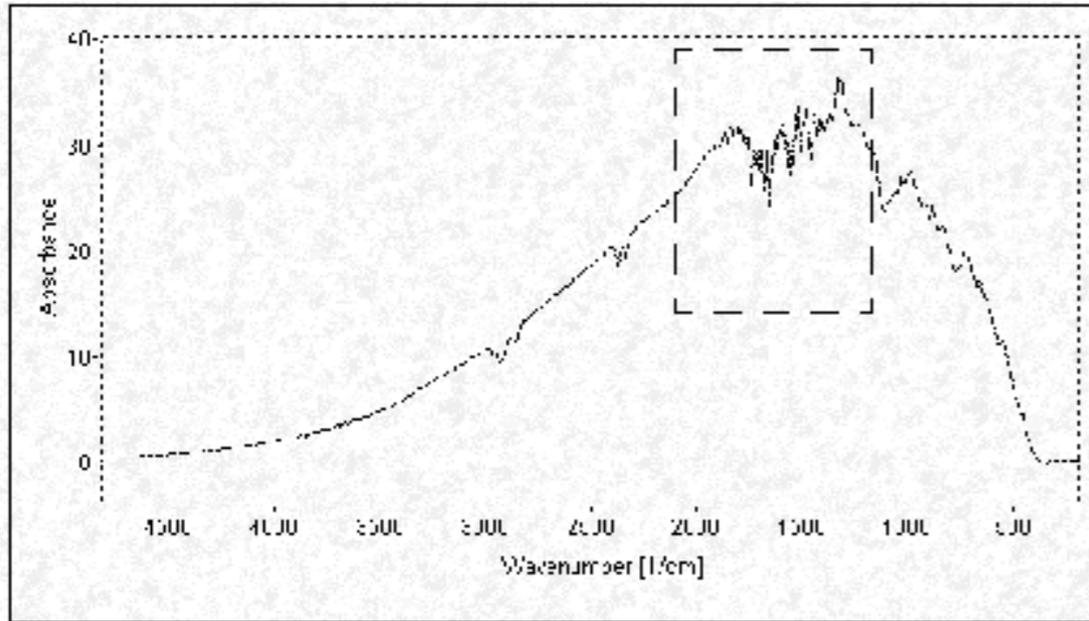
da ist eine Keto-Gruppe drin

gemessenes Muster



Aussage über die Welt!

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



da ist eine Keto-Gruppe drin

gemessenes Muster



Aussage über die Welt!

was ist dann der Unterschied hierzu?



Dir steht eine Schwangerschaft bevor!

Mehr zum Kaffeersatz lesen:

<http://www.gutefrage.net/video/kaffeersatz-lesen>

Hier zeige ich euch, wie man einen Kaffeersatz liest. Man braucht natürlich etwas Phantasie um die Symbole zu erkennen. Einige Bedeutungen sind:

- Pferd = Gute Zukunft
- Hund = Du hast einen guten Freund
- Schlange = Falschheit
- Berg = Viel Geld
- Berg mit Spitze = Schwangerschaft
- Viele Punkte = Jemand redet über dich
- Gelbliche Farbe = Du denkst zu viel
- Vogel = Gute Nachricht kommt
- Personen = Du wirst eine Einladung erhalten
- Herz = Jemand liebt dich
- Hase = Schnelle Nachricht
- Weg = Reise steht bevor

Was ist also der Unterschied?

Vielleicht kann man weiterkommen wenn man fragt, was Wissenschaft ist!

Fragen wir wieder Wiki:

Wissenschaft ist die Erweiterung des Wissens durch Forschung, dessen Weitergabe durch Lehre, der gesellschaftliche, historische und institutionelle Rahmen, in dem dies organisiert betrieben wird, sowie die Gesamtheit des so erworbenen Wissens. Forschung ist die methodische Suche nach neuen Erkenntnissen sowie deren systematische Dokumentation und Veröffentlichung in Form von wissenschaftlichen Arbeiten.

Was ist also der Unterschied?

Vielleicht kann man weiterkommen wenn man fragt, was Wissenschaft ist!

Fragen wir wieder Wiki:

Wissenschaft ist die Erweiterung des Wissens durch Forschung, dessen Weitergabe durch Lehre, der gesellschaftliche, historische und institutionelle Rahmen, in dem dies organisiert betrieben wird, sowie die Gesamtheit des so erworbenen Wissens. Forschung ist die methodische Suche nach neuen Erkenntnissen sowie deren systematische Dokumentation und Veröffentlichung in Form von wissenschaftlichen Arbeiten.

- **Erweiterung des Wissens**
- **methodische Suche**

Das trifft sicher auf die AC/OC zu, aber:

Das könnte nun auch noch aufs Kaffeesatzlesen, oder Astrologie zutreffen

Was ist also der Unterschied?

Vielleicht kann man weiterkommen wenn man fragt, was Wissenschaft ist!

Fragen wir wieder Wiki:

Wissenschaft ist die Erweiterung des Wissens durch Forschung, dessen Weitergabe durch Lehre, der gesellschaftliche, historische und institutionelle Rahmen, in dem dies organisiert betrieben wird, sowie die Gesamtheit des so erworbenen Wissens. Forschung ist die methodische Suche nach neuen Erkenntnissen sowie deren systematische Dokumentation und Veröffentlichung in Form von wissenschaftlichen Arbeiten.

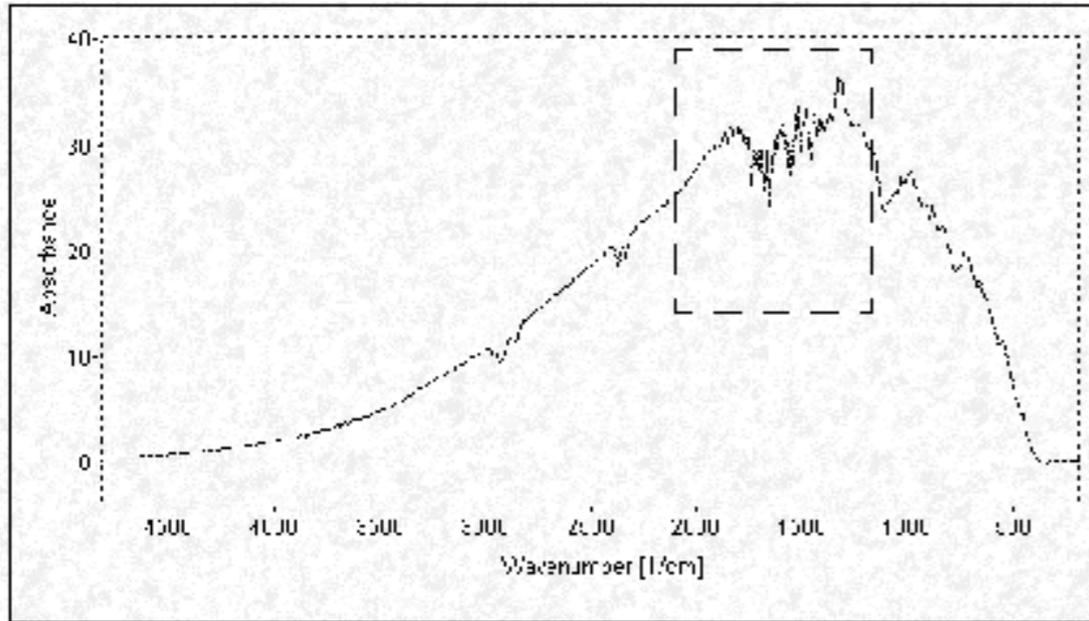
- Erweiterung des Wissens
- methodische Suche

**Struktur der Erklärungen:
Kausale Beziehungen/Erklärungen**

Das trifft sicher auf die AC/OC zu, aber:

Das könnte nun auch noch aufs Kaffeesatzlesen, oder Astrologie zutreffen

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



da ist eine Keto-Gruppe drin

PC: Kausale Beziehungen/Erklärungen

gemessenes Muster



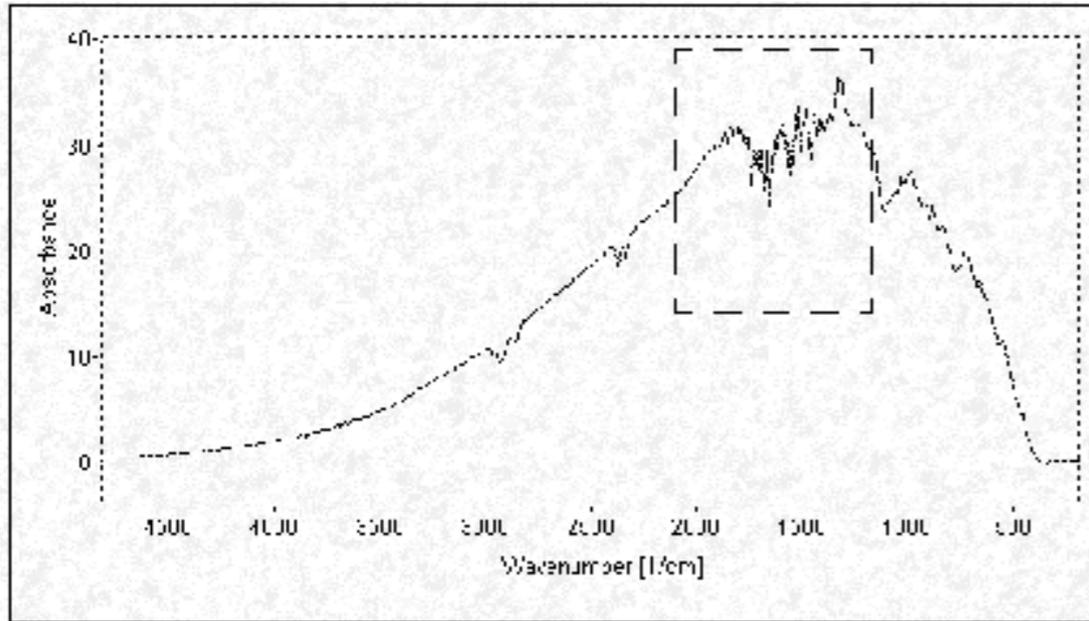
Aussage über die Welt!

was ist dann der Unterschied hierzu?



Dir steht eine Schwangerschaft bevor!

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



Hier gibt es eine Theorie, die Sie nun bei uns lernen werden.
experimentelle Tests der Theorie,
Korrelationen gut betätigt

ope drin

PC: Kausale Beziehungen/Erklärungen

gemessenes Muster



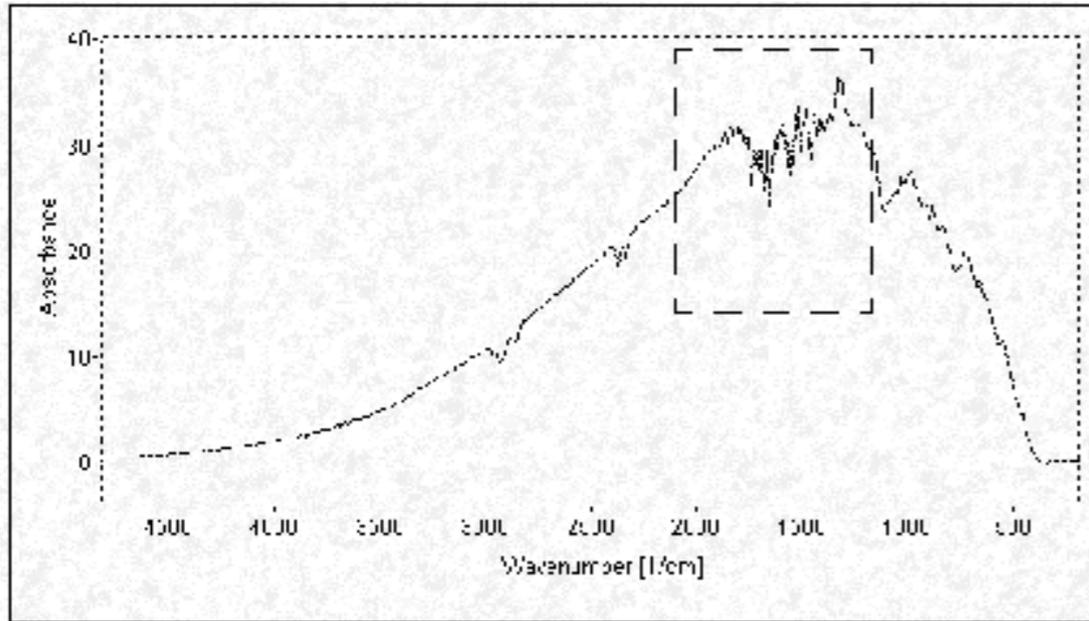
Aussage über die Welt!

was ist dann der Unterschied hierzu?



Dir steht eine Schwangerschaft bevor!

Spektroskopiekurs: Anwendung von PC Methodn



Hier gibt es eine Theorie, die Sie nun bei uns lernen werden.
experimentelle Tests der Theorie,
Korrelationen gut betätigt

PC: Kausale Beziehungen/Erklärungen

gemessenes Muster



Aussage über die Welt!

was ist dann der Unterschied hierzu?



Hier gibt es keine Theorie:
Was sollen die **Mechanismen**
sein?
Sind die **Korrelationen** überhaupt schwangerschaft
systematisch untersucht und
methodisch bestätigt?

Unterschied:

kausale Beziehung - Korrelation

Beispiel: Störche bringen Kinder

- a) **reine Korrelation:** es wurde über eine Zeit die Anzahl der Kinder und die der Störche bestimmt. Der Zusammenhang kann zufällig sein, da man den Mechanismus nicht kennt, der einen Zusammenhang herstellen könnte.

Unterschied:

kausale Beziehung - Korrelation

Beispiel: Störche bringen Kinder

- a) **reine Korrelation:** es wurde über eine Zeit die Anzahl der Kinder und die der Störche bestimmt. Der Zusammenhang kann zufällig sein, da man den Mechanismus nicht kennt, der einen Zusammenhang herstellen könnte.
- b) **Mechanismen**, die einen kausalen Zusammenhang herstellen könnten:
- aus Freude über die Kinder füttern die Leute die Störche
 - der Storch ist Element eines Fruchtbarkeitskultes, der den Fortpflanzungstrieb der Menschen anstachelt
- aber dann: Die kausale Relation ist anders als gedacht, Störche bringen keine Kinder!

Unterschied:

kausale Beziehung - Korrelation

Beispiel: Störche bringen Kinder

- a) **reine Korrelation:** es wurde über eine Zeit die Anzahl der Kinder und die der Störche bestimmt. Der Zusammenhang kann zufällig sein, da man den Mechanismus nicht kennt, der einen Zusammenhang herstellen könnte.
- b) **Mechanismen**, die einen kausalen Zusammenhang herstellen könnten:
- aus Freude über die Kinder füttern die Leute die Störche
 - der Storch ist Element eines Fruchtbarkeitskultes, der den Fortpflanzungstrieb der Menschen anstachelt
- aber dann: Die kausale Relation ist anders als gedacht, Störche bringen keine Kinder!

**Die Physik versucht Kausalbeziehungen in den Dingen zu entdecken.
Die PC wendet das auf die Chemie an.**

Meine Thesen¹:

- a) Durch die PC wird die Chemie zur Naturwissenschaft.
b) Ohne PC ist die OC/AC/TC reine Kochkunst.**

Unterschied:

kausale Beziehung - Korrelation

Beispiel: Störche bringen Kinder

- a) **reine Korrelation:** es wurde über eine Zeit die Anzahl der Kinder und die der Störche bestimmt. Der Zusammenhang kann zufällig sein, da man den Mechanismus nicht kennt, der einen Zusammenhang herstellen könnte.
- b) **Mechanismen**, die einen kausalen Zusammenhang herstellen könnten:
- aus Freude über die Kinder füttern die Leute die Störche
 - der Storch ist Element eines Fruchtbarkeitskultes, der den Fortpflanzungstrieb der Menschen anstachelt
- aber dann: Die kausale Relation ist anders als gedacht, Störche bringen keine Kinder!

**Die Physik versucht Kausalbeziehungen in den Dingen zu entdecken.
Die PC wendet das auf die Chemie an.**

Meine Thesen¹:

- a) Durch die PC wird die Chemie zur Naturwissenschaft.
b) Ohne PC ist die OC/AC/TC reine Kochkunst.**

¹Sie sind eingeladen, dem zu widersprechen! Ich habe das bewusst (augenzwinkernd)provozierend formuliert.

Hausaufgabe:

Diskutieren Sie folgende Fälle:

1. Wetter

- a) Wenn die Schwalben tief fliegen wird es schlechtes Wetter.
- b) Regnet es am Siebeschläfertag, der Regen sieben Wochen nicht weichen mag.

2. Planeten

- a) Der Mond verursacht die Gezeiten.
- b) Der im Sternzeichen Krebs geborene ist ein sensibler Mensch.

Frühere Organisation der Wissenschaft

OC AC TC PC BC Physik Informatik ...

Frühere Organisation der Wissenschaft

OC AC TC PC BC Physik Informatik ...

Heutige Organisation

Gesundheit

Energie

Kommunikation

Verkehr

Frühere Organisation der Wissenschaft

	OC	AC	TC	PC	BC	Physik	Informatik ...
Heutige Organisation							
Gesundheit	X				X		X
Energie	X	X		X	X	X	X
Kommunikation	X		X	X		X	X
Verkehr		X	X	X		X	X

Frühere Organisation der Wissenschaft

	OC	AC	TC	PC	BC	Physik	Informatik ...
Heutige Organisation							
Gesundheit	X				X		X
Energie	X	X		X	X	X	X
Kommunikation	X		X	X		X	X
Verkehr		X	X	X		X	X

Zusammenarbeiten: z.B. OC-PC-Physik: molekulare/organische Elektronik

=> es wird immer wichtiger, dass man die Methoden der anderen Gebiete versteht!