

Organisatorisches Teil A: Thermodynamik

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: pc I-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

Organisatorisches Teil B: Kinetik

Manfred Kappes, Bastian Kern, Marc-Oliver Winghart

Physikalische Chemie

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

manfred.kappes@kit.edu; bastian.kern@kit.edu; marc-oliver.winghart@kit.edu

Mi 9.45-11.15 10.50, grosser HS und Fr 9.45 - 11.15 Criegee HS

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

Übungen: Bastian Kern, Marc-Oliver Winghart

Di, 17.30-19.00 HSI

5 Tutorien: wie gehabt

2. Klausur: Semesterende zur Kinetik

Ort: Hörsaal 37 (20.40) / Redtenbach-Hörsaal
(10.91)
Datum: 08.02.2013
Zeit: 16:00
60 min

Letzte Vorlesung vor Weihnachten: **Freitag 21.12.12**

Erste Vorlesung nach Weihnachten: **Mittwoch 9.1.13**

Lehrbücher: (für PC1 und PC2)

P. W. Atkins, Julio de Paula, "Physikalische Chemie", Wiley-VCH, Weinheim

4., vollständig überarbeitete Auflage - September 2006 82,90 Euro

ISBN-10: 3-527-31546-2

ISBN-13: 978-3-527-31546-8

P.W. Atkins, Charles A. Trapp, Marshall P. Cady, Carmen Giunta, "Arbeitsbuch

Physikalische Chemie" Wiley-VCH, Weinheim

Lösungen zu den Aufgaben 49,90 Euro April 2007

ISBN-10: 3-527-31828-3

ISBN-13: 978-3-527-31828-5

G. Wedler, "Lehrbuch der Physikalischen Chemie", (5. Auflage, 2004) Wiley-VCH, Weinheim

5., vollst. überarb. u. aktualis. Auflage - August 2004 89,90 Euro 2004. XXX, 1072 Seiten, Hardcover

ISBN-10: 3-527-31066-5

ISBN-13: 978-3-527-31066-1 - Wiley-VCH, Weinheim

Donald A. McQuarrie, John D. Simon, "Physical Chemistry – A Molecular Approach",

University Science Books 1999

ISBN 0-935702-99-7

Weitere Lehrbücher: (für PC1 (und PC2))

speziell Thermodynamik

K. Denbigh, „The Principles of Chemical Equilibrium“, Cambridge University Press

speziell Kinetik

G. Hammes, „Principles of Chemical Kinetics“, Academic Press

J. Steinfeld, J. Francisco and W. Hase, „Chemical Kinetics and Dynamics, Prentice-Hall

1) Formalkinetik

1.1) Vorbemerkungen – Grundbegriffe

Reaktionsgeschwindigkeit, -mechanismus

Reaktionslaufzahl, Elementarreaktionen (uni-,bi-,trimolekular)

1.2) Einfache Kinetiken - Geschwindigkeitsgesetze und deren Integration

1.2.1) Reaktionen Nullter Ordnung

1.2.2) Reaktionen Erster Ordnung

1.2.3) Reaktionen Erster Ordnung mit Rückreaktion Erster Ordnung

1.2.4) Reaktionen Zweiter Ordnung: $2A \rightarrow B$

1.2.5) Reaktionen Zweiter Ordnung: $A + B \rightarrow C$

1.2.6) Reaktionen Zweiter Ordnung mit Rückreaktion Erster Ordnung

1.2.7) Reaktionen Dritter (N'ter) Ordnung

1.2.8) Reaktionen Allgemeiner Ordnung n und Methoden zur Bestimmung

Einschub → Vorlesung am 19.12.12: E. Elektrochemie (P. Weis)

- E 1) Elektrochemie im Gleichgewicht
- E 2) Galvanische und elektrolytische Zellen
- E 3) Verknüpfung zur Thermodynamik: elektrische Arbeit
- E 4) Elektromotorische Kraft und Nernst'sche Gleichung
- E 5) Standardelektrodenpotentiale
- E 6) Elektrochemische Zellen
- E 7) Brennstoffzelle

1) Formalkinetik

1.3) Komplexere Kinetiken

1.3.1) Aufstellen von Geschwindigkeitsgesetzen - Allgemeines Rezept

1.3.2) Quasistationaritätsprinzip (Bodenstein) und Anwendungsbeispiele

1.3.2.1) Folgereaktionen erster Ordnung

1.3.2.2) Zerfall von H_2O_2

1.3.3) Parallelreaktionen erster Ordnung

1.3.3.1) ohne Rückreaktion

1.3.3.2) mit Rückreaktion: kinetische vs. thermodynamische Kontrolle

1.3.4) Mechanismen mit Energietransferschritten

1.3.4.1) Assoziationsreaktionen: Radikal-Radikal-Rekombination

1.3.4.2) Lindemann-Hinshelwood-Mechanismus für unimolekulare Reaktionen

1) Formalkinetik

1.3.5) Reaktionen mit vorgelagertem Gleichgewicht

1.3.5.1) Einfacher Mechanismus mit langsamer Produktbildung

1.3.5.2) Einfacher Mechanismus mit schneller Produktbildung

1.3.5.3) Enzymkatalyse nach Michaelis-Menten

1.3.6) Reaktionen in Zwei Dimensionen

1.3.6.1) Langmuir Isotherme der Adsorption von Gasen an Oberflächen

1.3.6.2) Einfache Kinetik der Heterogenen Katalyse (an Oberflächen)

1.3.7) Kettenreaktionen

1.3.7.1) Kettenreaktion ohne Verzweigung

1.3.7.2) Kettenreaktion mit Verzweigung

1.3.8) Photochemische Kinetik

2) Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante

2.1) Arrhenius Gesetz zur T-Abhängigkeit

2.2) Modellansätze zur Beschreibung von $k(T)$ in bimolekularen Reaktionen

2.2.1) Qualitatives Bild

2.2.2) Berechnung der Reaktionsraten über Kinetische Gastheorie

2.2.2.1) Stosszahl

2.2.2.2) Geschwindigkeitsverteilungen: Maxwell Ansatz

2.2.2.3) Druck

2.2.2.4) Bestimmung der 1-D und 3-D Maxwell-Boltzmann Verteilungen

2.2.2.5) Mittelwerte der Maxwell-Boltzmann Geschw.-Verteilungen

2.2.2.6) Berechnung der mittleren Relativgeschwindigkeit

2.2.2.7) Berechnung der Stosszahl für Stöße mit $E > E_{\text{krit}}$

2.2.2.8) Line-of-Centers Modell

2.2.2.9) Vergleich mit dem Experiment und Modellverbesserungen

3) Experimentelle Methoden zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten

3.1) Ensemble Messungen

3.2) Partiiell Zustandsspezifische Experimentelle Methoden

3.2.1) Zeitaufgelöste Laserspektroskopie

3.2.2) Reaktionsdynamik über Gekreuzte Molekularstrahlmessungen

4) Weitere Mikroskopische Theorien zur Bestimmung von $k(T)$

4.1) LEPS Potentialdiagramme und Reaktionstrajektorien

4.2) Vereinfachte Theorie des Aktivierten Komplexes

5) Reaktionen in Flüssigkeiten

5.1) Unterschiede zu Reaktionen in Gasphase

5.2) Transportprozesse/Transportvorgänge

5.2.1) Energietransport/Wärmeleitung

5.2.2) Massentransport/Diffusion; stationäre Diffusionsgleichung

5.2.3) Zeitabhängige Diffusionsgleichung

5.2.4) Anschauliche Betrachtung und Thermodynamische Behandlung

5.2.5) Berechnung von Diffusionskoeffizienten

5.3) Diffusions- sowie Aktivierungskontrollierte Reaktionen in Lösung

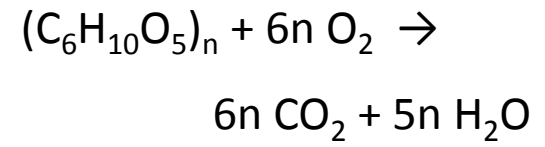




Hauptbestandteil von Holz:
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$

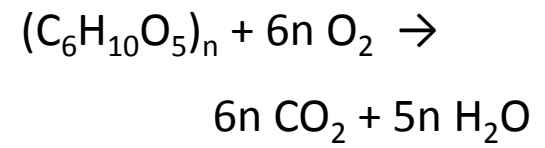


Hauptbestandteil von Holz:
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$





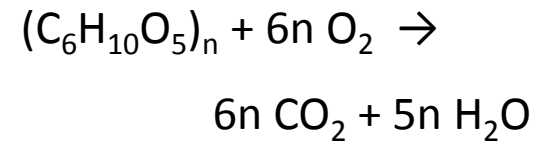
Hauptbestandteil von Holz:
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$



$$\Delta_r G^\circ \approx -16000 \text{ kJ/kg}$$



Hauptbestandteil von Holz:
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$



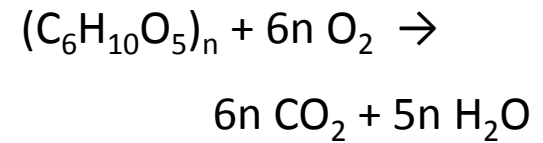
$$\Delta_r G^\circ \approx -16000 \text{ kJ/kg}$$

thermodynamisch nicht stabil !





Hauptbestandteil von Holz:
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$



$$\Delta_r G^\circ \approx -16000 \text{ kJ/kg}$$

thermodynamisch nicht stabil !

aber:

Zerfall kinetisch gehemmt !

hohe Aktivierungsenergie

Mengensymbole

10^{12} tera T

10^9 giga G

10^6 mega M

10^3 kilo k

10^2 hekto h

10^{-3} milli m

10^{-6} mikro μ

10^{-9} nano n

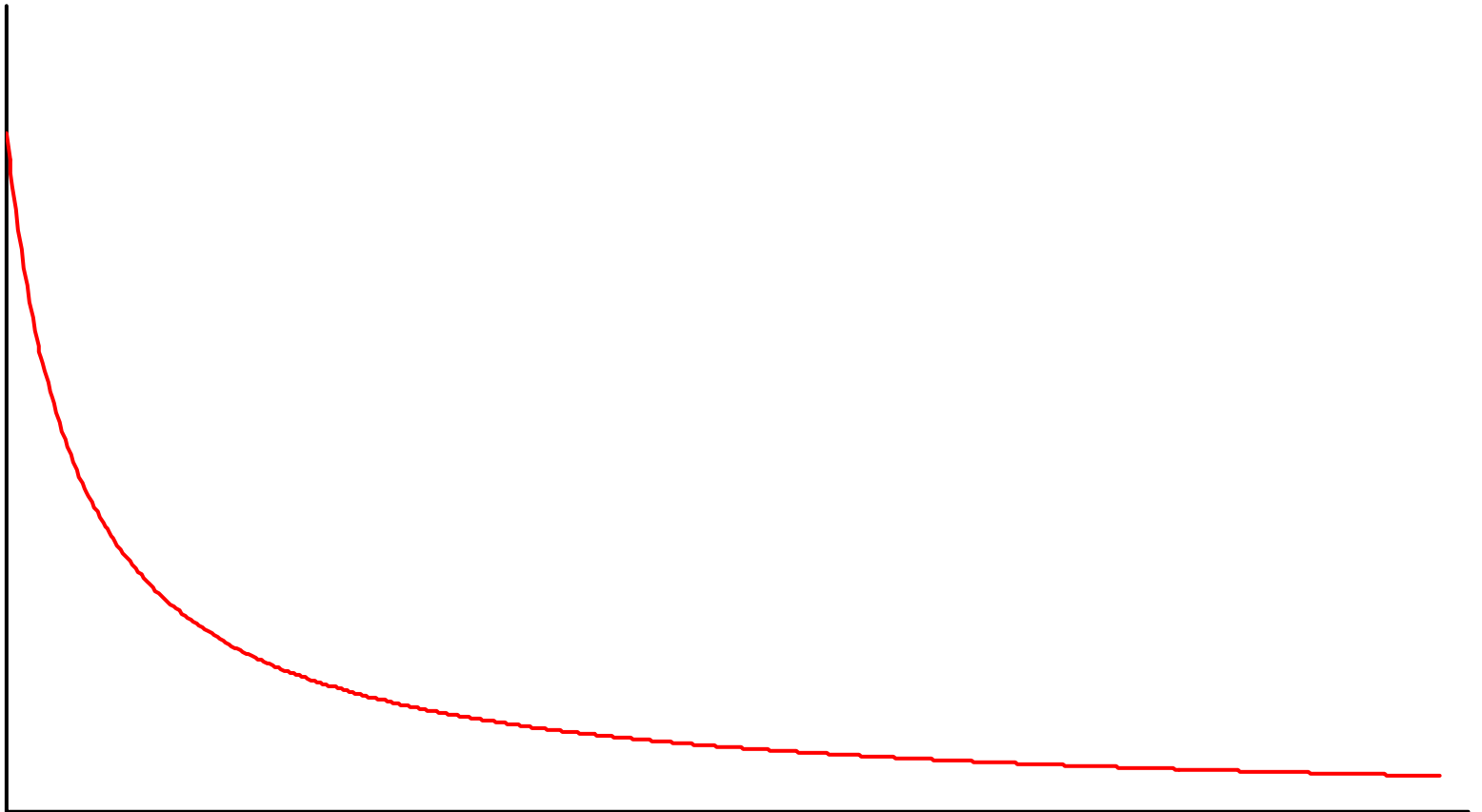
10^{-12} pico p

10^{-15} femto f

10^{-18} atto a



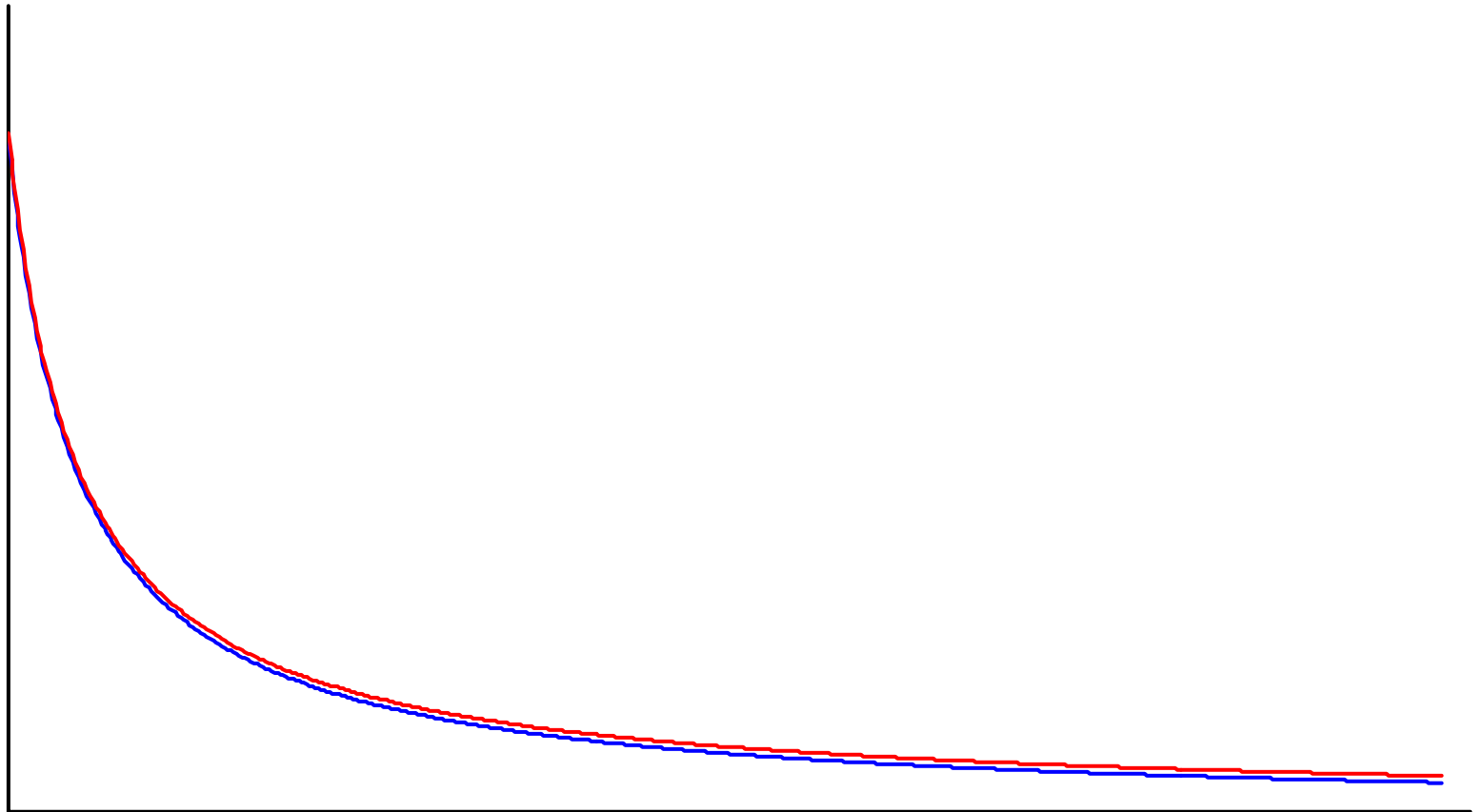
Stoffmenge



Zeit t



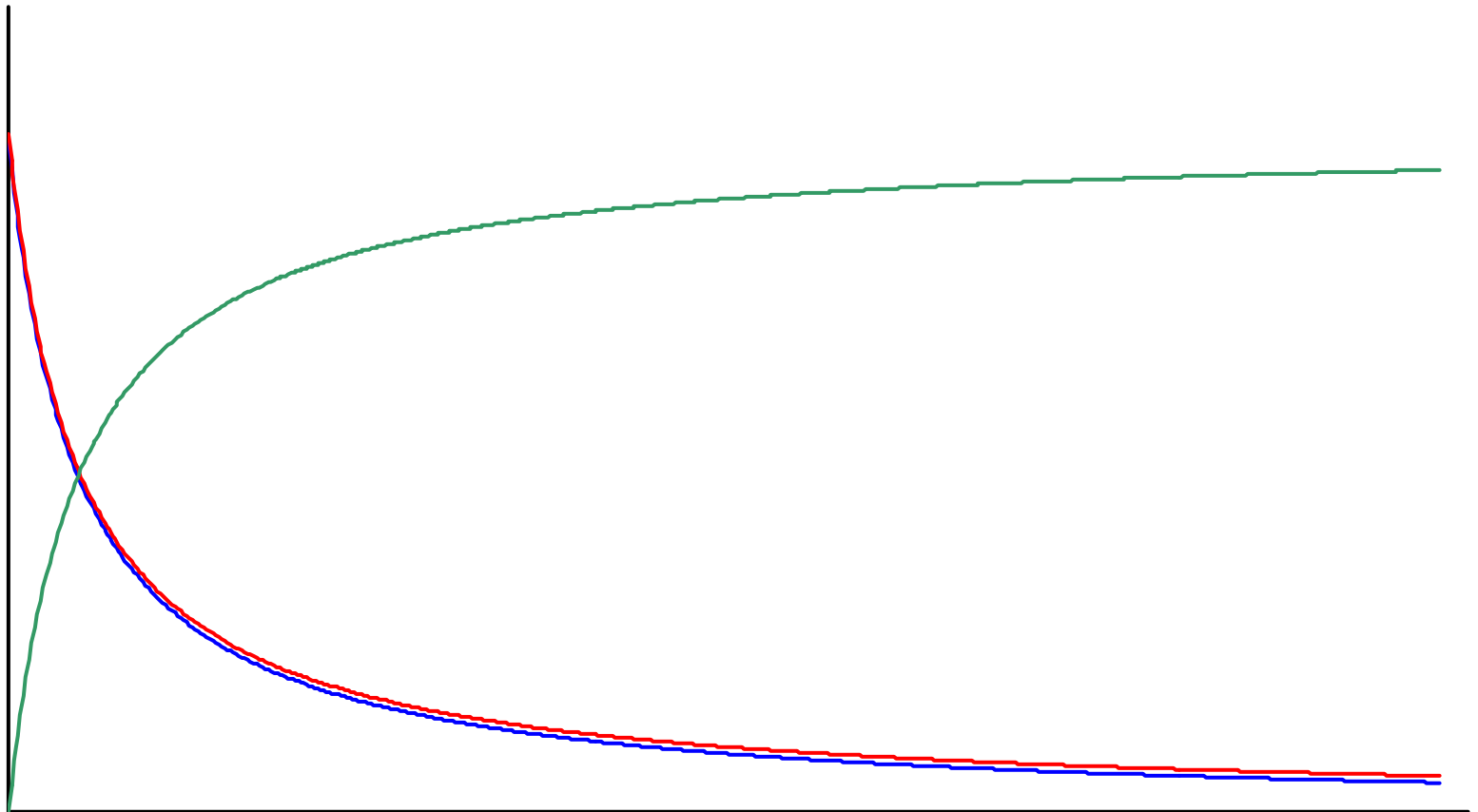
Stoffmenge



Zeit t



Stoffmenge



Zeit t

Ueber das Gesetz,

nach welchem die

EINWIRKUNG DER SÄUREN

auf den Rohrzucker

stattfindet,

von

LUDWIG WILHELMY

in Heidelberg.

(1850.)

Herausgegeben

von

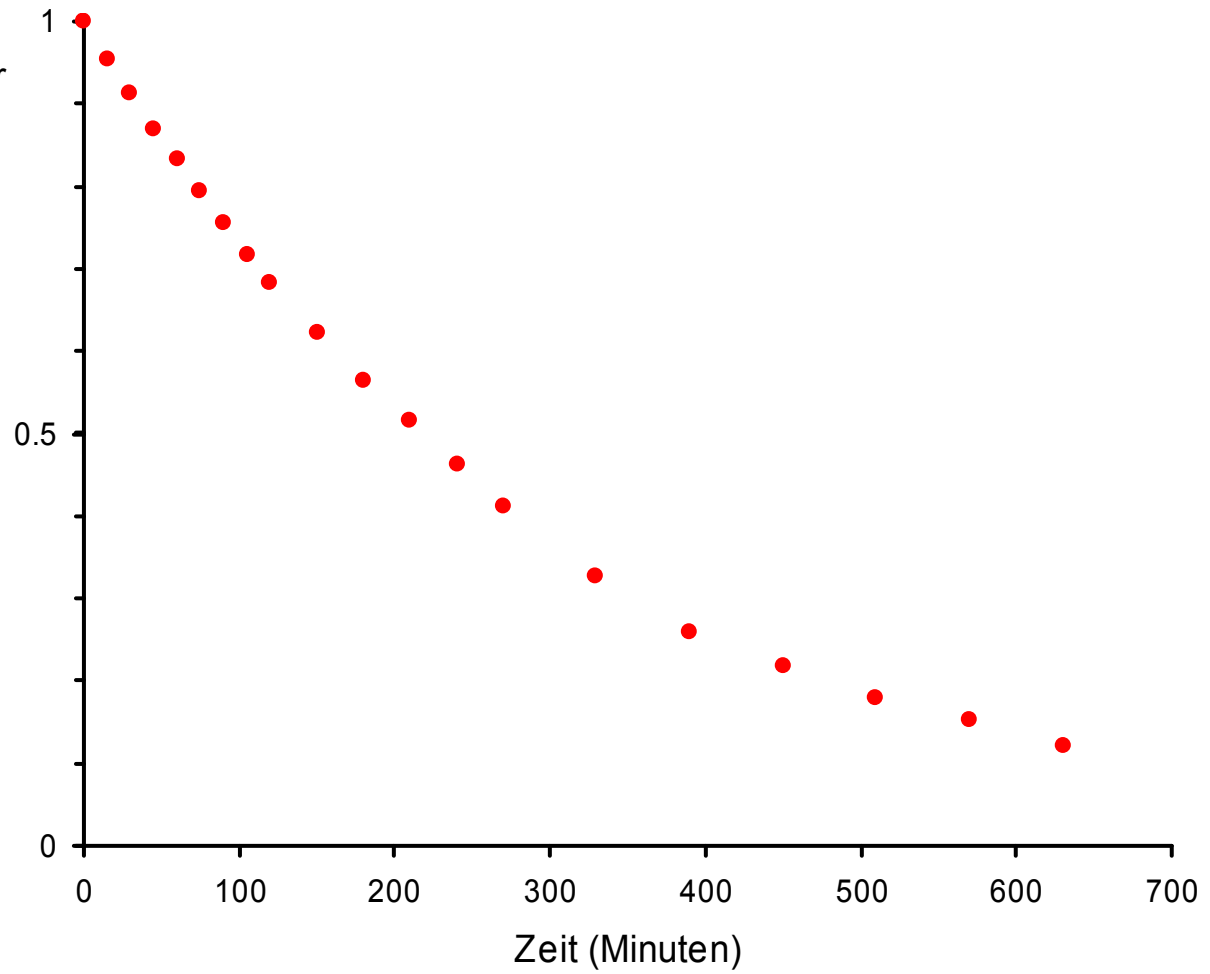
W. Ostwald.

LEIPZIG

VERLAG VON WILHELM ENGELMANN

1891.

Relative
Rohrzucker
menge



Relative
Rohrzucker
menge

