

Physikalische Chemie I – Thermodynamik und Kinetik

WS 2019/20

Vorlesung: Criegee HS Mi. 9.45 – 11.15 Uhr
Criegee-HS Fr. 9.45 - 11.15 Uhr

Teil A: Thermodynamik Prof. Dr. Marcus Elstner
Teil B: Kinetik Prof. Dr. Manfred Kappes

Übungen: Neue Chemie, Geb. 30.46 Di. 17.30 - 19:00 Uhr (ab 18.12.18)

erste Übung in PC1-B: Dienstag, 17.12.18, 17:30-19 Uhr (zweite Übung 7.1.19)

ACHTUNG NEUER ORT FÜR (EINE GROSSE) SAALÜBUNG

Übungsleiter: Dr. Dmitri Strelnikov

Tutorien: Zeiten wie gehabt

Folien, Übungsblätter: <https://studium.kit.edu/>
passwd: PCI-I920

Tutorien

Mi	11.30 - 13.00 Uhr	LZ R 220
Do	9.45 - 11.15 Uhr	PC 4.OG
Do	14.00- 15.30 Uhr	LZ R 120
Fr	11.30- 13.00 Uhr	PC 4.OG
Fr	11.30- 13.00 Uhr	10.50/702

Mi im Lernzentrum Geb. 30.28, Seminarraum 1, Raum 220

Do, ab 14 Uhr, Lernzentrum Geb. 30.28, Seminarraum 2, Raum 120

Fr in Geb.10.50, Raum 702

PC: Seminarraum im PC Turm, 4. OG

Physikalische Chemie I

1. Übung: 15.10

1. Vorlesung: 16.10

Klausur Thermodynamik Mi, 11.12.19, 17:30 -- 19:00, HS Neue Chemie und HS am Fasanengarten

Klausur Kinetik Sa., 08.02.19 9:45 -- 11:15, HS I, HS III und Criegee HS

KLAUSURANMELDUNG:

Alle, für die die Veranstaltung eine Prüfungsleistung ist (Physik, MatWerk, Technomathematik...): Klausuranmeldung im Campus System ist erforderlich. **Deadline ist der 5.12.!**

PRAKTIKUM:

Beginn PC-A-Praktikum im WS 19/20: 14.02.20 (Vorbesprechung), 1. Praktikumstag: 19.02.20.

Online-Anmeldung zum PC-A-Praktikum: 1. November 2019 bis 2. Februar 2020

http://www.ipc.kit.edu/18_196.php

Wichtig ist, dass sich alle anmelden, die im WS 19/20 oder im SS 20 das Praktikum absolvieren möchten. Eine separate Anmeldung für das Sommersemester gibt es **nicht**.

Klausuren

Teilklausur Thermodynamik (A)

Mi. 11.12.19, 17:30 - 18:30 Uhr

HS Neue Chemie und HS am Fasanengarten

Teilklausur Kinetik (B)

Sa. 08.02.20, 9.45 – 11.15 Uhr

HS I, HS III und Criegee HS

Nachklausur:

Fr. 03.04.20, 9.00-11.00

Neue Chemie

Studienleistung für Praktikums-Schein: 2 + 2 Tests in Übung sowie 1+ 1 Teilklausuren
(30% + 70%)

Prüfungsleistung PC1: 2 Teilklausuren (100%)

(Bei Nachklausur keine Anrechnung von Testpunkten) Näheres in Übung

Letzte Vorlesung vor Weihnachten: **Freitag 20.12.19**

Erste Vorlesung nach Weihnachten: **Mittwoch 8.1.19**

A-Praktikum

Beginn: 14.2 mit Vorbesprechung
1. Praktikumstag 19.2

Online-Anmeldung zum PC-A-Praktikum: ab Anfang November 2019 bis Ende Januar 2020

- Anmeldung für alle Studierenden unabhängig vom Praktikumsbeginn (WS oder SS):
 - WS Lebensmittelchemiker und Physiker
 - SS Chemiker und Chemische Biologen.
 - Lehramt: freie Auswahl.

Ausnahmen sind möglich bis zu einem gewissen Grad (bis zu ~30 %),

Anmeldung zum Physikalisch-Chemischen Praktikum für Anfänger:
die Anmeldung soll schon jetzt für das WS2019/2020 oder SS2020 gemacht werden

PC-A Praktikum

Online Registrierung für alle Studierende der Studiengänge:
Chemie Bachelor, Lebensmittelchemie, Chemische Biologie, Biologie, Physik, Lehramt.

- www.ipc.kit.edu
- Studium und Lehre
- Praktika
- Physikalisch-Chemisches Praktikum für Anfänger → *nach unten scrollen*
- **Anmeldung** (ab sofort bis Ende Januar (gilt für Praktika im Winter- und Sommersemester)

Wer soll sich anmelden?

Jeder Studierende, der den Schein in PCI oder PCII schon hat, bzw. plant den Schein noch vor dem Beginn des Praktikums zu bekommen (und nach Studienplan das A Praktikum machen muss).

Die Voraussetzung zur Teilnahme ist eine bestandene Klausur zu PC I oder PC II.

Bei Nichterfüllung dieser Voraussetzung wird trotz der rechtzeitigen Anmeldung kein Praktikumszugang gewährt.

SWS: bis zu 10 je nach Studiengang

Termine im PC-A Praktikum

WS 2019/20

hauptsächlich Studierende der Physik und Lebensmittelchemie

Vorbesprechung:

Freitag, den 14.02.2020, Zeit und Ort werden noch bekannt gegeben - Es besteht **Anwesenheitspflicht!**

Der erste Praktikumstag:

Montag, den 19.02.2020

Praktika:

Mo/Mi/Fr 10:00 - 14:00 Uhr

Praktikumsende:

Freitag, den 20.03.2020

Lehrbücher: (für PC1)

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

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

University Science Books 1999

ISBN 0-935702-99-7

M. Elstner, "Physikalische Chemie I: Thermodynamik und Kinetik", Springer Spektrum, Berlin

2017

ISBN 978-3-662-55363-3

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



*And Now for
Something
Completely
Different.....*

PC 1 – B: KINETIK



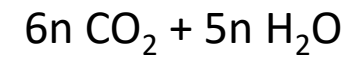
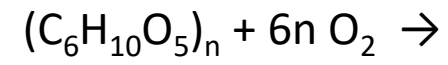
Hauptbestandteil von Holz:

Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$



Hauptbestandteil von Holz:

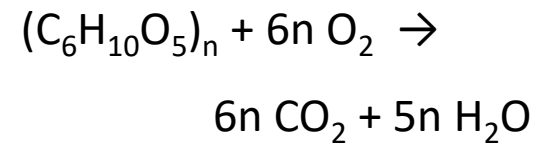
Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$





Hauptbestandteil von Holz:

Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$

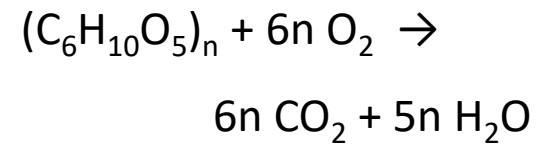


$$\Delta_r G^\circ \approx -16000 \text{ kJ/kg}$$



Hauptbestandteil von Holz:

Zellulose, $(C_6H_{10}O_5)_n$



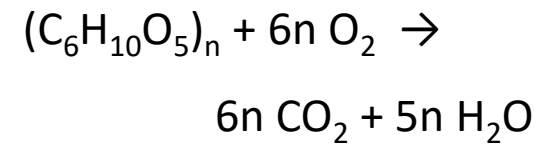
$$\Delta_r G^\circ \approx -16000 \text{ kJ/kg}$$

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



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

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 Zustandsspeziifische 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

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

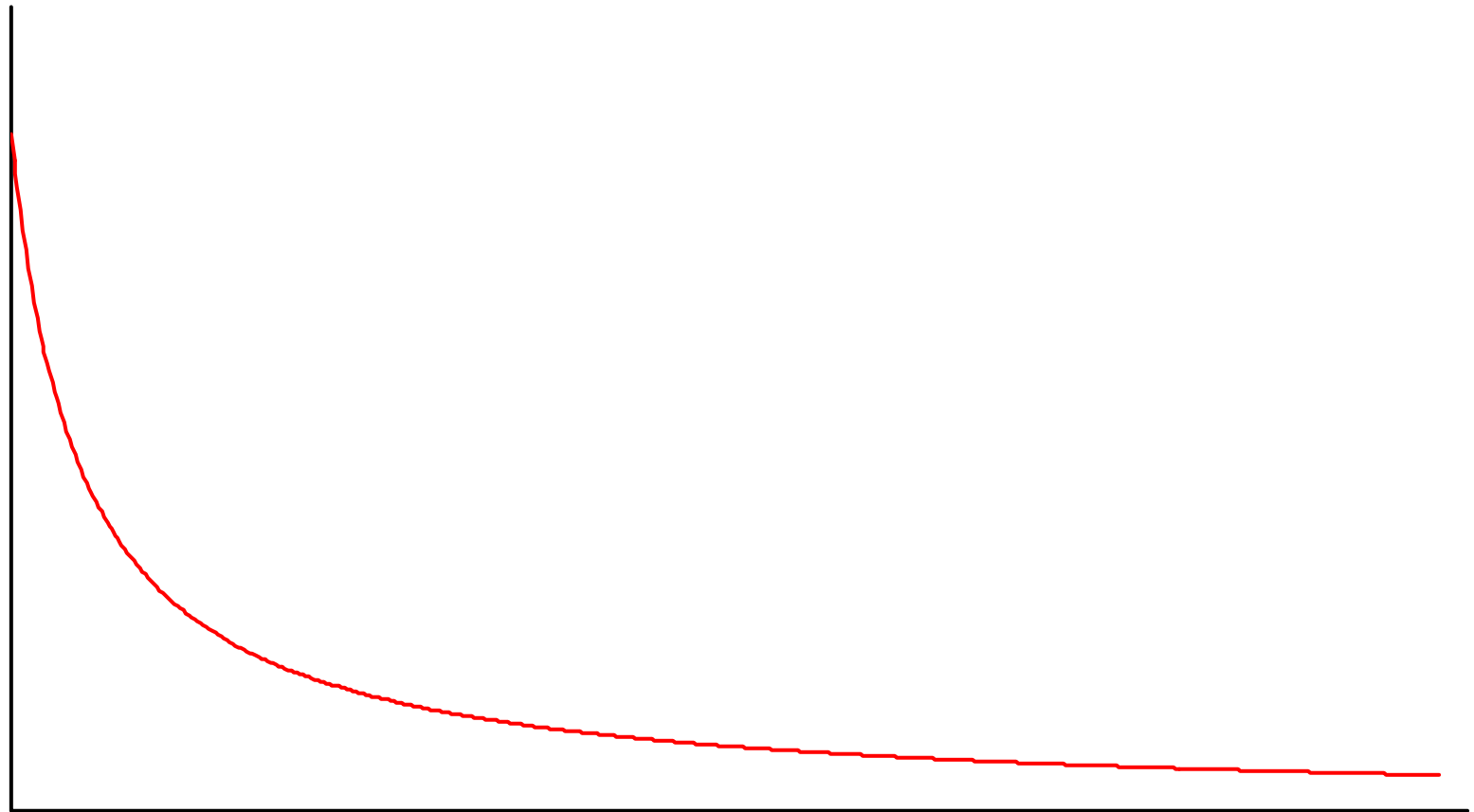
Dazwischen: Elektrochemie (24.1.20, Patrick Weis)

Mengensymbole

10^{12}	tera	T	10^{-3}	milli	m
10^9	giga	G	10^{-6}	mikro	μ
10^6	mega	M	10^{-9}	nano	n
10^3	kilo	k	10^{-12}	pico	p
10^2	hekto	h	10^{-15}	femto	f
			10^{-18}	atto	a



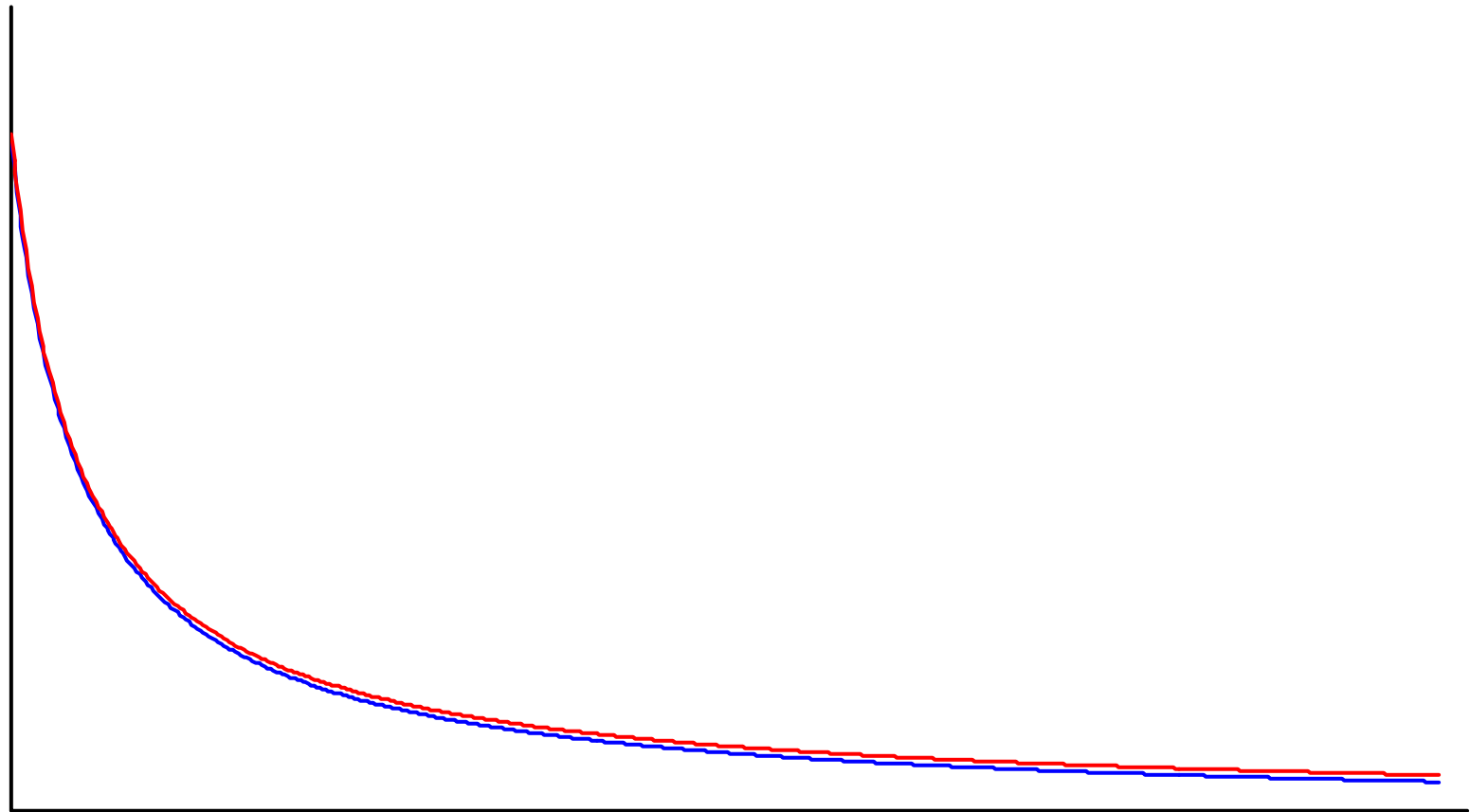
Stoffmenge



Zeit t



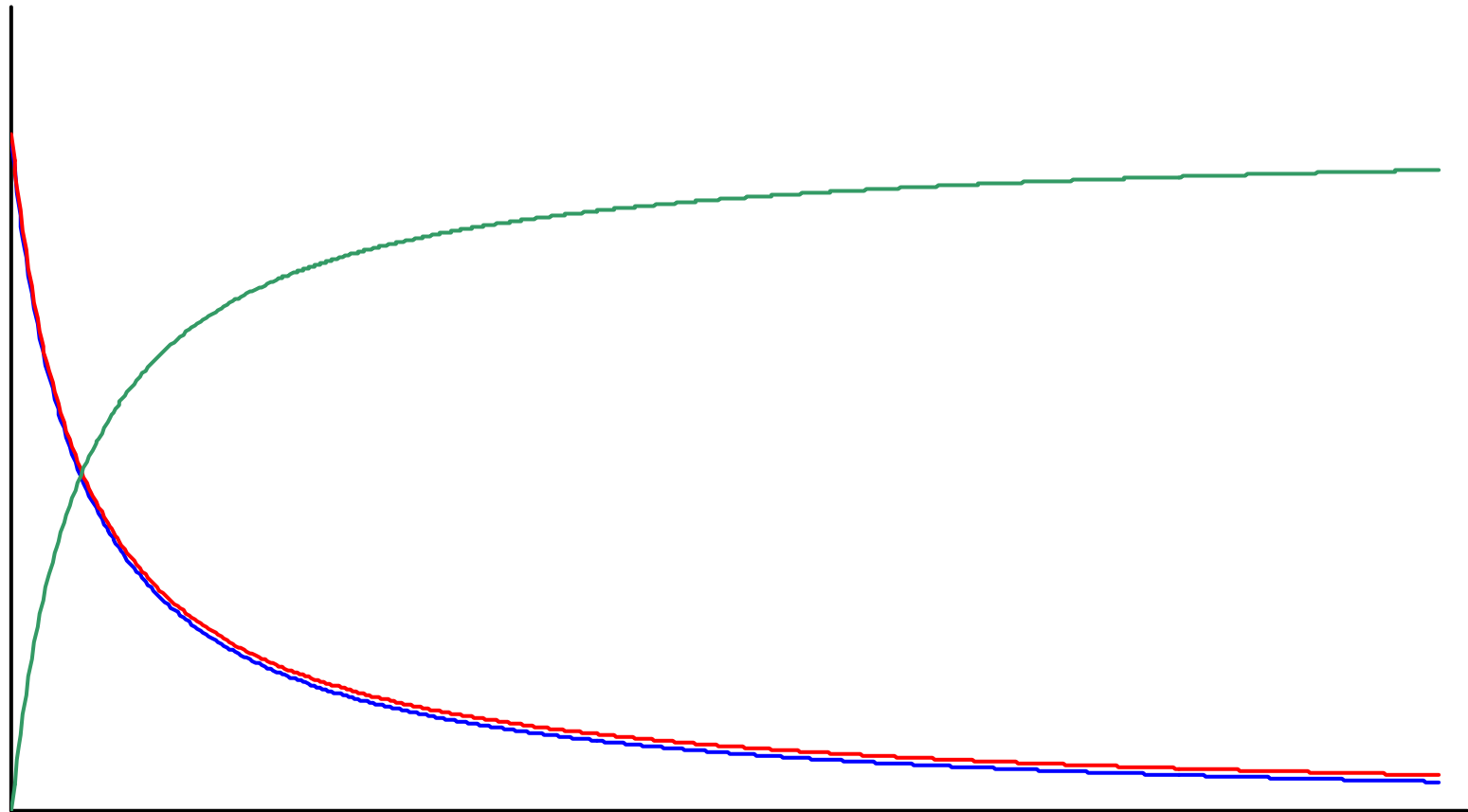
Stoffmenge



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

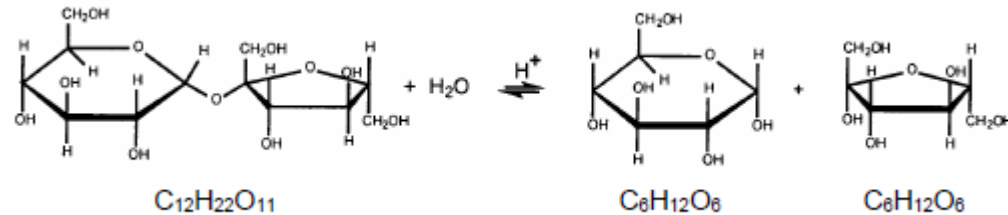
W. Ostwald.

LEIPZIG

VERLAG VON WILHELM ENGELMANN

1891.

Rockzuckerinversion = Säurespaltung von Saccharose



Saccharose (S)
rechtdrehend

(D+)-Glucose + (D-)-Fructose
rechtdrehend + stark linksdrehend

Messung des „Drehvermögens“ von linear polarisiertem Licht in „Polarimeter“ ergibt eine „Inversion“ von rechtdrehendem Ausgangs-Stoff in insgesamt linksdrehendem Produktgemisch

Relative
Rohrzucker
menge

