

<b>Modultitel</b>		<b>Modulcode</b>		
Physikalische Chemie 5: Statistische Thermodynamik		chem2003		
<b>Modulverantwortliche(r)</b>				
Prof. Dr. Jürgen Grotemeyer				
<b>Veranstalter</b>				
Sektion Chemie				
<b>Fakultät</b>				
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät				
<b>Prüfungsamt</b>				
Prüfungsamt Chemie				
<b>Leistungspunkte</b>		5		
<b>Bewertung</b>		Benotet		
<b>Dauer</b>		Ein Semester		
<b>Angebotshäufigkeit</b>		Findet nur im Sommersemester statt		
<b>Arbeitsaufwand pro Leistungspunkt</b>		30 Stunden		
<b>Arbeitsaufwand insgesamt</b>		150 Stunden		
<b>Präsenzstudium</b>		42 Stunden		
<b>Selbststudium</b>		108 Stunden		
<b>Lehrsprache</b>		Deutsch / Englisch		
<b>Modulveranstaltung(en)</b>				
<b>Veranstaltungsart</b>	<b>Lehrveranstaltungstitel</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>SWS</b>	
Vorlesung	Physikalische Chemie 5: Statistische Thermodynamik	Pflicht	2	
Übung	Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie 5: Statistische Thermodynamik	Pflicht	1	
<b>Prüfung(en)</b>				
<b>Prüfungstitel</b>	<b>Prüfungsform</b>	<b>Bewertung</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>Gewicht</b>
Mischprüfung: Statistische Thermodynamik	Klausur	Benotet	Pflicht	100

## Weitere Bemerkungen zu der/den Prüfung(en)

Es handelt sich bei den Prüfungsleistungen Hausaufgaben und Testfragen um Bonusleistungen, mit denen Punkte für die Abschlussklausur gesammelt werden können.

Prüfungsleistungen:

- Lösung von Hausaufgaben (H) (30 % der Modulnote),
- Testfragen (T) zum Verständnis (10 Min. 14-tägig) (30 % der Modulnote),
- Klausur (K) am Ende der Vorlesungszeit (40 % bzw. 100 % der Modulnote).

Modulendnote:

Die Gesamtpunktzahl (P, in %) wird nach folgender Formel berechnet:

$$P = 0,3 \times (\%H) + 0,3 \times (\%T) + 0,4 \times (\%K)$$

Das Modul wird bei  $P \geq 60\%$  als bestanden gewertet (Variante 1).

Alternativ reicht es zum Bestehen auch aus, wenn in der Klausur mindestens 60 % der möglichen Punkte erreicht werden (Variante 2).

Die Endnote ergibt sich aus der Gesamtpunktzahl P (Variante 1) bzw. der Punktzahl in der Klausur (Variante 2). Es zählt das bessere Ergebnis.

Die Klausur wird insgesamt drei Mal angeboten: Im ersten und im zweiten Prüfungszeitraum des laufenden Semesters und im zweiten Prüfungszeitraum des Folgesemesters.

Benotung, Relevanz für M.Sc. Endnote: Chemie 1-Fach, Wirtschaftschemie:

- Modulnote geht mit LP-Zahl gewichtet in die M.Sc. Endnote ein.

Benotung, Relevanz für M.Ed. Endnote: Chemie 2-Fach

- Modulnote geht nicht in die Endnote ein.

## Lehrinhalte

- Grundpostulate der Statistischen Thermodynamik: Boltzmann-Definition der Entropie, Elemente der Wahrscheinlichkeitsrechnung und Kombinatorik, Binominal-Verteilung, Berechnung der Thermodynamik für ein System von Elementen mit zwei Energiezuständen,
- Systeme unabhängiger Teilchen: Polynominalverteilung, Lagrange-Variation, Boltzmann-Verteilung, molekulare Zustandssumme des Elektrons im Kasten, ideales Gas, Zustandssumme des harmonischen Oszillators, Einsteins Modell des Festkörpers, halbklassische Näherung, Zustandsintegrale der Translation, Rotation und Schwingung, Gleichverteilungssatz,
- Systeme wechselwirkender Teilchen: Die Gibbs-Ensemble (mikrokanonisch, makrokanonisch, großkanonisch), Zusammenhang mit den thermodynamischen Potentialen, kanonisches Zustandsintegral, ideales Gas, van-der-Waals Gas, Clusterentwicklung der molekularen Zustandssumme,
- Mehrstoffsysteme: Mischungsentropie, Gibbs-Paradox, Zustandssummen von Mischungen, van-der-Waals Theorie von Mischungen, Bragg-Williams-Gittermodell, Phasenübergänge, Landau-Theorie,
- Systeme reagierender Teilchen: Bestimmung der Gleichgewichtszusammensetzung durch Variationsrechnung, statistische Formulierung der Gleichgewichtskonstanten, Berechnung der Gleichgewichtskonstanten, Theorie des Übergangszustands,
- Quantenstatistik: Auswertung der großkanonischen Zustandssumme für Fermionen und Bosonen, ideales Bosegas, Bose-Kondensation, ideales Fermigas, Theorie der Metalle.

## Lernziele

Die Studierenden erhalten Einblicke in die wesentlichen Grundlagen, die Denkweise und Techniken der Statistischen Thermodynamik. Neben der Kenntnis von grundlegenden Konzepten steht die Anwendung dieser Konzepte auf einfache praktische Beispiele im Zentrum. Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls verstehen die Studierenden, wie die molekularen Eigenschaften über die jeweils gültige Statistik als Brücke die Materialeigenschaften von Gasen, Flüssigkeiten und Feststoffen bestimmen. Sie besitzen die Kompetenz in der Anwendung und Übertragung einfacher Modelle zur Analyse und Vorhersage des Verhaltens realer Systeme. Außerdem wird strukturiertes, logisches und analytisches Denkvermögen geschult.

## Literatur

- Lehrbücher der Physikalischen Chemie,
- B. N. Roy, Fundamentals of Classical and Statistical Thermodynamics,
- W. Göpel, H.-D. Wiemhöfer, Statistische Thermodynamik, Spektrum Akademischer Verlag,
- Vorlesungsskriptum.

<b>Verwendung</b>	<b>Pflicht/Wahl</b>	<b>Fachsemester</b>
Master, 1-Fach, Chemie, (Version 2007)	Pflicht	1 oder 2
Master, 1-Fach, Chemie, (Version 2016)	Pflicht	1 oder 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2008)	Wahl	1 oder 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2014)	Wahl	1 oder 2
Master, 1-Fach, Wirtschaftschemie, (Version 2017)	Wahl	1 oder 2
Master, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2007)	Wahl	1 - 4
Master, 2-Fächer, Profil Lehramt an Gymnasien, Chemie, (Version 2017)	Wahl	1 - 4