

Einleitung

EINHEIT 1: EINLEITUNG

In dieser Lehrseinheit befassen wir uns mit der Frage, was Physikalische Chemie ist. Wir lernen, dass sie als Brücke zwischen Physik und Chemie grundlegende Fragestellungen in den Fokus nimmt, die die stoffliche Welt betreffen. Ihr Anliegen ist es, konzeptuelle Modelle zu entwickeln, die quantitative Zusammenhänge aufzeigen. Damit liefert die Physikalische Chemie eine Basis für vielerlei Weiteres, etwa für die chemische Prozesstechnologie zur effizienten Auslegung von chemischen Reaktoren, aber auch für die Biologie, beispielsweise bei der Frage nach der Basis des Lebens. Auch für große Menschheitskrisen, wie den anthropogenen Klimawandel, hält die Physikalische Chemie sowohl Erklärungskonzepte als auch Lösungsansätze bereit.

Die *Physikalische Chemie* (kurz PC) kann als Grenzgebiet zwischen den beiden Naturwissenschaften Physik und Chemie aufgefasst werden. Je nachdem, von welcher der beiden Disziplinen wir uns ihr annähern, könnten wir von *Chemie mit physikalischen Methoden* oder von *Physik, die chemische Sachverhalte behandelt*, sprechen. Im Gegensatz zur reinen Physik, die ihren Fokus auf Naturphänomene grundsätzlich richtet (die oft nicht sehr greifbar sind, beispielsweise wenn es um Kräfte, Felder oder Wellen geht), beschäftigt sich die Physikalische Chemie auch und besonders mit den Stoffen dahinter (die wir uns konkret greifbar vorstellen können).¹ Die Physikalische Chemie hat das Ziel, die **Grundprinzipien** der stofflichen Welt zu beschreiben, d. h. den *Zustand von Materie und dessen Änderungen*. Sie fragt beispielsweise, warum ein bestimmter Stoff bei Normalbedingungen eine Flüssigkeit und nicht etwa ein Gas ist und warum er farbig ist. All dies wollen wir präzise beantwortet haben, d. h. quantitativ. Beispielsweise wollen wir in der Physikalischen Chemie neben der allgemeinen Information „der Stoff ist bei Normalbedingungen eine Flüssigkeit“ konkret wissen, bei welchen Drücken und Temperaturen er konkret welchen Aggregatzustand hat. Und wir wollen neben der allgemeinen Information „der Stoff ist blau“ konkret wissen, welche Lichtwellenlängen er absorbiert und warum er dies tut. Mit diesem Fokus ist die Physikalische Chemie zentral für das Verständnis der Chemie und verbrückt diese mit der Physik. Hierbei grenzt sie sich von der Anorganischen und der Organischen Chemie insofern ab, als dass diese beiden Disziplinen vor allem beschreiben, auf welche Weise(n) Stoffe reagieren bzw. durch Reaktionen hergestellt werden können.² Die Physikalische Chemie dagegen fragt in diesem Kontext eher grundsätzlich danach, *warum* die Stoffe reagieren und inwiefern externe Parameter dies beeinflus-

¹ Während sich beispielsweise die Physik ganz grundsätzlich mit dem Phänomen der elektrischen Leitfähigkeit beschäftigt, legt die Physikalische Chemie auch einen Fokus auf den konkreten Stoff dahinter, z. B. Kupfer.

² Die Anorganische Chemie betrachtet dabei das Periodensystem der Elemente in seiner ganzen Vielfalt, die Organische Chemie hingegen vor allem ein spezielles Element, den Kohlenstoff, das aber selbst vielseitig genug ist, um eine eigene Fachdisziplin auszufüllen.

sen. Dabei sucht sie danach, konzeptuelle sowie quantitative Zusammenhänge zwischen *makroskopisch* messbaren Größen, wie beispielsweise dem Druck, der Temperatur, der Reaktionsgeschwindigkeit oder der elektrischen bzw. thermischen Leitfähigkeit, mit *makroskopischen* Vorgängen, wie etwa der Teilchenbewegung, herzustellen.

Der letztgenannte Anspruch führt uns zum Kernziel der Physikalischen Chemie: Die Ableitung von **Modellen** für die Zusammenhänge in der stofflichen Welt. Dies tun wir gemäß des folgenden allgemeinen wissenschaftlichen Arbeitsprinzips: Am Anfang steht das wissenschaftliche *Experiment*, in dem eine *Beobachtung* gemacht wird. Wir können dies als Frage an die Natur auffassen. Die Natur antwortet hierauf quantitativ und wir erhalten dadurch eine Einsicht des Typs: *Wenn Du dies tust, dann passiert jenes, und zwar in jenem Ausmaß*. Ein alternativer Zugang kann auch das Ordnen von (zunächst) unstrukturierten Beobachtungen sein, die nicht notwendigerweise Ergebnisse von gezielten Experimenten sind. Aus beidem kann letztlich eine *Hypothese* abgeleitet werden, die die Beobachtung erklärt. Auf Grundlage davon werden weitere mögliche Beobachtungen vorausgesagt und in darauffolgenden Kontrollexperimenten (oder durch weiteres genaues passives Hinschauen ohne aktives Provozieren im Experiment) überprüft. In den meisten Fällen muss die ursprüngliche Hypothese daraufhin angepasst werden, um die Folgeergebnisse ebenfalls zu beschreiben. Daraus ergeben sich wiederum neue Voraussagen über weitere mögliche Beobachtungen, sodass im Lauf der Zeit durch immer weitere Experimente und entsprechende Verfeinerung der Hypothese ein immer besseres Abbild der realen Verhältnisse entsteht. Dieses *Abbild der Wirklichkeit* ist das *Modell*. Es stellt eine Vereinfachung der natürlichen Verhältnisse dar, in der alle wesentlichen Eigenschaften erhalten bleiben. Die Wissenschaft sucht daher nicht nach der absoluten Wahrheit, sondern nach dem besten *Abbildung* derselben. Dabei sind Vereinfachungen essenziell. Die größte Eleganz ist schließlich, wenn wir ein Modell auch mathematisch, d. h. quantitativ formulieren können; wir sprechen dann von einer *Theorie*. Auf Basis dieses Prinzips erlangen wir *Verständnis*. Wenn wir in der Wissenschaft sagen, dass wir ein bestimmtes beobachtetes Naturphänomen verstanden haben, so meinen wir damit, dass wir es in bestehende Modelle einordnen und letztlich aus Fundamentalmodellen bzw. Fundamentaltheorien herleiten können – sodass wir am Ende sagen können: „da hätten wir auch vorher drauf kommen können“.

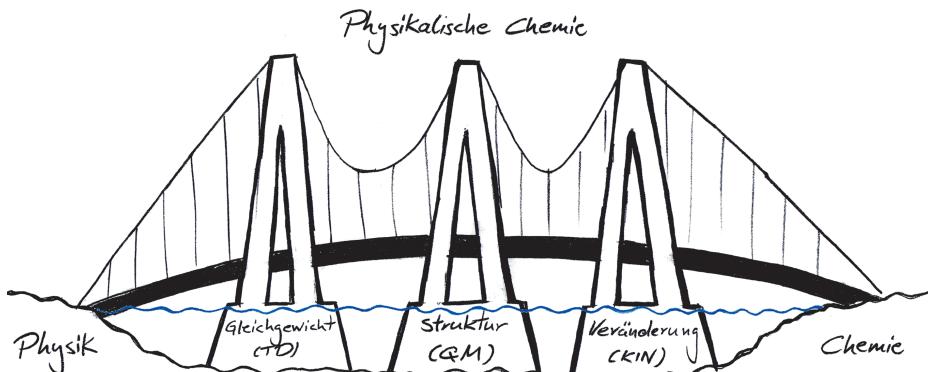
Ein Beispiel ist das ideale Gasgesetz, $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$, das gleich mehrere Zustandsgrößen für Gase auf simple Art verknüpft. Dem damit zusammenhängenden Modellbild des idealen Gases liegen starke Vereinfachungen zugrunde, und doch ist es in der Lage, das Verhalten von vielen Gasen durch die oben genannte Gleichung oft ausreichend genau quantitativ zu beschreiben. Ein anderes Beispiel ist das Daltonsche Atommodell, das den Aufbau von Materie auf der Grundlage von An- und Umordnung kleinster, nicht teilbarer Bausteine beschreibt. Diese stark vereinfachenden Modelle haben gleichwohl ihre Limitierungen, und im Lauf der Zeit tauchen Befunde auf, die durch sie nicht mehr beschrieben werden können, beispielsweise die Existenz flüssiger Phasen und die Wechselwirkung von Materie mit Strahlung. Damit sind die bisherigen Modelle falsifiziert. Sie müssen dann angepasst werden. Ein Beispiel für eine

Anpassung sind die realen Gasgesetze; diese haben die gleiche Grundform wie das ideale Gasgesetz, sind aber um Korrekturterme erweitert, um den neuen Beobachtungen Rechnung zu tragen. Manchmal ist das bisherige Modell mit den experimentellen Beobachtungen aber auch nach Anpassungen nicht mehr in Einklang zu bringen. Hier muss dann ein komplett neues Modell entwickelt werden, wie es im Fall des Atommodells nötig war. Das Bohrsche Atommodell beispielsweise unterscheidet sich in seinen Annahmen grundlegend vom Daltonschen, indem es die vorher postulierte unteilbare Einheit des Atoms aufgibt, zugunsten einer detaillierteren Unterteilung in einen positiv geladenen Atomkern, der von negativ geladenen Elektronen umkreist wird. Auch dieses Modell ist inzwischen von einem weiteren, dem quantenmechanischen Atommodell abgelöst worden. Wir sehen, dass der wissenschaftliche Fortschritt daher auf einem ständigen Prozess des Beobachtens, Spekulierens, Modellierens, Überprüfens, Irrens und Verbesserns basiert. Der Wissenschaftsphilosoph Gerhard Vollmer prägte hierfür den Ausdruck „wir irren uns empor“.

Die Physikalische Chemie lässt sich in drei große Teilgebiete unterteilen:³ die **Thermodynamik**, die **Kinetik** und die **Quantenmechanik**.⁴ In der *Thermodynamik* werden die makroskopischen Eigenschaften der Stoffe beleuchtet. Sie ist vor allem ein Teilgebiet der Beschreibung von *Gleichgewichtszuständen* und beantwortet Fragestellungen wie: *Warum ist dieser Stoff bei Raumtemperatur und Normaldruck ein Gas und jener eine Flüssigkeit?* Dem gegenübergestellt ist die *Quantenmechanik*, die sich mit den mikroskopischen Eigenschaften von Materie beschäftigt und ein Teilgebiet der *Struktur* ist. Sie beantwortet Fragestellungen wie: *Warum erscheint dieser Stoff blau und jener grün?* Beide werden verbunden durch die Subdisziplin der *statistischen Thermodynamik*, die makroskopisch messbare Stoffeigenschaften mit den mikroskopischen Energiezuständen der beteiligten Teilchen mithilfe statistischer Methoden verbrückt. Das dritte Teilgebiet, die *Kinetik*, behandelt die Mechanismen und Geschwindigkeit chemischer Prozesse und ist daher ein Teilgebiet zur Beschreibung von *Veränderungen*. Sie beantwortet Fragestellungen wie: *Warum rostet Eisen langsam, während Knallgas schnell explodiert?* Diese drei Disziplinen bilden die Grundpfeiler, auf denen die Physikalische Chemie fußt und mit denen sie die Physik und Chemie verbindet.

³ Als ein weiteres Teilgebiet wird bisweilen die Elektrochemie genannt; diese spielte vor allem für die *Entwicklung* der Physikalischen Chemie eine herausragende Rolle. Wir betrachten jedoch Systeme, an denen geladene Spezies beteiligt sind und Reaktionen, bei denen Elektronen fließen, nicht als eigenen Grundpfeiler der Physikalischen Chemie, sondern nur als besonders spannende Vertreter von thermodynamischen Systemen und chemischen Reaktionen und widmen diesen auch ein eigenes Kapitel (Kapitel 4).

⁴ Wir könnten anstelle von Quantenmechanik auch Spektroskopie an Atomen und Molekülen sagen. Quantenmechanik in ihrer vollen Allgemeinheit ist eher ein Teil der Physik. In der Chemie interessiert uns vor allem der Teil der Quantenmechanik, der mit dem Aufbau von Atomen und Molekülen sowie mit deren Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung zu tun hat.



Die Physikalische Chemie verbrückt die Physik und die Chemie durch die Tragpfeiler Thermodynamik, Kinetik und Quantenmechanik.

Durch diese Brückenfunktion wird die Physikalische Chemie zu einer Basisdisziplin für vielerlei Weiteres. Sie liefert beispielsweise für die chemische Prozesstechnik essenzielle Grundlagen. Wenn wir etwa durch Physikalische Chemie verstehen, warum Einphasenreaktionen stets in ein chemisches Gleichgewicht laufen und wie genau dies durch Parameter wie Druck und Temperatur beeinflusst ist, so können wir Bedingungen finden, die uns einen bestimmten, uns interessierenden Stoff im Gleichgewicht in hohem Anteil liefern, und damit unsere chemischen Reaktoren entsprechend auslegen. Und wenn wir beispielsweise durch Physikalische Chemie verstehen, wie genau sich das Phasengleichgewicht zwischen Flüssigkeit und Gas bei Stoffmischungen einstellt, so können wir daraus schließen, wie wir beispielsweise eine Destillationskolonne auslegen müssen, um einen uns interessierenden, in einem Gemisch (beispielsweise einem Produktgemisch einer Reaktion) vorliegenden Stoff in einer gewünschten Reinheit zu isolieren.

Auch in ganz anderen Wissenschaftsgebieten legt die Physikalische Chemie Grundlagen. So liefert sie etwa für die Biologie eine Basis für die Grundfrage danach, wie Leben überhaupt existieren kann. Leben beruht auf hochkomplexen molekularen und supramolekularen Strukturen und Funktionseinheiten. Dies scheint auf den ersten Blick einem Fundamentalprinzip der Thermodynamik zu widersprechen, nämlich der Tendenz des Universums, stets einem Zustand höherer Unordnung (genauer: zufälliger Gleichverteilung von Materie und Energie) entgegenzustreben. Der Schlüssel zur Auflösung dieses Scheinwiderspruchs ist, dass Leben auf Kompartimentierung in Zellen beruht, in denen komplexe Strukturen sozusagen vor eben jener Grundtendenz der Natur beschützt und dadurch aufrechterhalten werden können. Dies wiederum wird aufrechterhalten durch Fütterung mit Energie aus Stoffwechselprozessen. Und dies wiederum beruht auf Nahrungsketten, an deren Anfang hochenergetische Verbindungen (Kohlenhydrate) stehen, die in grünen Pflanzen durch Absorption der Energie des Sonnenlichts unter Umwandlung der chemisch sehr stabilen, d. h. energiearmen Verbin-

zung Kohlendioxid gebildet werden und in denen dann eben jene Sonnenenergie chemisch gespeichert ist. Für all dies bildet die Physikalische Chemie eine Basis.

Wir könnten hier noch viele weitere Beispiele für Gebiete diskutieren, in denen physikochemische Prinzipien essenziell sind. Wir beschränken uns auf lediglich ein weiteres: den menschengemachten Klimawandel. Diese große, globale Bedrohung basiert auf der Bilanz der eingehenden Sonnenstrahlung und der ausgehenden Wärmestrahlung der Erde. Dabei spielen Gasmoleküle in der Atmosphäre, die Infrarotstrahlung absorbieren, eine Schlüsselrolle. Und eben jene werden seit rund 200 Jahren durch die fossile menschliche Energiewirtschaft in zunehmendem Ausmaß in die Atmosphäre gebracht. Um diese Krise nachhaltig zu lösen, muss die Menschheit einen Übergang von ihrer bisherigen fossilen Energiewirtschaft zu einer nachhaltigen Form finden. Und eben dafür sind wiederum Grundlagen aus den Bereichen Thermodynamik, Elektrochemie und weiteren Teilgebieten der Physikalischen Chemie essenziell. In diesem Buch lernen Sie die Grundlagen dessen und können damit später, als Fachleute in führenden Positionen der Gesellschaft, Beiträge zu Lösungsansätzen dieser uns alle betreffenden Notlage beisteuern.

Mit alldem ist die Physikalische Chemie also nicht nur hochinteressant, sondern auch hochrelevant.

DAS WICHTIGSTE IN KÜRZE

- Die Physikalische Chemie ist ein **Teilgebiet der Chemie**; sie schafft eine Brücke zwischen Physik und Chemie
- Sie behandelt chemische Phänomene konzeptuell und quantitativ über zwei Ansätze:
 - **Makroskopisch**, phänomenologisch
 - **Mikroskopisch**, teilchenbasiert
- Die Physikalische Chemie unterteilt sich in drei Teilbereiche:
 - **Thermodynamik** (Gleichgewicht)
 - **Quantenmechanik** (Struktur)
 - **Kinetik** (Veränderung)
- Sie liefert elementares Grundverständnis nicht nur für die Chemie, sondern auch für weitere Bereiche wie die Lebenswissenschaften, die Ingenieurwissenschaften und die chemische Prozesstechnik.



