

Physikalische Chemie 1 – Struktur und Materie

Wintersemester 2020/21

Vorlesung findet wegen der Covid-19 Maßnahmen hauptsächlich ONLINE statt

1. Videos der Vorlesungen werden wöchentlich auf Moodle zur Verfügung gestellt
2. Zwei „Fragen & Antworten“ Einheiten in Präsenz im Hörsaal
 - Do 22.10. um 8:00 – 9:00 im HS 10.11
 - Do 12.11. um 8:30 – 10:00 im HS 10.11

Prüfung: am Semesterende

(Termine werden noch fixiert und dann auf uni-online bekannt gegeben)

Vorlesungsunterlagen (Folien, Videos, Tafelbild):

Moodle Plattform (teilweise auf <https://chemie.uni-graz.at/de/pc-tc/lehre/>)

Physikalische Chemie 1 – Struktur und Materie

Wintersemester 2020/21

Kontakt:

Univ. Prof. Dr. Leonhard Grill
Abteilung Physikalische und Theoretische Chemie
Universität Graz, Heinrichstrasse 28, 5. OG
<http://www.nanograz.com>
E-Mail: leonhard.grill@uni-graz.at
Sprechstunde nach Bedarf (per e-mail kontaktieren)

Sekretariat (für alle Prüfungsangelegenheiten!):

Frau Kogler und Frau Schmid
Abteilung Physikalische und Theoretische Chemie
Heinrichstrasse 28, 4. OG

Physical Chemistry 1 – Structure and Matter

winter term 2020/21

Due to the covid-19 restrictions, lectures will mainly take place ONLINE

1. Videos of each lecture will be available on Moodle every week
2. Two „Questions & Answers“ units in the lecture hall (in presence)
Thu 22.10. at 8:00 – 9:00 in HS 10.11
Thu 12.11. at 8:30 – 10:00 in HS 10.11

Exam: at the end of the semester
(dates will be fixed and announced on uni-online)

Documents (slides, videos, panel writing):

Moodle platform

(partially on <https://chemie.uni-graz.at/de/pc-tc/lehre/>)

Physical Chemistry 1 – Structure and Matter

winter term 2020/21

Contact:

Univ. Prof. Dr. Leonhard Grill
Abteilung Physikalische und Theoretische Chemie
Universität Graz, Heinrichstrasse 28, 5. OG
<http://www.nanograz.com>
E-Mail: leonhard.grill@uni-graz.at
no office hours (contact by e-mail)

Secretary (for all administrative and exam issues):

Frau Kogler and Frau Schmid
Abteilung Physikalische und Theoretische Chemie
Heinrichstrasse 28, 4. OG

CONTENTS (english)

1. Solids

- 1.1 Crystals (single crystals, entropic aspects)
- 1.2 Crystal structures (Miller indices, unit cells, Bravais lattices)
- 1.3 Close-packing (hexagonal and cubic)
- 1.4 Crystal symmetries (rotational axis, Quasicrystals)
- 1.5 Diffraction (Bragg's law, distances of lattice planes)
- 1.6 Reciprocal lattice (definition, Laue equations)
- 1.7 Scattering factor and structure factor (systematic absences, Fourier synthesis)
- 1.8 X-ray diffraction in chemistry (DNA diffraction)
- 1.9 Particle diffraction (role of the mass, neutron diffraction)
- 1.10 Classes of solids (radius ratio rule, sp^2 and sp^3 hybridization)
- 1.11 Electronic properties (Drude model, Fermi-Dirac distribution, bands)
- 1.12 Electric conductivity in solids (absorption edge, semiconductors, doping)

2. Interfaces

- 2.1 How much is the interface?
- 2.2 Thermodynamic view (interface energy, anisotropy)
- 2.3 Adsorption at interfaces (pressure and temperature, physisorption, chemisorption)
- 2.4 Growth processes (different mechanisms, energies, epitaxy)
- 2.5 Heterogeneous catalysis (active sites, „poisons“, Sabatier principle, Haber-Bosch process)

3. Liquids

- 3.1 Order and disorder (from solid to liquid, x-ray diffraction at liquids)
- 3.2 Liquid crystals (isotropy and anisotropy, smectic and nematic phases, LCD)
- 3.3 Glasses (structure, softening range)

4. Macromolecules

- 4.1 Properties (molar mass, MALDI, Rayleigh scattering)
- 4.2 Structures (polymers, hierarchy, chain length, proteins, potential energy)
- 4.3 Colloids (colloid classes, stabilization, electrical double layer)

INHALT (deutsch)

1. Festkörper

- 1.1 Kristalle (Einkristall, entropische Betrachtung)
- 1.2 Kristallstrukturen (Miller'sche Indizes, Elementarzellen, Bravaisgitter)
- 1.3 Dichte Kugelpackungen (hexagonal und kubisch dichtgepackt)
- 1.4 Kristallsymmetrien (Drehachsen, Quasikristalle)
- 1.5 Beugung am Kristallgitter (Bragg'sches Gesetz, Abstand der Gitterebenen)
- 1.6 Reziprokes Gitter (Bezug zum realen Gitter, Laue Gleichungen)
- 1.7 Streufaktor und Strukturfaktor (systematische Auslöschungen, Fouriersynthese)
- 1.8 Röntgenbeugung in der Chemie (DNA Beugungsmuster)
- 1.9 Beugung mit Teilchen (Einfluss der Masse, Neutronenbeugung)
- 1.10 Festkörperklassen (Radienverhältnisregel, sp^2 und sp^3 Hybridisierung)
- 1.11 Elektronische Eigenschaften (Drude Modell, Fermi-Dirac Verteilung, Bänder)
- 1.12 Elektrische Leitung in Festkörpern (Absorptionskante, Halbleiter, Dotierung)

2. Grenzflächen

- 2.1 Wieviel ist Grenzfläche?
- 2.2 Thermodynamische Betrachtung (Grenzflächenenergie, Anisotropie)
- 2.3 Adsorptionsmechanismen (Druck und Temperatur, Physisorption, Chemisorption)
- 2.4 Wachstumsprozesse (verschiedene Modi, Energiebetrachtung, Epitaxie)
- 2.5 Heterogene Katalyse (active sites, „Gifte“, Vulkankurve, Haber-Bosch Prozess)

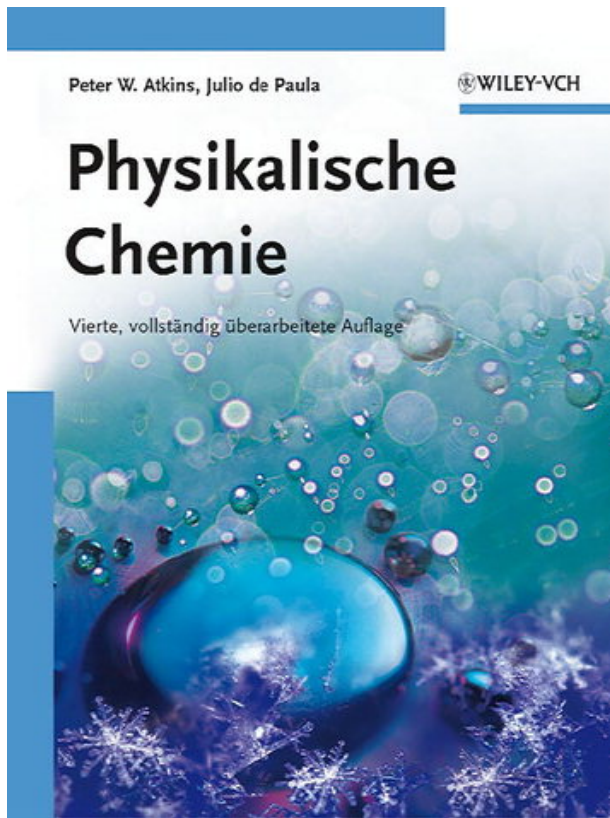
3. Flüssigkeiten

- 3.1 Ordnung und Unordnung (von fest zu flüssig, Röntgenbeugung an Flüssigkeiten)
- 3.2 Flüssigkristalle (Isotropie und Anisotropie, smektisch und nematisch, LCD)
- 3.3 Gläser (Struktur, Erweichungsbereich)

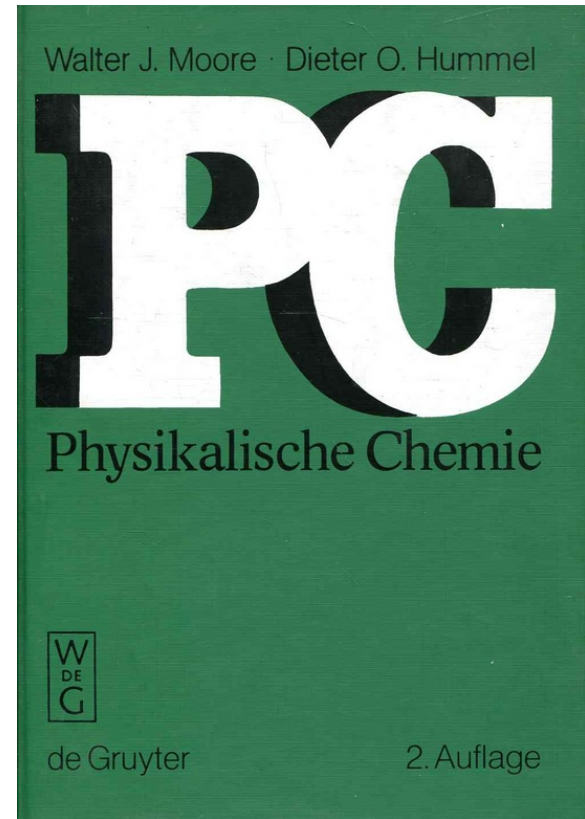
4. Makromoleküle

- 4.1 Eigenschaften (Molmasse, Heterogenitätsindex, MALDI, Rayleigh-Streuung)
- 4.2 Strukturen (Polymere, Hierarchie, statistische Knäuel, Proteine, Potentialenergie)
- 4.3 Kolloide (Sol, Aerosol, Emulsion, Stabilisierung, Elektrische Doppelschicht)

Literature (books are available in english and german)



Atkins, de Paula
Physikalische Chemie
Wiley



Moore
Physikalische Chemie
de Gruyter

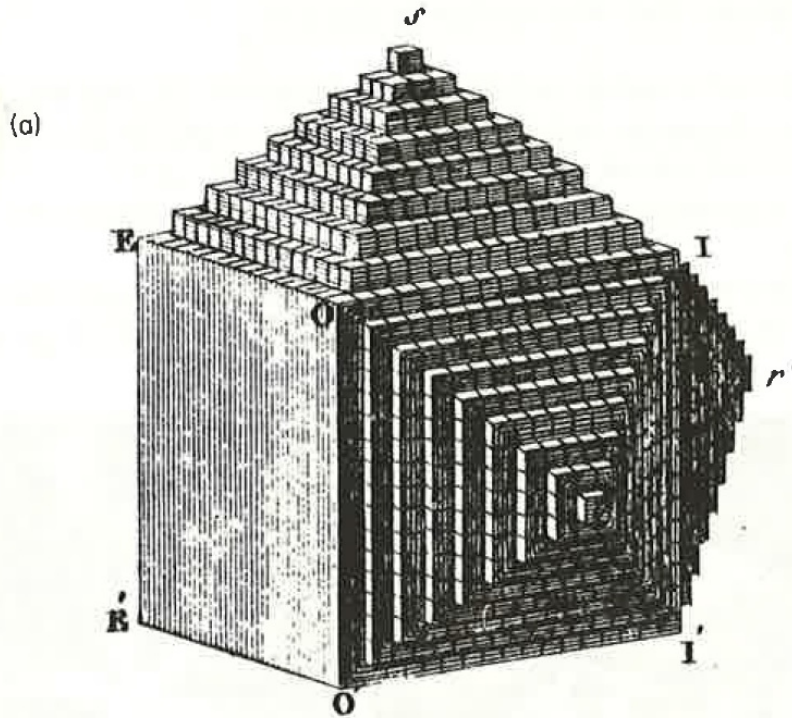
Außerdem:

Physikalische Chemie, G. M. Barrow

Polymer Physics, U. W. Gedde

Einführung in die Festkörperphysik, K. Kopitzki

Concept of crystal structures



SEM image

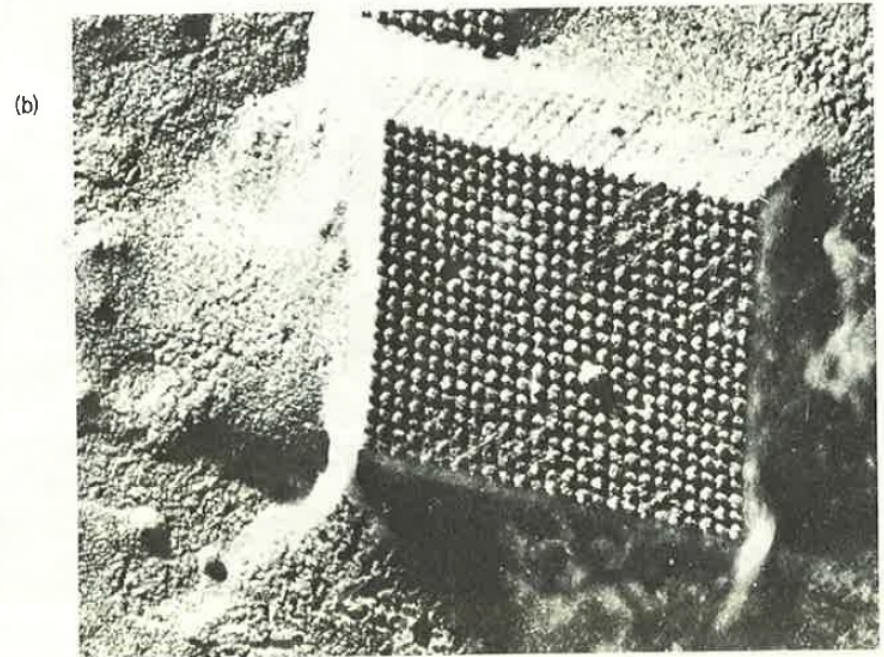
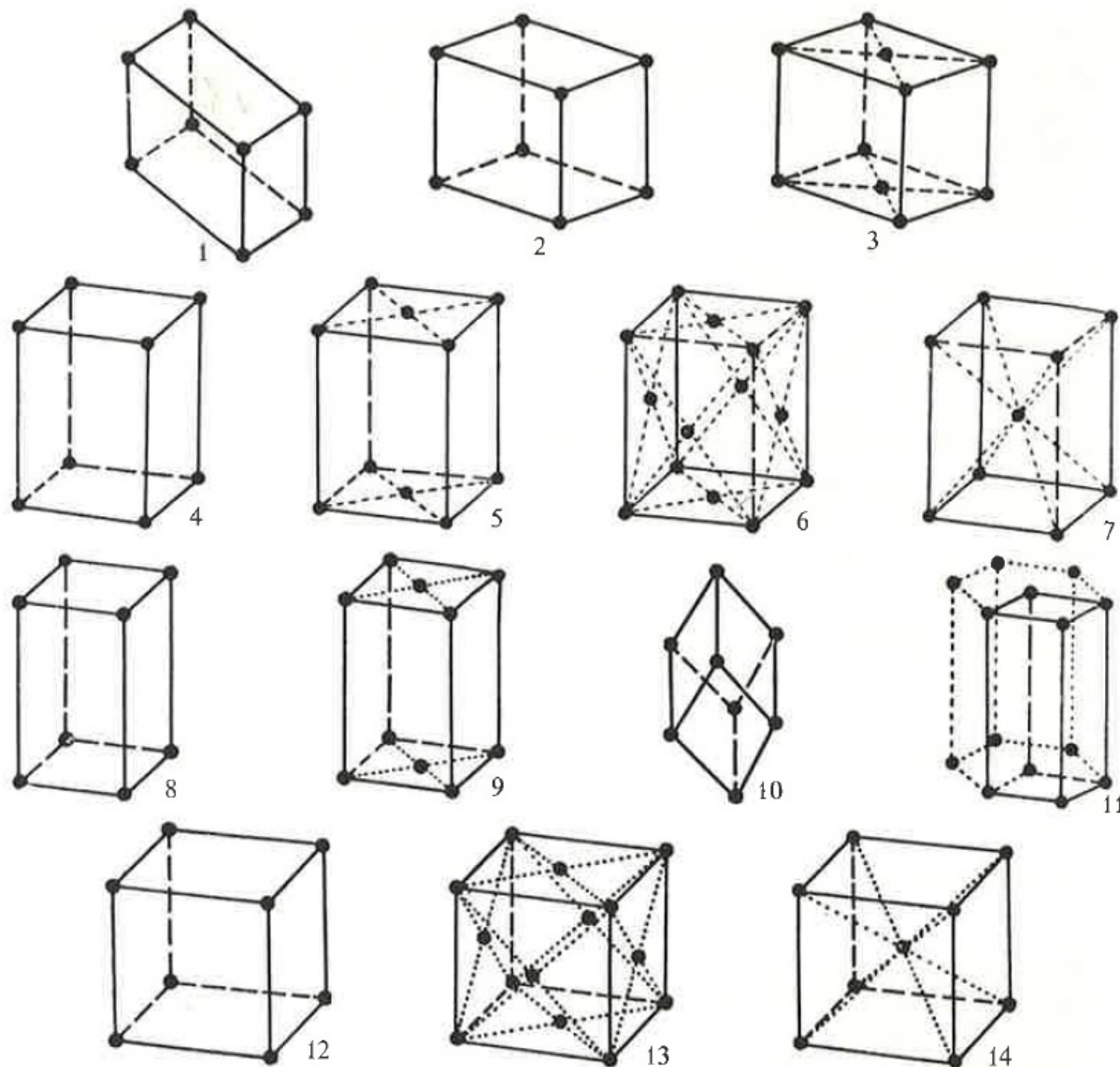


Abb. 21.2 (a) Modell einer von René Haüy vorgeschlagenen Kristallstruktur (*Traite élémentaire de Physique*, Vol. 1, Imprimerie de Delance et Leseur, Paris 1803); (b) Rhombischer Kristall des Tabakmosaikvirus, der eine besonders hohe molekulare Ordnung demonstriert; Vergrößerung: 42 000fach. (Nach Ralph W. G. Wyckoff und L.W. Labaw, National Institutes of Health, Bethesda, Md., USA.)



Nr.	Bezeichnung
1	Triklin
2	Monoklin
3	Monoklin basiszentriert
4	Rhombisch
5	Rhombisch basiszentriert
6	Rhombisch flächenzentriert
7	Rhombisch raumzentriert
8	Tetragonal
9	Tetragonal basiszentriert
10	Rhomboedrisch
11	Hexagonal
12	Kubisch
13	Kubisch flächenzentriert
14	Kubisch raumzentriert

Abb. 21.5 Die 14 Kristallgitter nach Bravais (aus H. Neff, Grundlagen und Anwendung der Röntgenfeinstrukturanalyse, 2. Aufl., Oldenbourg, München 1962).

Crystal structures of the elements

1 1.00794 H Wasserstoff 14,4 0,084 3,75 6,12 32 79 Hex	3 6,941 Li Lithium 13,1 0,53 3,491 123 205 bcc	4 9,012182 Be Beryllium 5,0 1,85 2,27 90 3,59 140 Hex
11 22,989770 Na Natrium 23,7 0,97 4,225 154 223 bcc	12 24,3050 Mg Magnesium 13,97 1,74 3,21 136 3,59 172 Hex	
19 39,0983 K Kalium 45,46 0,86 5,225 203 277 bcc	20 40,078 Ca Calcium 29,9 1,54 5,58 203 223 fcc	
37 85,4678 Rb Rubidium 55,9 1,53 5,585 216 298 bcc	38 87,62 Sr Strontium 33,7 2,60 6,05 191 245 fcc	
55 132,90545 Cs Caesium 71,07 1,88 6,045 235 334 bcc	56 137,327 Ba Barium 39,24 3,51 5,02 196 278 bcc	
87 223,019 Fr Francium - - - - - bcc	88 226,0254 Ra Radium 45,20 5,0 - - - bcc	

Atommasse [u] → 1,00794
 Ordnungszahl → 1
 Atomvolumen [cm³/mol] → 14,4
 Dichte [g/cm³] bei 20°C → 0,084
 Gas: [g/l] bei 1013 mBar → 32
 a, Gitterkonstante [Å] → 3,75
 c, Gitterkonstante [Å] → 79

Symbol → **H**
 Name → Wasserstoff
 Kristallstruktur → Hex
 Kovalenter Atomradius [pm] → 32
 Edelgase: Van-der-Waals Radius → 79
 Atomradius [pm] → 37

Ra ...radioaktives Element

He ...bei raumtemperatur gasförmiges Element
Br ...bei raumtemperatur flüssiges Element

Kürzel für die Kristallstrukturen:
 fcc ...kubisch flächenzentriert
 bcc ...kubisch raumzentriert
 Hex ...hexagonal
 Tetr ...tetragonal
 Mon ...monoklin
 Rhc ...rhomboedrisch
 sc ...kubisch primitiv
 Orb ...orthorhombisch
 Temp ...temperaturabhängig

5 10,811 B Bor 4,6 2,34 - 82 - 117 - Hex*	6 12,0107 C Kohlenstoff 4,58 2,25 - 3,567 91 Hex*	7 14,00674 N Stickstoff 17,3 1,17 5,66 75 - 75 Hex	8 15,9994 O Sauerstoff 14,0 1,33 - 73 - 65 Hex	9 18,9984032 F Fluor 17,1 1,58 - 72 - 57 Hex	10 20,1797 Ne Neon 16,7 0,84 4,46 71 51 fcc
13 26,981538 Al Aluminium 27,0 10,0 4,05 118 182 fcc	14 28,0855 Si Silicium 12,1 2,23 5,430 111 146 fcc (Diamond)	15 30,973761 P Phosphor 17,0 1,82 - 106 - 123 Mon	16 32,06 S Schwefel 15,5 2,07 - 102 - 109 Orb	17 35,4527 Cl Chlor 22,7 2,95 - 99 - 97 Orb	18 39,948 Ar Argon 26,5 1,66 5,31 71 51 fcc
25 54,938049 Mn Mangan 1,39 7,20 - 117 - 179 bcc	26 55,845 Fe Eisen 7,1 7,87 2,51 116 172 bcc	27 58,933200 Co Cobalt 6,7 8,9 2,51 116 167 Hex	28 58,9334 Ni Nickel 6,59 8,90 3,52 115 162 fcc	29 63,546 Cu Kupfer 7,1 8,92 3,61 117 157 fcc	30 65,39 Zn Zink 9,2 7,14 2,66 125 153 Hex
31 69,723 Ga Gallium 11,8 5,90 - 126 - 181 Kub	32 72,61 Ge Germanium 13,6 5,32 5,658 122 152 fcc (Diamond)	33 74,921600 As Arsen 13,1 5,72 - 120 - 133 Rb	34 78,96 Se Selen 16,45 4,81 - 116 - 122 Hex (Kette)	35 79,904 Br Brom 23,5 3,12 - 114 - 112 Orb	36 83,80 Kr Krypton 38,9 3,48 5,64 112 103 fcc
43 97,9072 Tc Technetium 8,5 11,5 2,74 127 195 Hex	44 101,07 Ru Ruthenium 8,3 12,3 2,71 125 189 Hex	45 102,90550 Rh Rhodium 8,3 12,0 3,89 126 183 fcc	46 106,42 Pd Palladium 8,9 12,0 3,89 126 179 fcc	47 107,8682 Ag Silber 10,3 13,1 4,05 134 175 fcc	48 112,411 Cd Cadmium 13,1 8,56 2,98 148 171 Hex
49 114,818 In Indium 15,7 7,30 6,49 141 200 Tetr	50 118,710 Sn Zinn 16,3 7,30 6,49 141 172 Tetr*	51 121,760 Sb Antimon 18,23 6,68 - 140 - 153 Rb	52 127,60 Te Tellur 20,5 6,0 - 136 - 142 Hex (Kette)	53 126,90447 I Iod 25,74 4,93 - 133 - 132 Orb	54 131,29 Xe Xenon 37,3 5,49 6,13 131 124 fcc
72 178,49 Hf Hafnium 13,6 13,6 3,19 144 216 Hex	73 180,9479 Ta Tantal 9,53 20,5 3,30 134 202 bcc	74 183,84 W Wolfram 8,55 20,5 2,76 126 197 bcc	75 186,207 Re Rhenium 8,49 22,4 2,74 126 197 Hex	76 190,23 Os Osmium 8,54 22,4 3,84 127 187 Hex	77 192,227 Ir Iridium 9,10 21,4 3,92 130 187 fcc
78 195,078 Pt Platin 9,10 21,4 4,08 134 179 fcc	79 196,9665 Au Gold 10,2 19,32 4,08 134 179 fcc	80 200,59 Hg Quecksilber 14,82 13,6 - 149 - 179 Rb	81 204,3833 Tl Thallium 17,2 17,2 3,46 148 208 Hex	82 207,2 Pb Blei 18,17 11,4 4,95 147 - 181 fcc	83 208,98038 Bi Bismut 21,3 9,8 - 146 - 163 Rb
84 208,98038 Po Polonium 22,23 9,4 3,34 146 153 sc	85 209,9871 At Astat - - - - - -	86 222,0176 Rn Radon 50,5 9,23 - - - 134 -			

* ...tritt auch als Diamant auf (C und Sn)

57 138,9055 La Lanthan 20,73 6,17 3,77 169 274 Hex	58 140,116 Ce Cer 20,67 6,65 5,16 165 270 fcc	59 140,90765 Pr Praseodym 20,6 6,77 3,67 165 267 Hex	60 144,24 Nd Neodym 20,6 7,0 3,66 164 264 Hex	61 144,9127 Pm Neodym 22,39 7,22 - 163 - 262 Hex	62 150,36 Sm Samarium 19,95 7,52 4,58 162 259 Rb	63 151,964 Eu Europium 28,9 5,24 4,58 165 256 bcc	64 157,25 Gd Gadolinium 19,9 7,90 3,63 161 254 Hex	65 158,92534 Tb Terbium 19,2 8,23 5,78 161 251 Hex	66 162,50 Dy Dysprosium 19,0 8,55 5,65 159 249 Hex	67 164,93032 Ho Holmium 18,7 8,79 5,58 158 247 Hex	68 167,26 Er Erbium 18,4 9,06 5,59 157 245 Hex	69 168,93421 Tm Thulium 18,1 9,32 5,56 156 242 Hex	70 173,04 Yb Ytterbium 24,79 6,69 3,34 174 240 fcc	71 174,967 Lu Lutetium 17,78 9,84 3,50 156 225 Hex
89 227,0277 Ac Actinium 22,54 10,1 5,31 - - - fcc	90 232,0381 Th Thorium 19,9 11,7 5,08 165 - - fcc	91 231,03689 Pa Protactinium 15,0 15,4 3,92 142 - - Tetr	92 238,02891 U Uran 12,59 19,0 - 142 - - Tetr	93 237,0467 Np Neptunium 11,62 20,4 - - - Tetr	94 244,0642 Pu Plutonium 12,32 19,8 3,64 - - - Mon	95 243,0614 Am Americium 17,86 13,6 - - - hex	96 247,0703 Cm Curium 18,28 - - - - - -	97 247,0703 Bk Berkelium - - - - - -	98 251,0766 Cf Californium - - - - - -	99 252,0830 Es Einsteinium - - - - - -	100 257,0851 Fm Fermium - - - - - -	101 289,1039 Md Mendelevium - - - - - -	102 289,1039 No Nobelium - - - - - -	103 262,1097 Lr Lawrencium - - - - - -

Special crystal structures

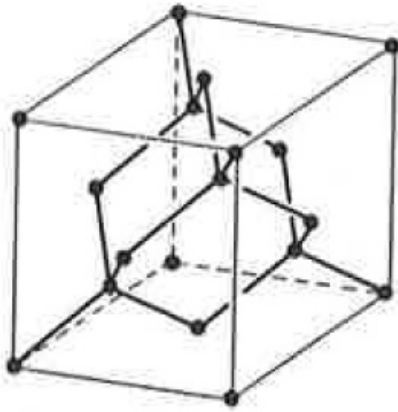


Fig. 1.7 Diamantstruktur

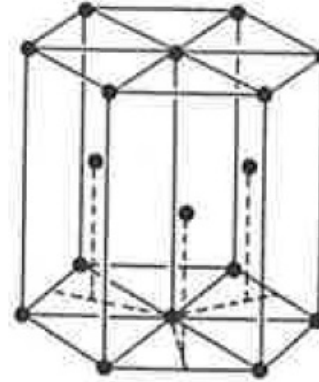


Fig. 1.8 Hexagonal dichteste Kugelpackung

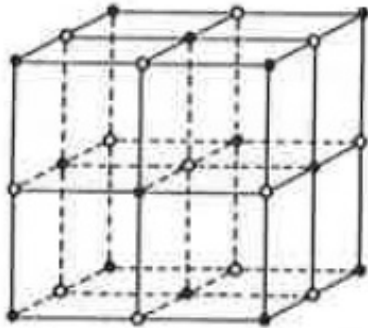


Fig. 1.10 Natriumchloridstruktur

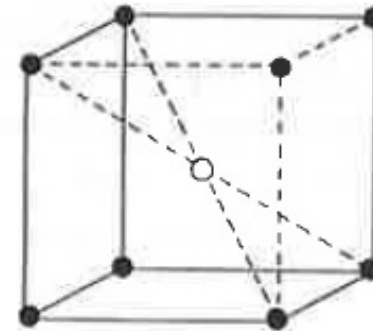


Fig. 1.11 Cäsiumchloridstruktur

Close-packing

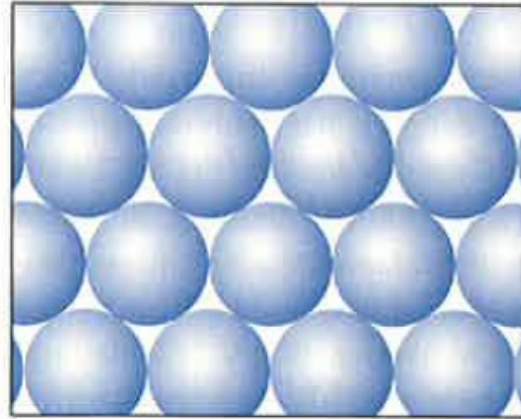


Abb. 20-32 Die erste Schicht von dicht gepackten Kugeln, die zum Aufbau einer dreidimensionalen dicht gepackten Struktur dient.

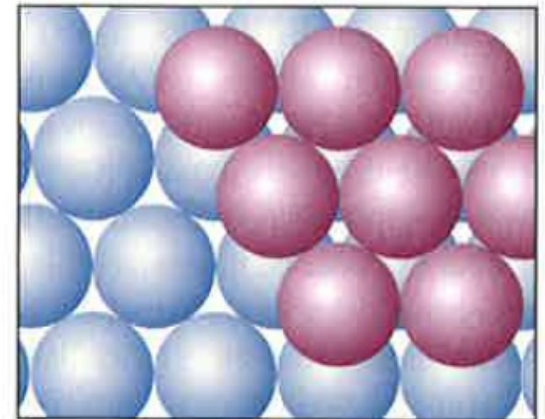
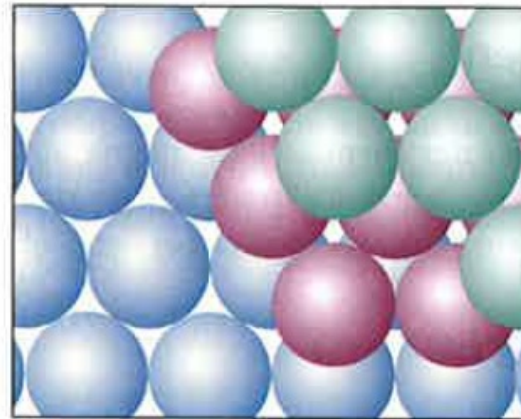
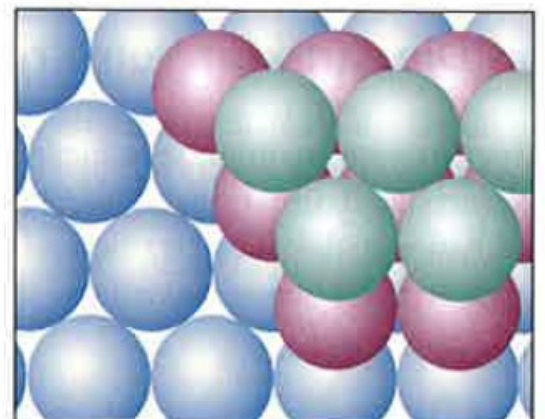


Abb. 20-33 Die zweite Schicht dicht gepackter Kugeln liegt über den Vertiefungen der ersten Schicht. Diese beiden Schichten bilden den AB-Teil der dreidimensionalen dichten Kugelpackungen.

Abb. 20-34 (a) Die dritte Schicht aus dicht gepackten Kugeln kann über den Lücken der zweiten Schicht liegen, die direkt über den Kugeln der ersten Schicht liegen. Man erhält so die Schichtfolge ABA, die einer hexagonal dichten Packung entspricht. (b) Stattdessen kann die dritte Schicht auch in den Lücken der zweiten Schicht liegen, die nicht über den Kugeln der ersten Schicht liegen. So entsteht die Schichtfolge ABC, die einer kubisch dichten Packung entspricht.



(a)



(b)

Quasicrystals

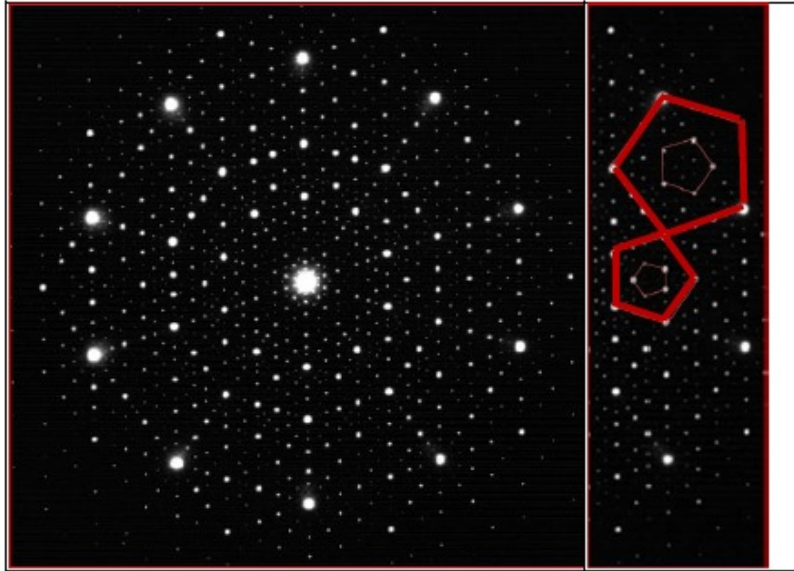


Figure 2. Electron diffraction pattern from an icosahedral quasicrystal. Note the presence of perfect pentagons highlighted in the diagram to the right. The linear scale between pentagons is τ , and the scale between a pentagon inscribed in another pentagon is τ^2 . One of the great challenges of quasicrystal structure work is also apparent in the image. The intensity distribution of the diffraction pattern varies over many orders of magnitude, even in electron diffraction, and measuring the crucial weak reflections in an X-ray diffraction pattern within a reasonable time frame only became possible with modern area detectors that were not around at the time of discovery.

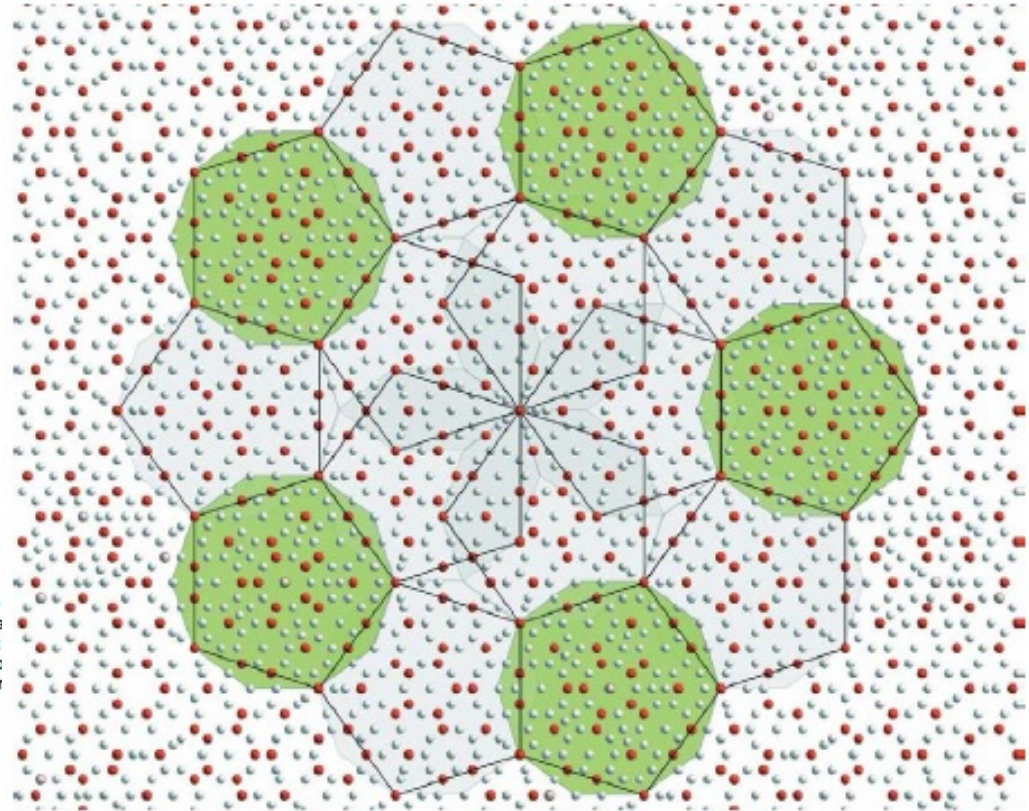


Figure 8. Section perpendicular to the decagonal axis of Al-Co-Ni³⁶.

Abstände der Netzebenen in Kristallen

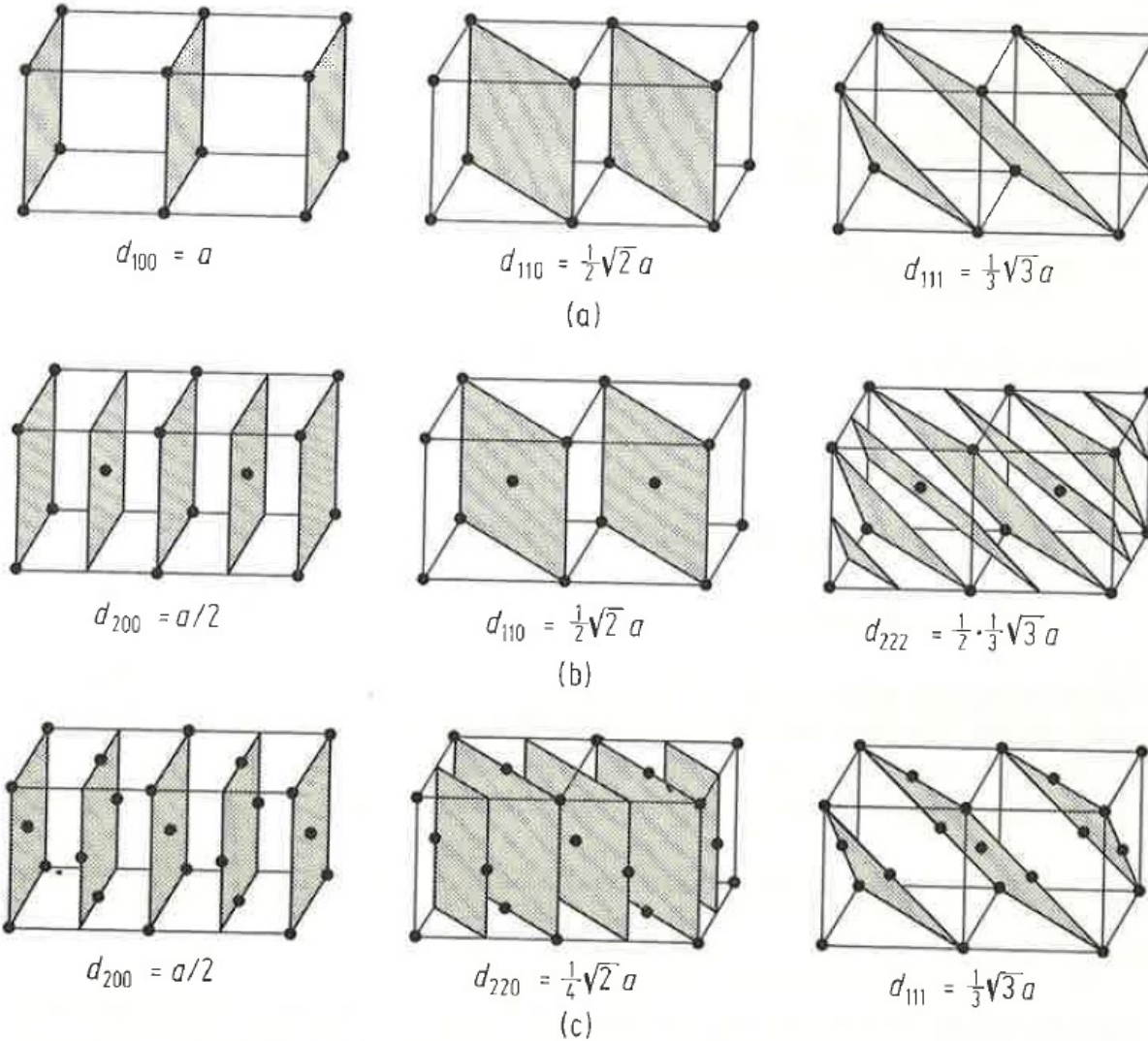
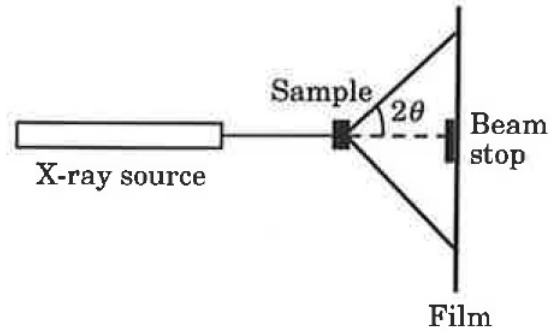


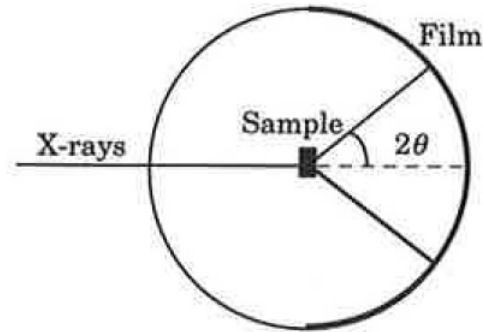
Abb. 21.13 Netzebenenabstände in kubischen Gittern. (a) einfach kubisch; (b) raumbzentriert kubisch; (c) flächenzentriert kubisch.

Diffraktometer

Flat-film camera



Debye-Scherrer camera



Diffractometer

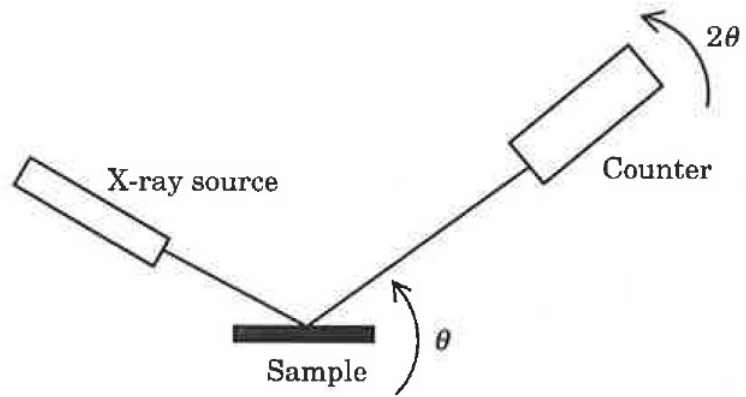
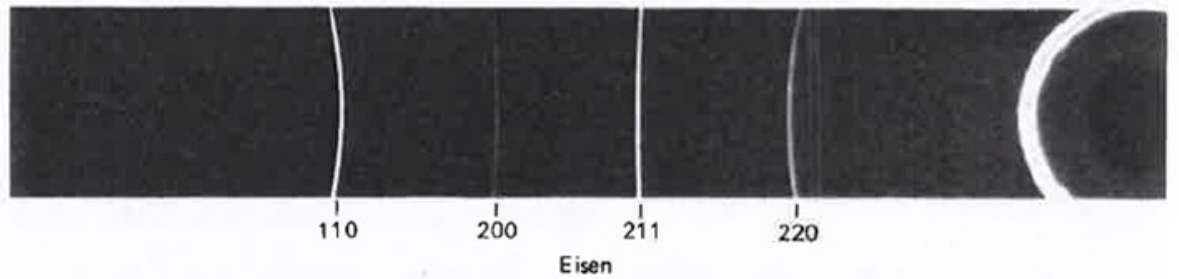
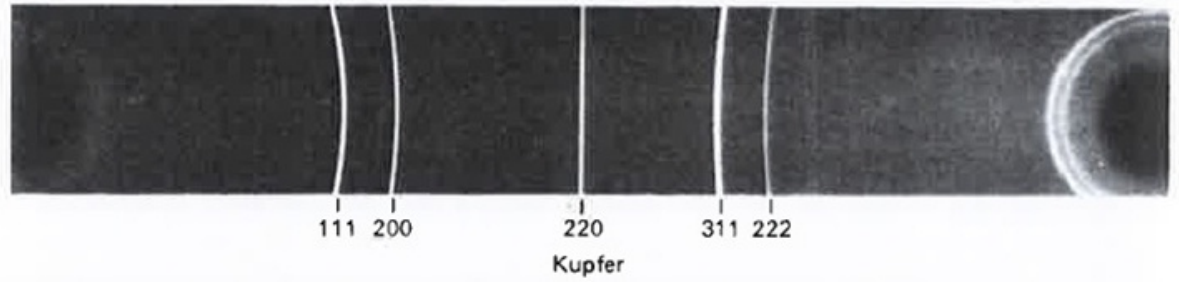
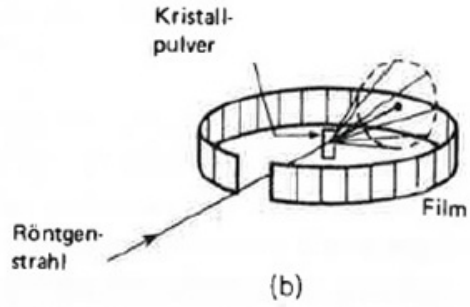
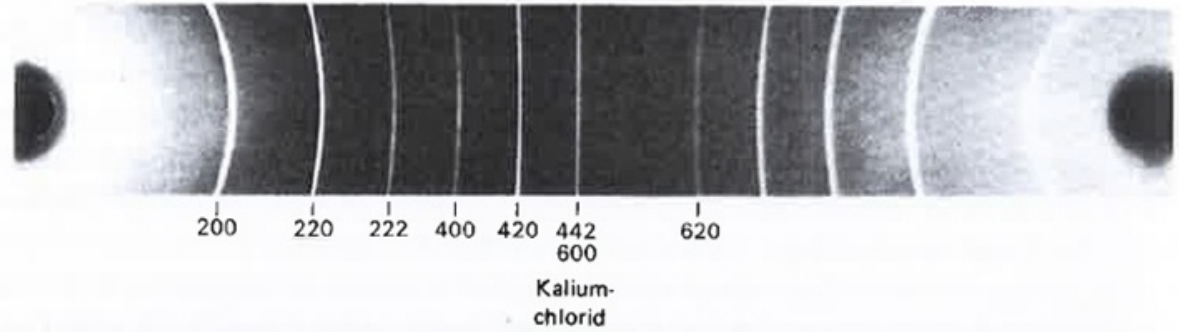
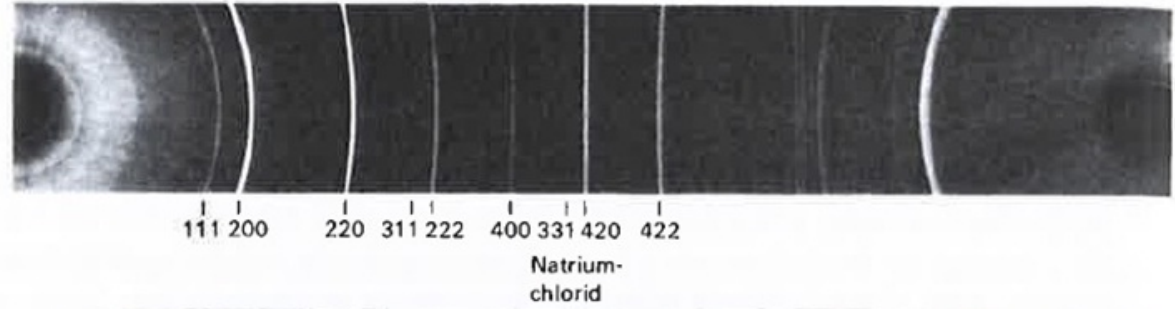
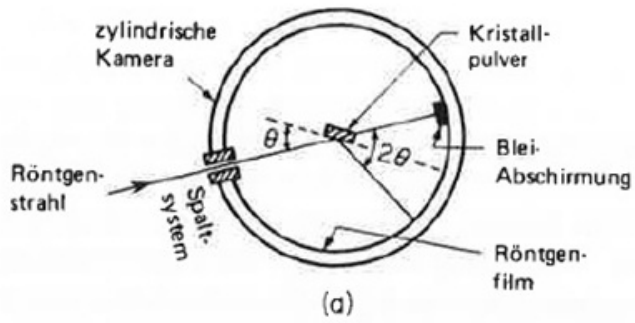
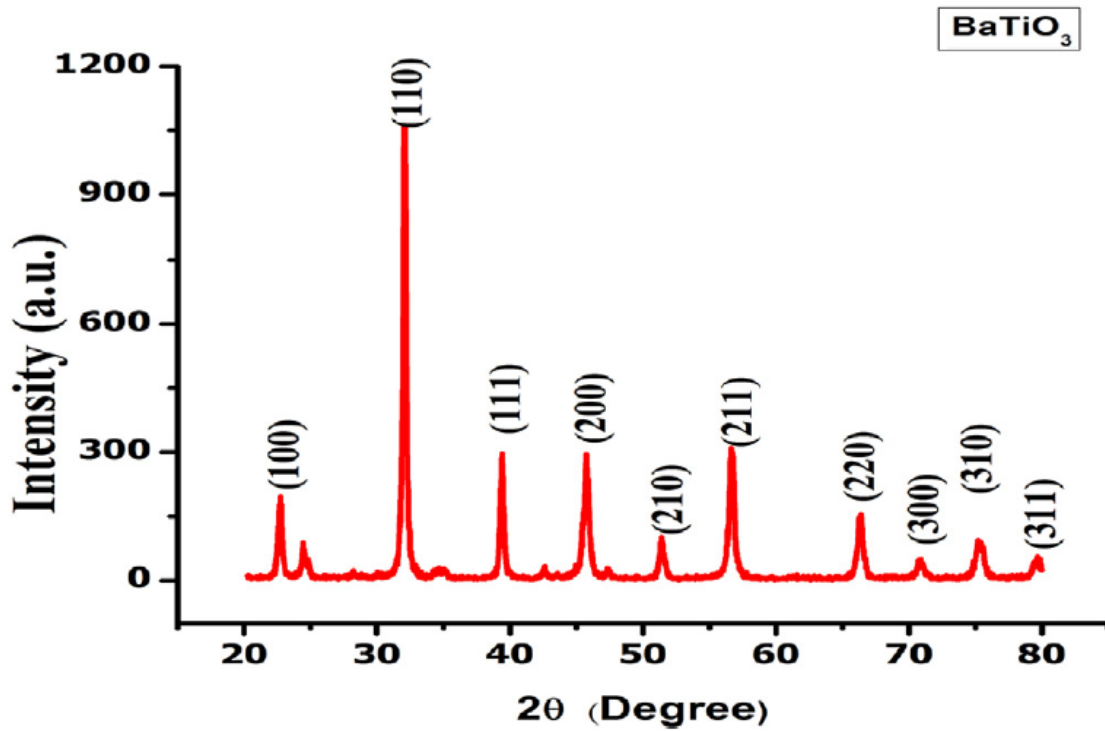
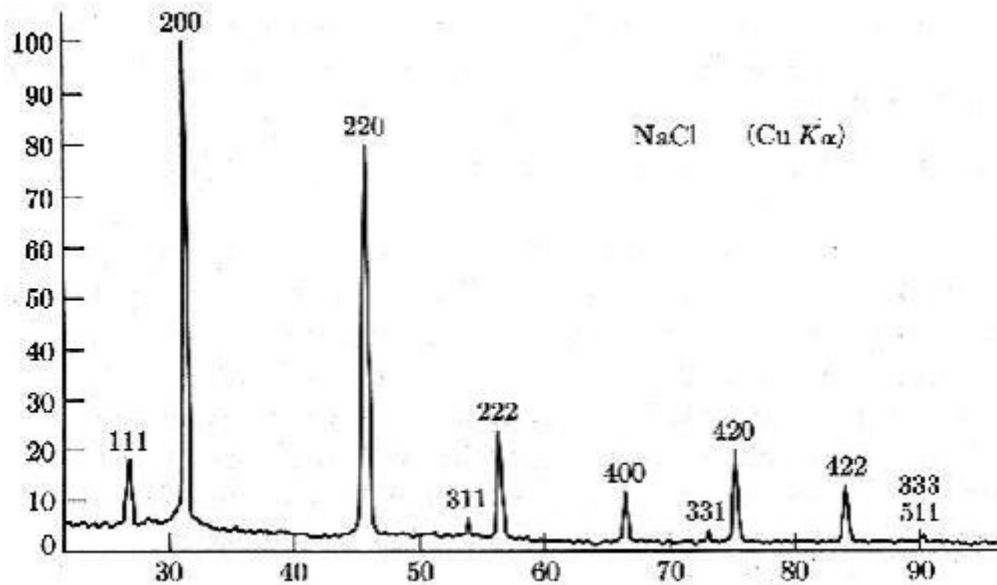


Figure 12.10 Wide-angle X-ray cameras and diffractometers.

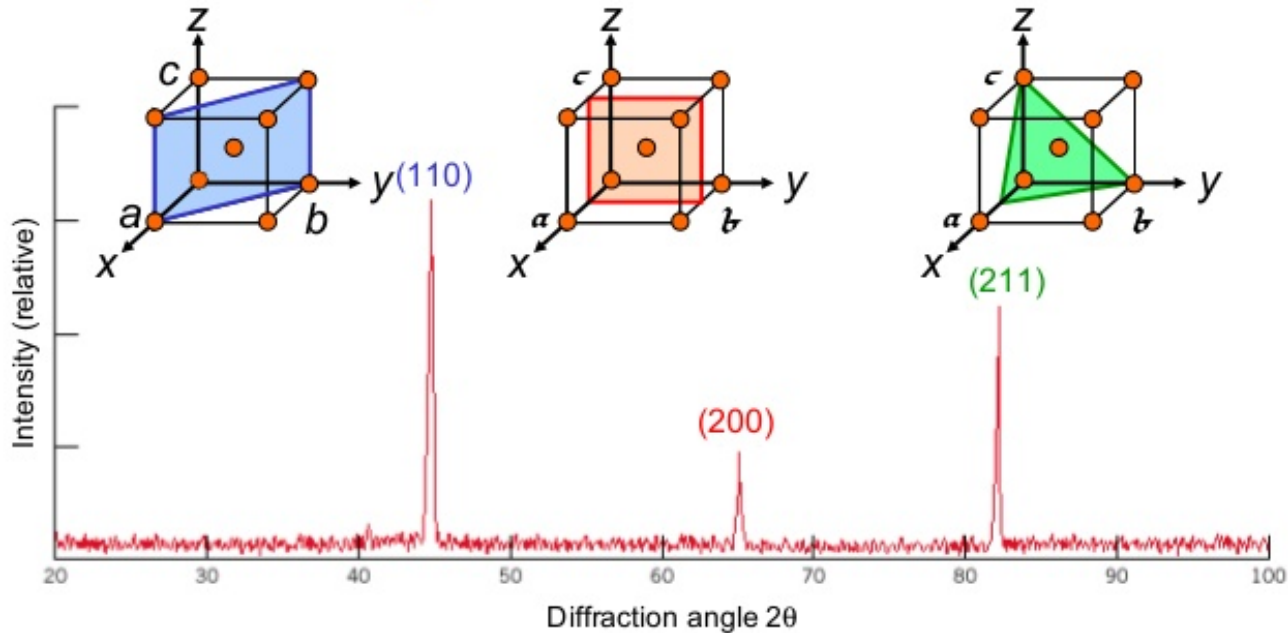




M. Singh et al., Sens. Actuat. B 241, 1170 (2017)



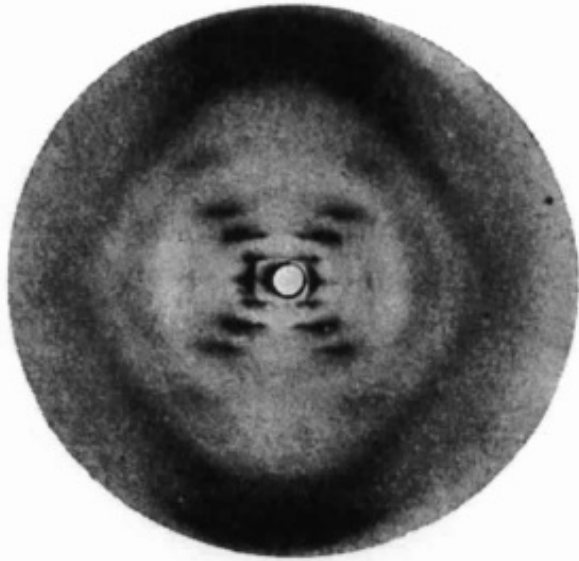
X-Ray Diffraction Pattern



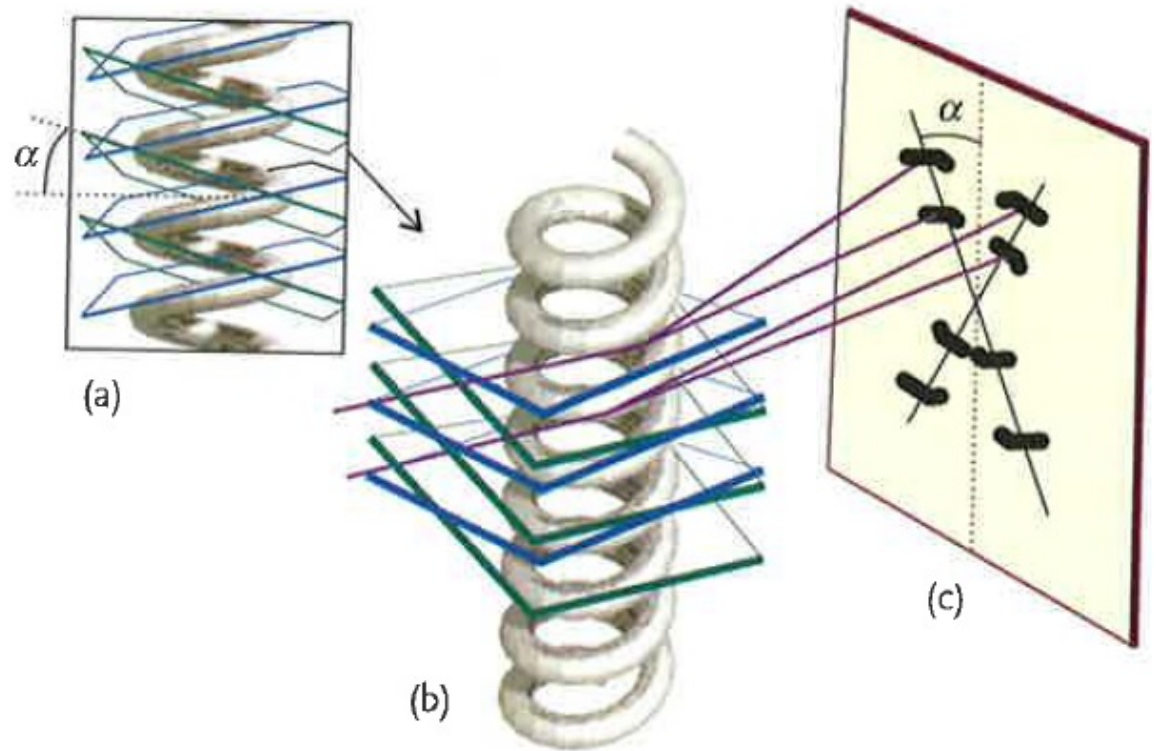
bcc lattice
(Fe)

Diffraction pattern for polycrystalline α -iron (BCC)

DNA in Röntgenbeugung



R. E. Franklin and R. E. Gosling,
Acta Cryst. 6, 672 (1953)



Röntgenkleinwinkelstreuung

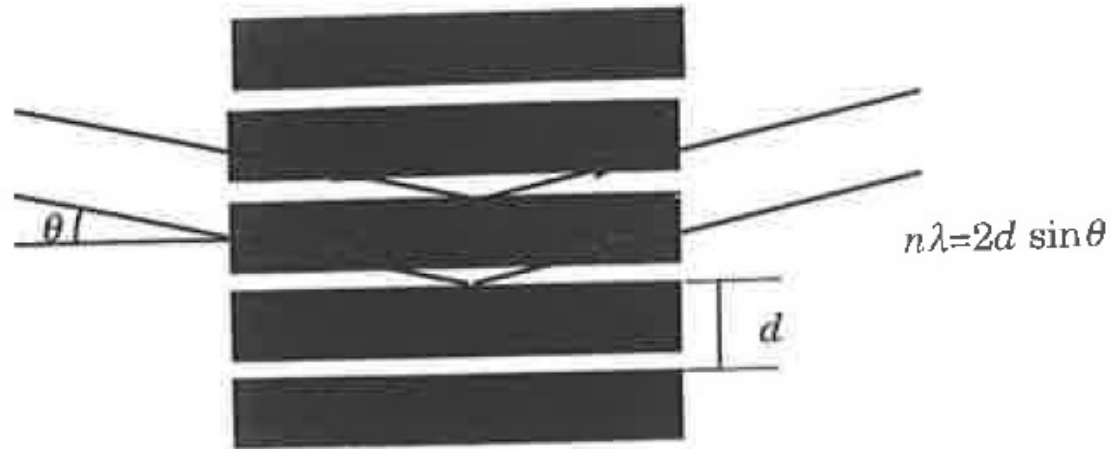
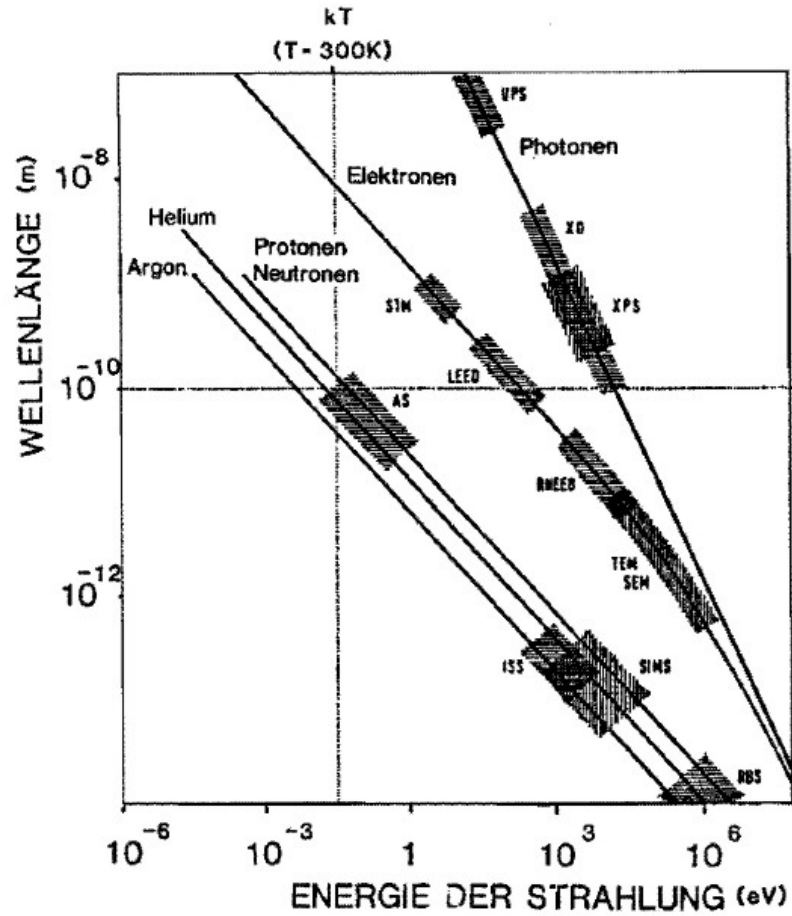
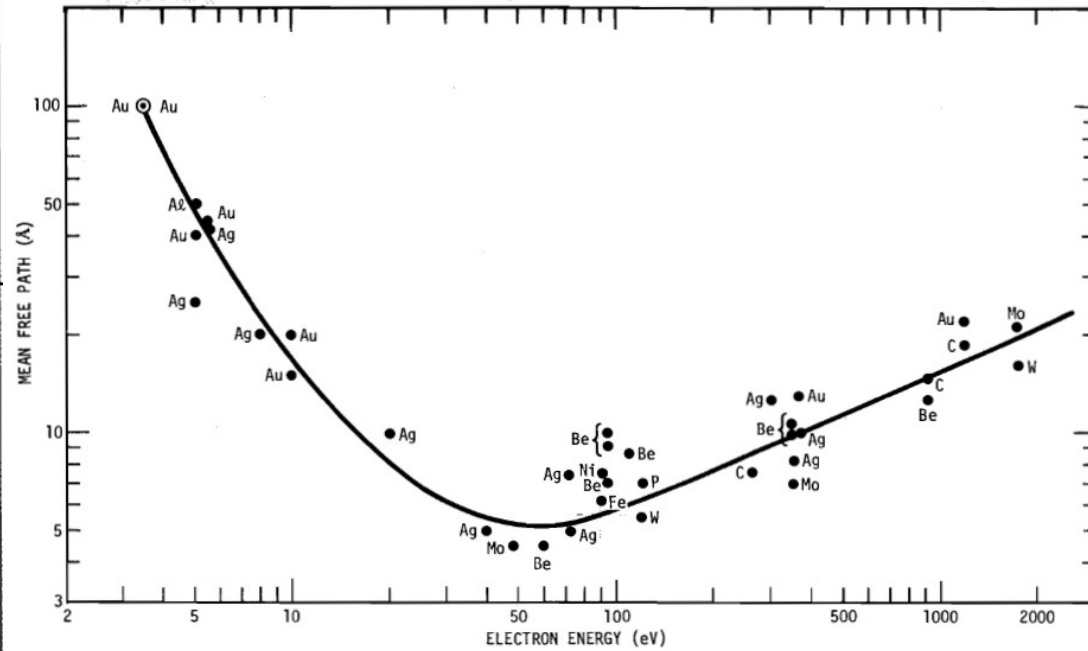


Figure 7.26 Small-angle diffraction from a stack of lamellar crystals (shaded areas) with the repeating distance (long period) d . The condition for constructive interference is expressed in the Bragg equation.

Beugung verschiedener Strahlungen



Mittlere freie Weglänge von Elektronen



G. A. Somorjai, *Chemistry in two dimensions: Surfaces*

Henzler/Göpel: *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Teubner

Zinkblendestruktur

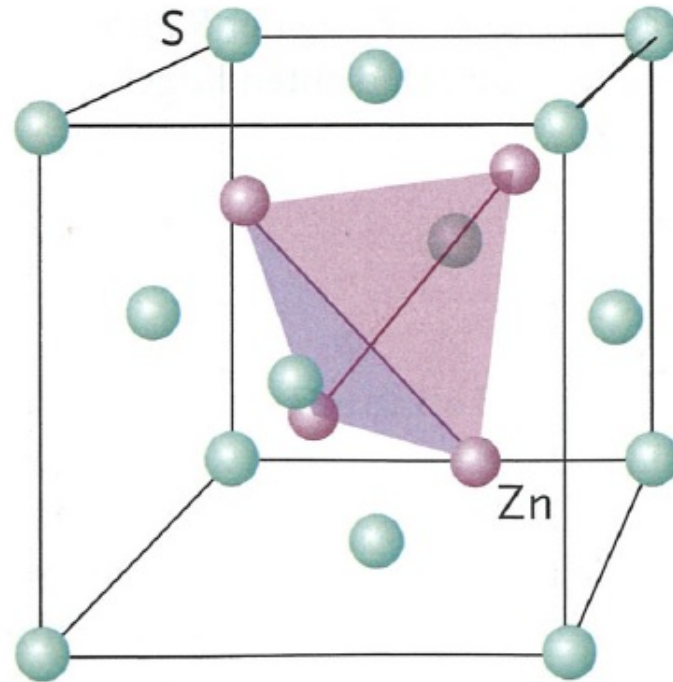
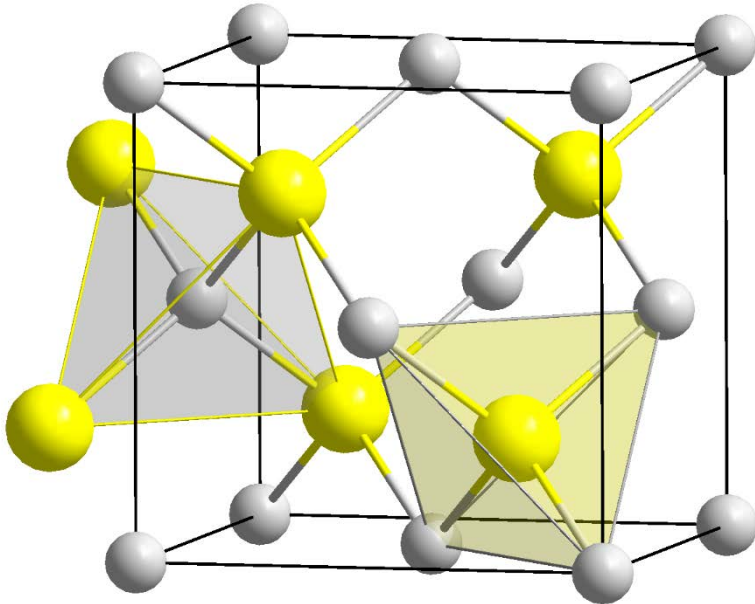
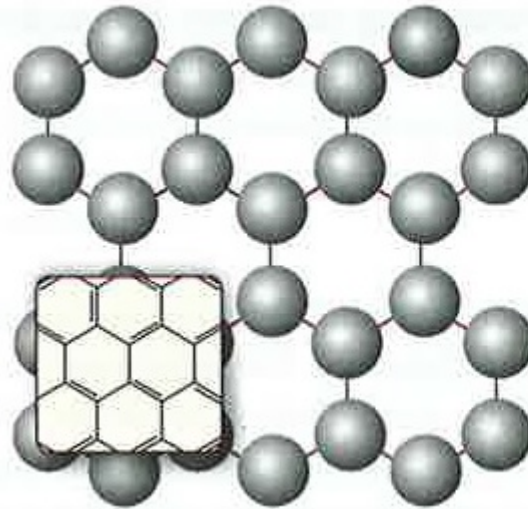


Abb. 20-39 Die Zinkblendestruktur von ZnS zeigt die Anordnung der Zinkatome in den Tetraederlücken des Schwefelgitters. Im Zentrum des Würfels innerhalb des Tetraeders aus Zinkatomen befindet sich noch ein weiteres Schwefelatom.

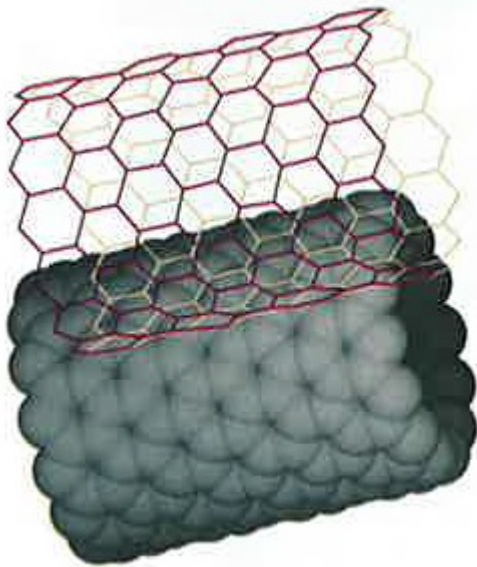
Kovalente Festkörper



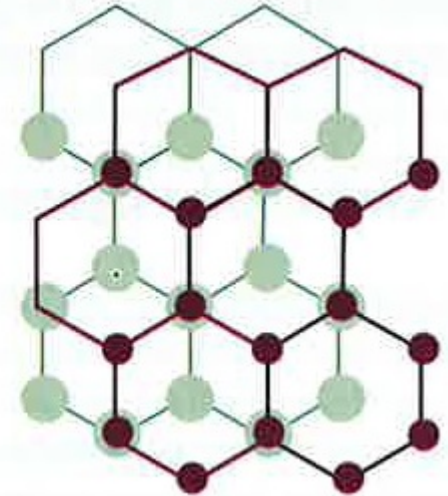
Diamant



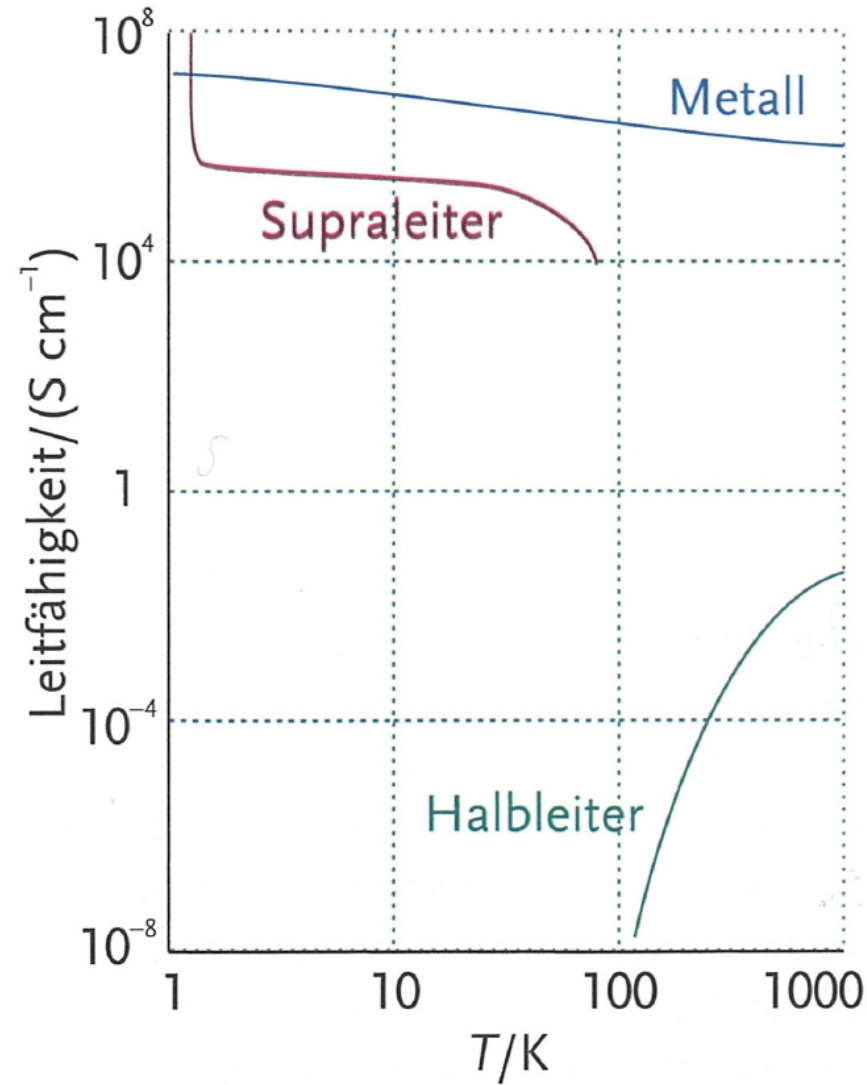
Graphit



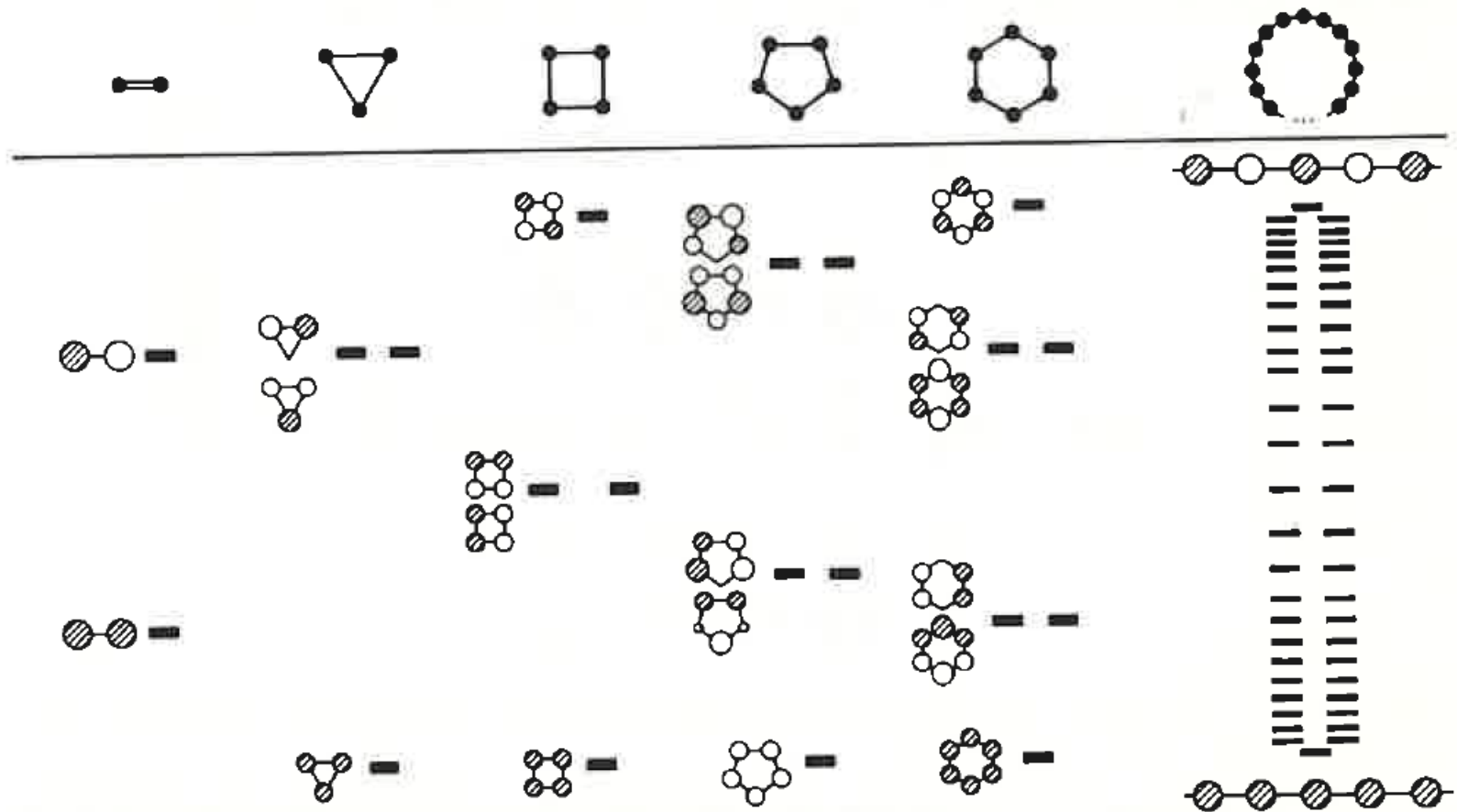
Carbon Nanotubes



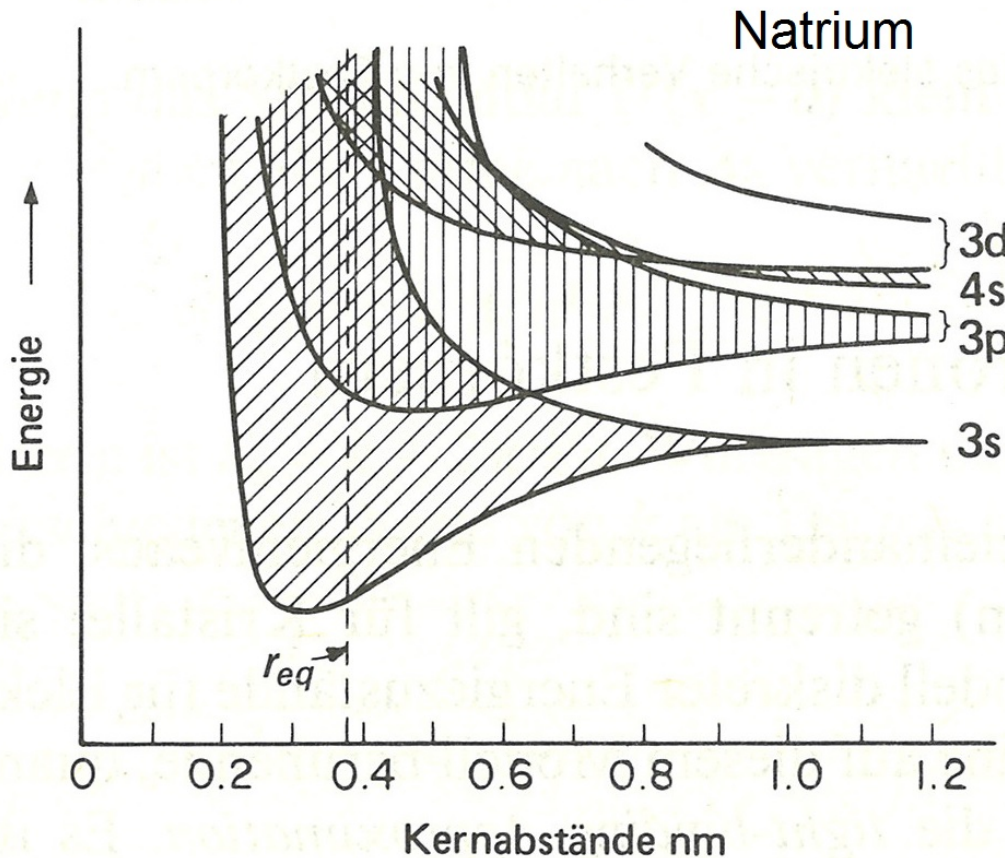
Elektrische Leitfähigkeit von Festkörpern



Orbitale



Bildung von Energiebändern



Quantenmechanische
Berechnung der Orbitale bei
Annäherung zweier Atome

Bandstruktur

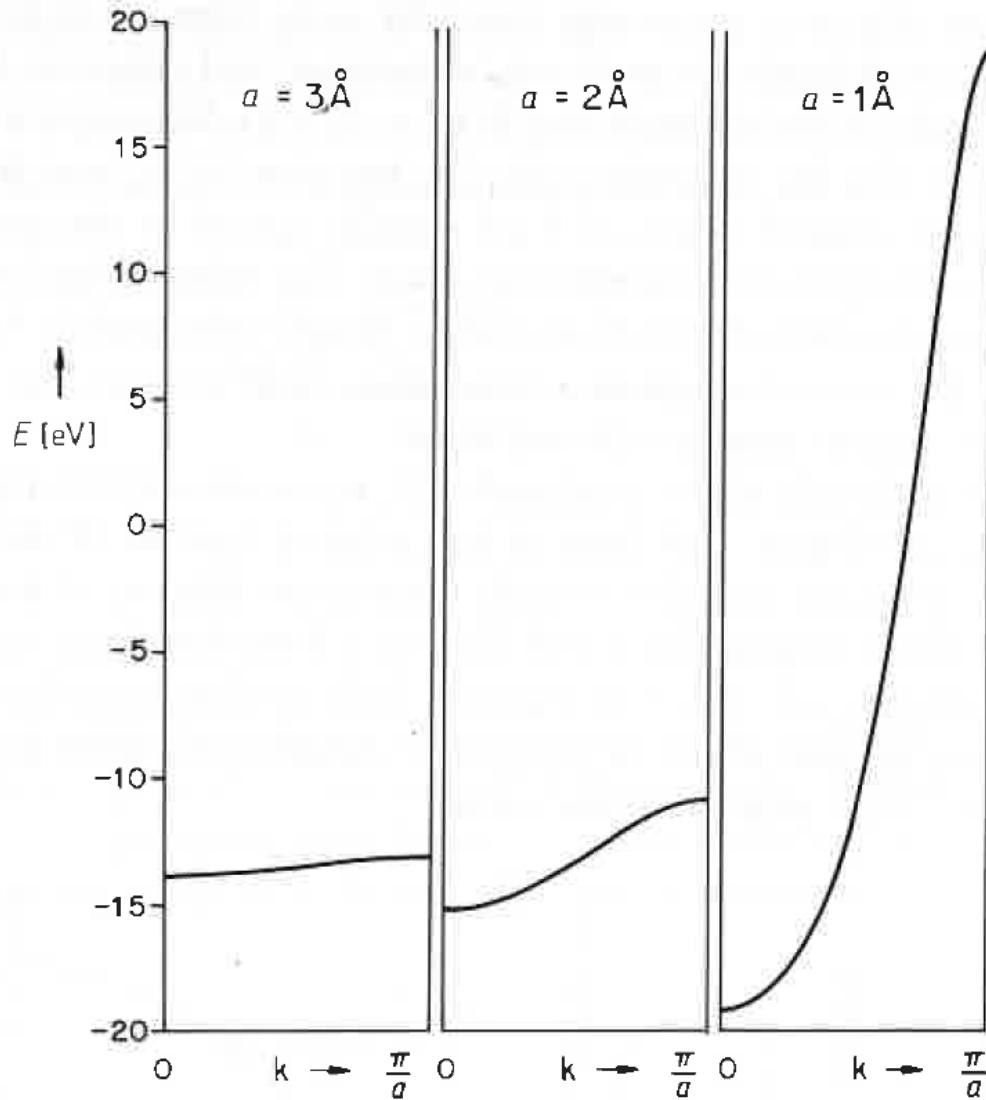
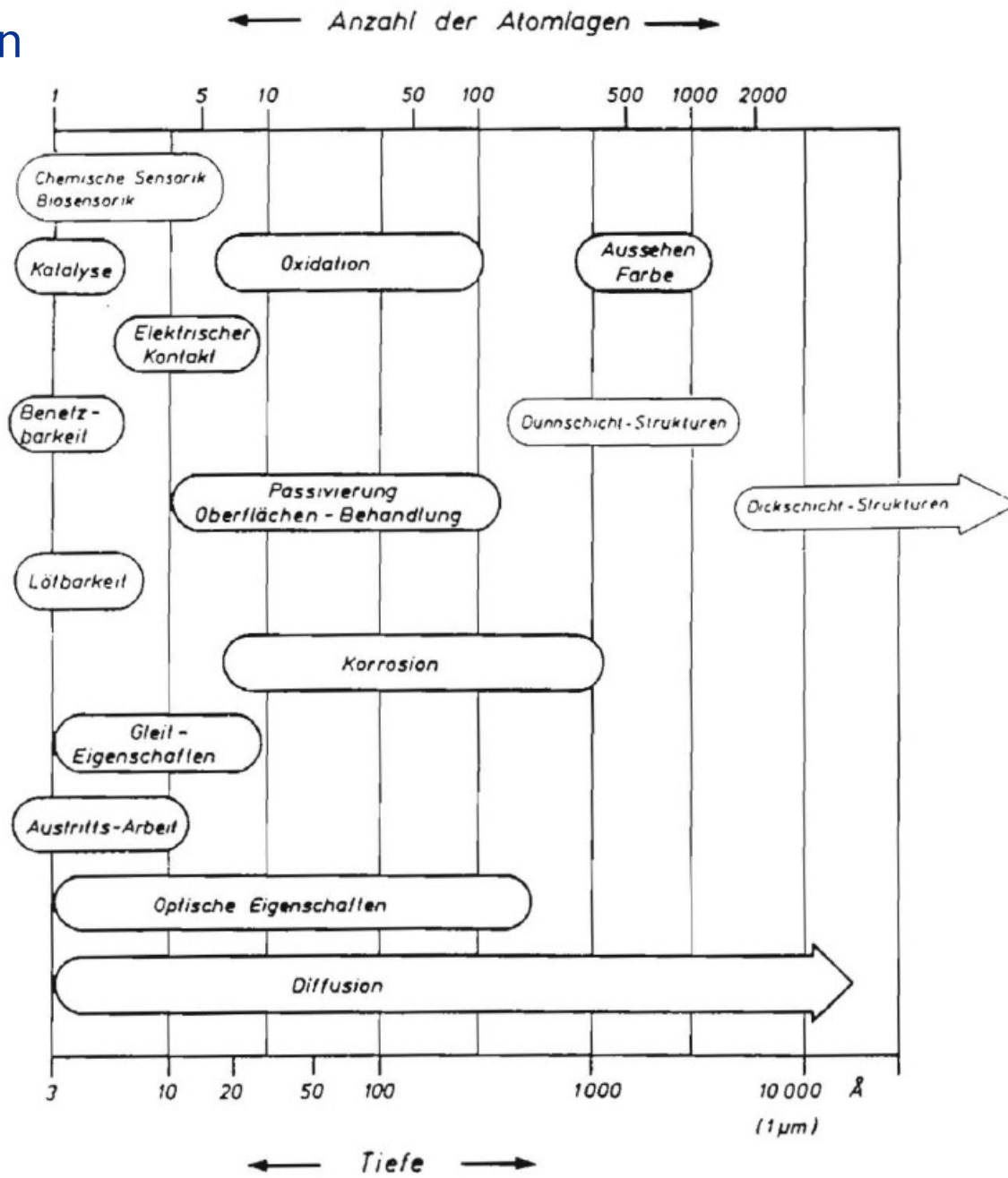
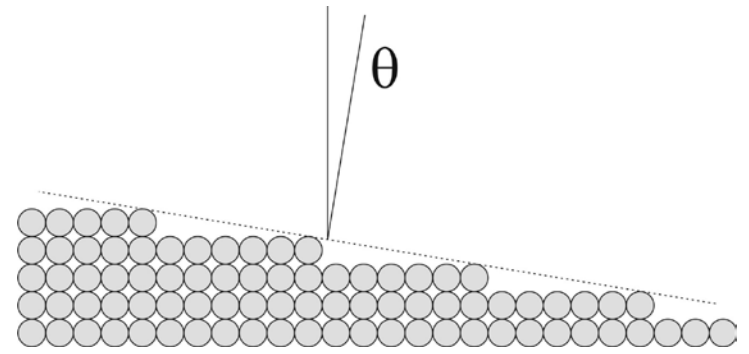
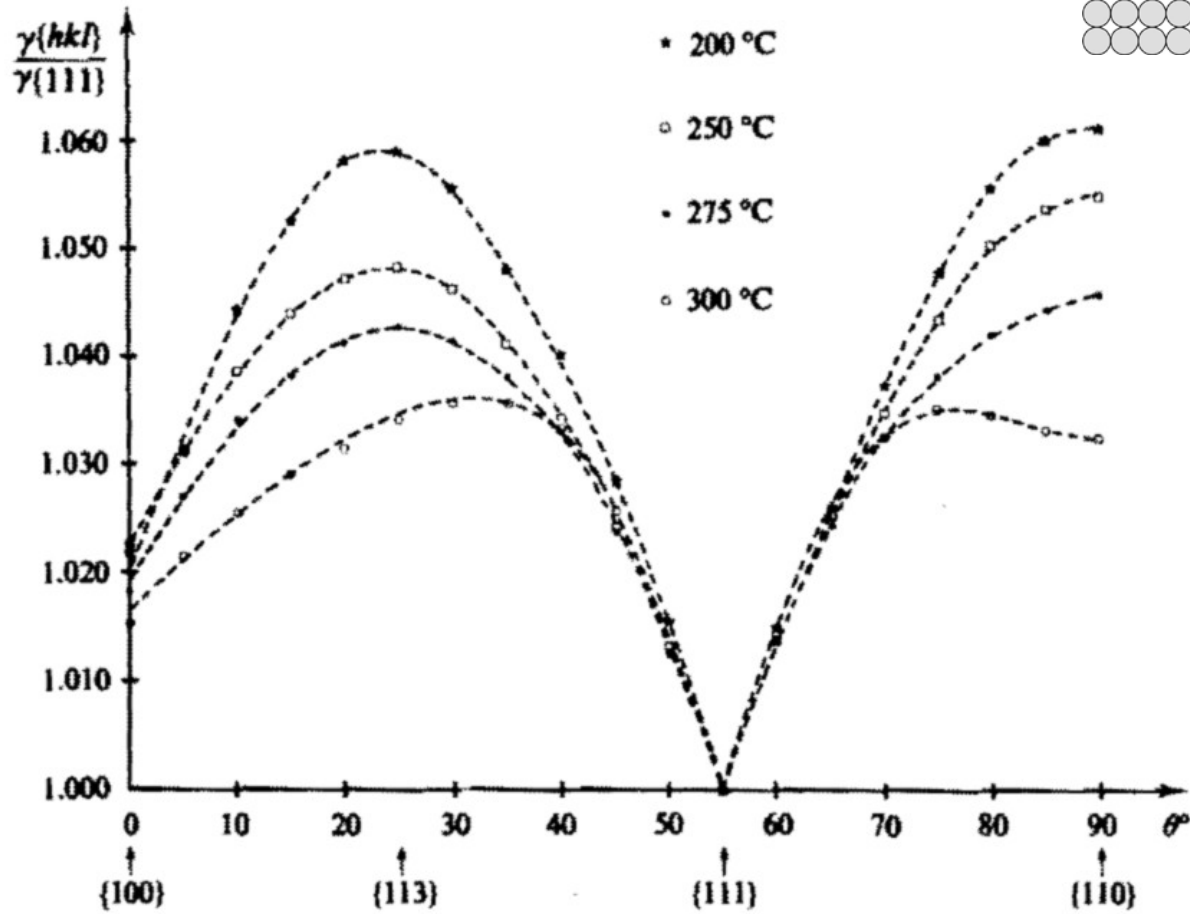


Figure 1 The band structure of a chain of hydrogen atoms spaced 3, 2, and 1 Å apart. The energy of an isolated H atom is -13.6 eV.

Grenzflächen



Freie Oberflächenenergie (von Blei)



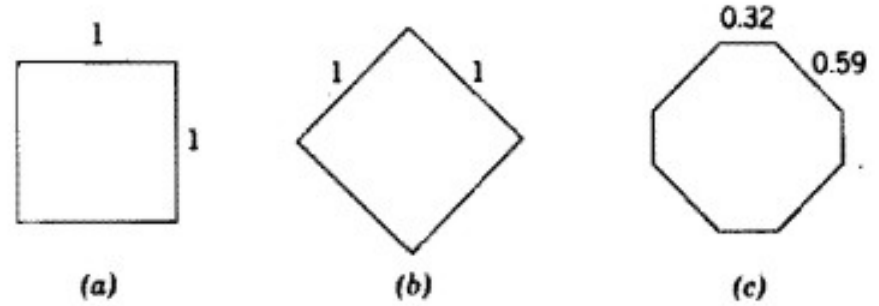
Zangwill: Physics at Surfaces, Cambridge

In welcher Form kristallisiert ein Festkörper?

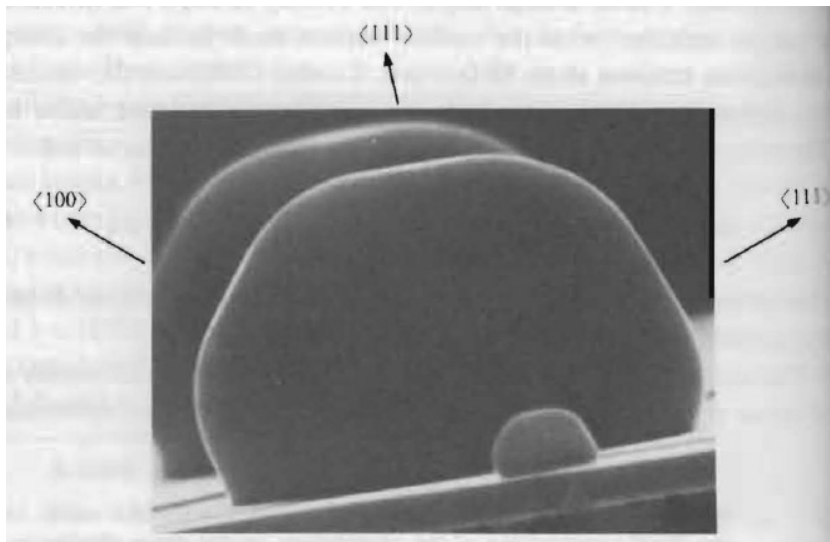
Wulff Konstruktion (1901)

Freie Oberflächenenergien eines 2D Kristalls mit einer Fläche von 1 cm^2 :

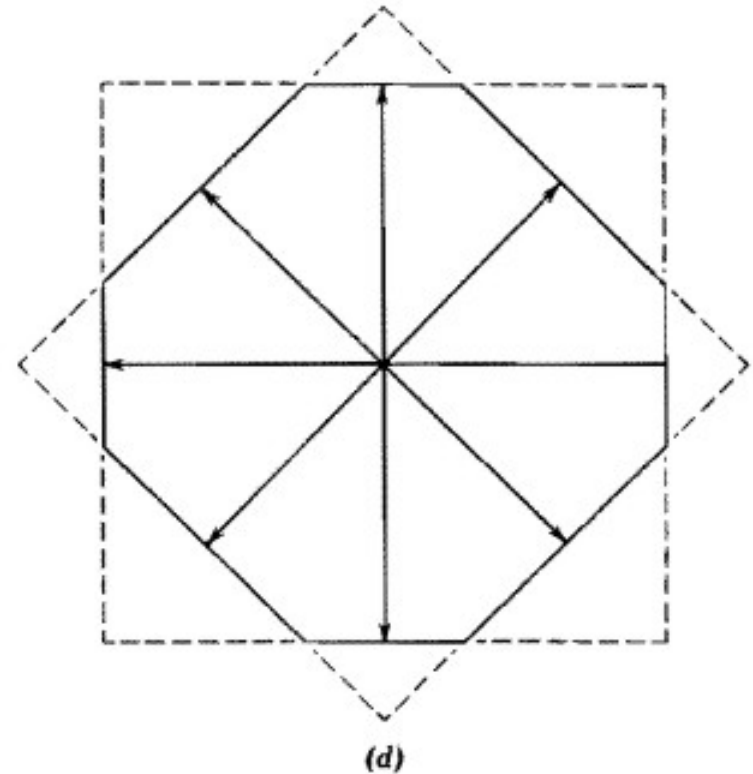
- (a) Nur $\langle 10 \rangle$ Ebenen: 1000 ergs ($=10^{-4} \text{ J}$)
- (b) Nur $\langle 11 \rangle$ Ebenen: 900 ergs
- (c) Kombination der beiden: 851 ergs



Pb Kristall (Bildgröße $\cong 5 \times 7 \mu\text{m}^2$)

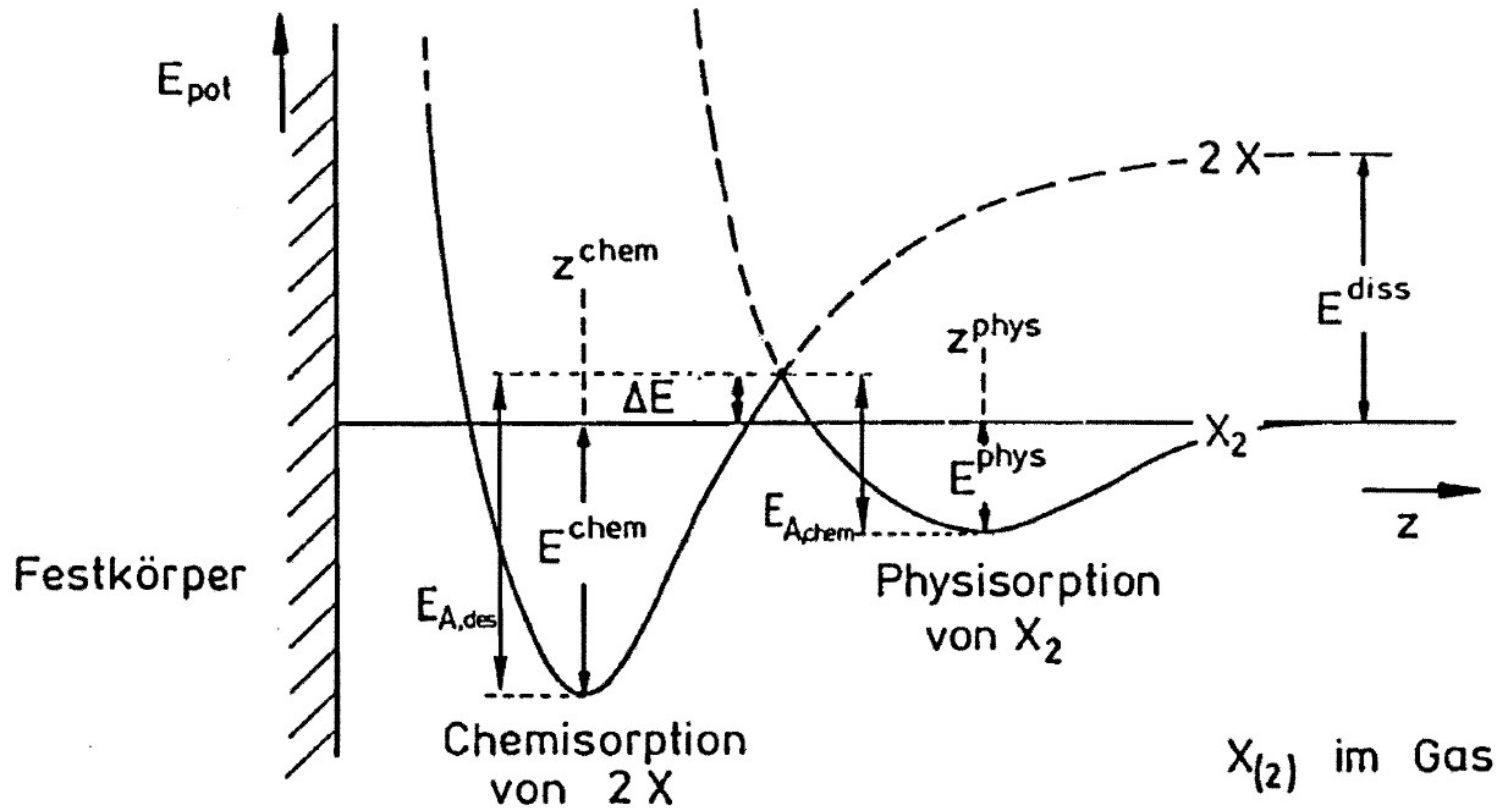


Zangwill: *Physics at Surfaces*, Cambridge

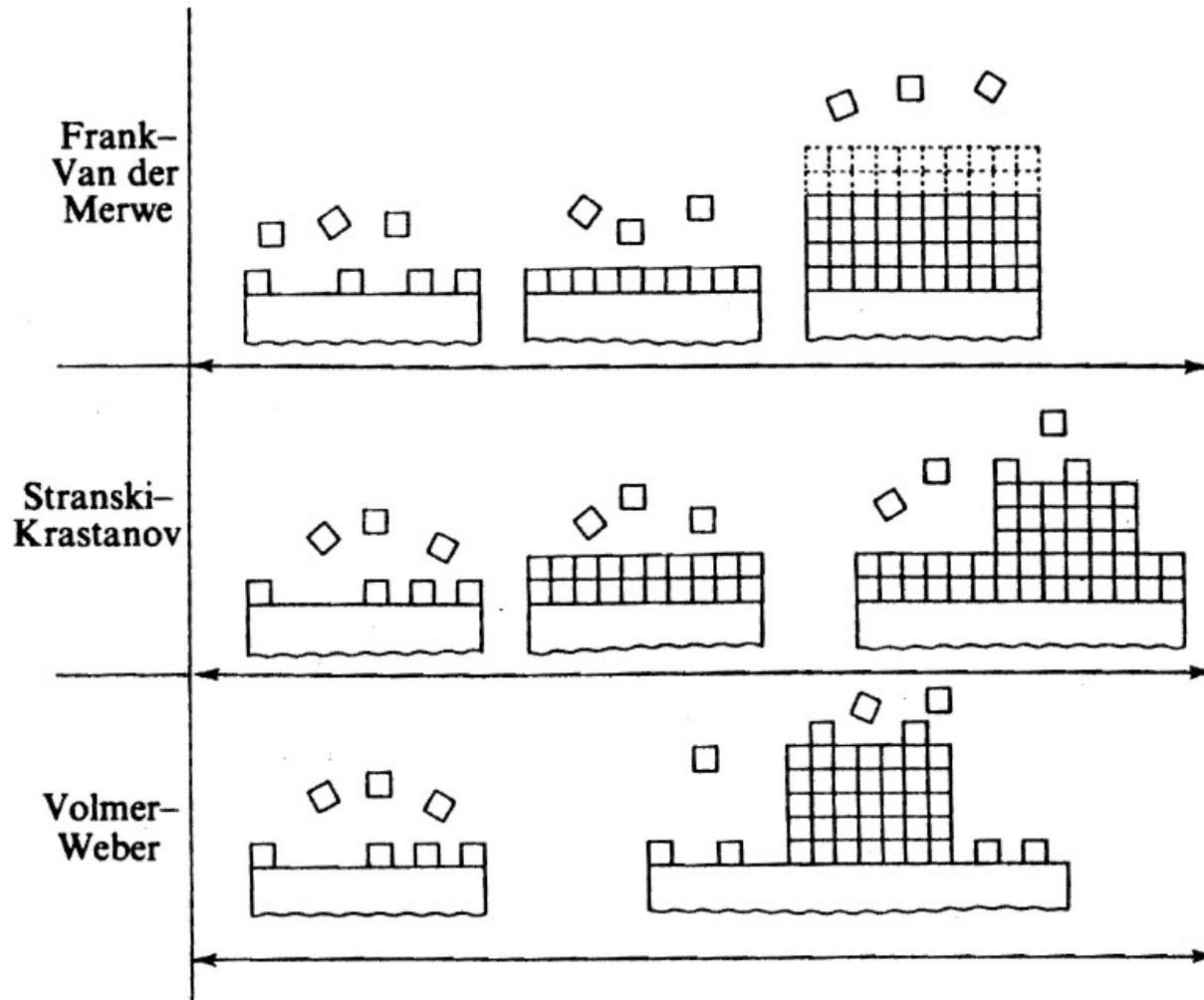


Adamson/Gast: *Physical Chemistry of Surfaces*, Wiley

Physisorption und Chemisorption

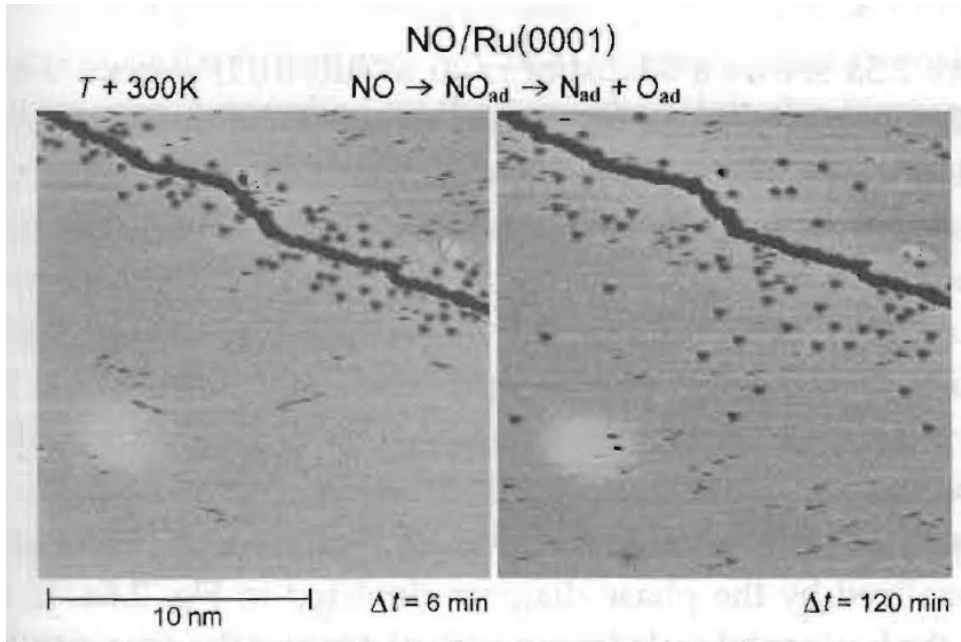


Wachstumsmodi



Heterogene Katalyse: „Active sites“ und „poisons“

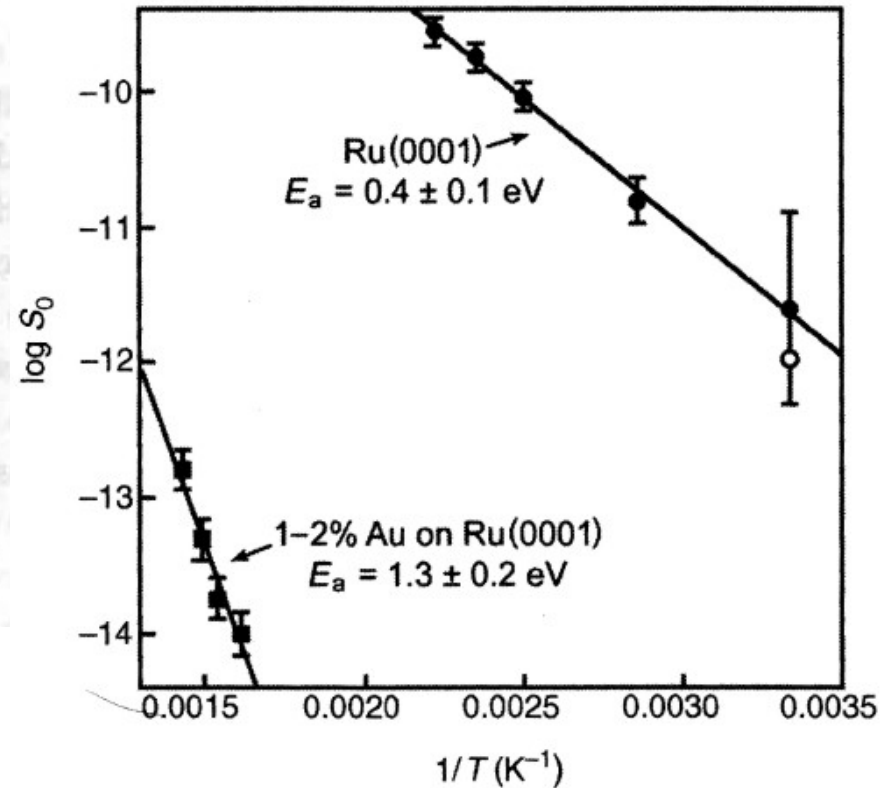
Dissoziation von NO an Ru Stufenkanten



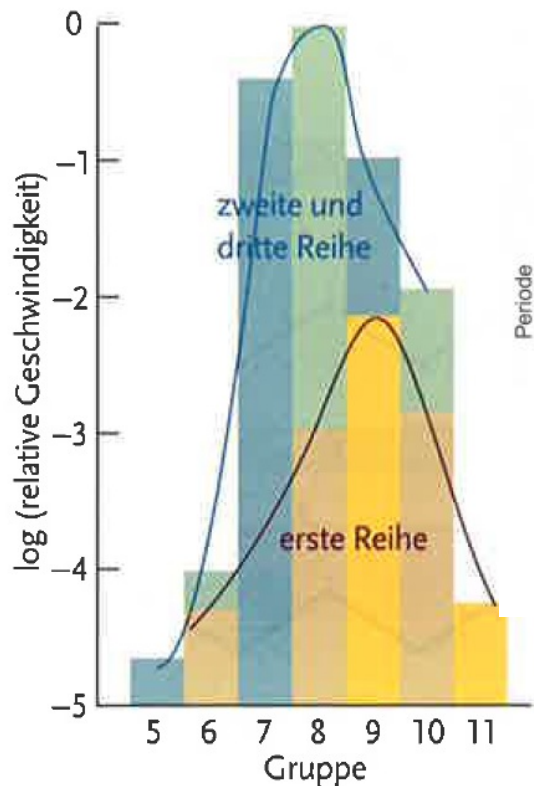
G. Ertl: *Reactions at Solid Surface*, Wiley

Gold als „poison“

Dissociative adsorption of N_2 on Ru(0001)



G. Ertl: *Reactions at Solid Surface*, Wiley



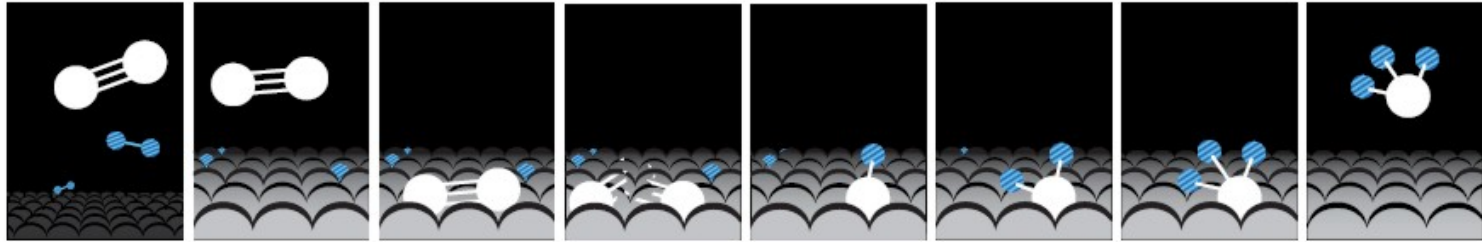
Gruppe	1	2											13	14	15	16	17	VIII VIA
	IA	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIA
Periode 1	1 H Wasserstoff 1.0079 1s ¹																2 He Helium 4.00 1s ²	
2	3 Li Lithium 6.94 2s ¹	4 Be Beryllium 9.01 2s ²											5 B Bor 10.81 2s ² 2p ¹	6 C Kohlenstoff 12.01 2s ² 2p ²	7 N Stickstoff 14.01 2s ² 2p ³	8 O Sauerstoff 16.00 2s ² 2p ⁴	9 F Fluor 19.00 2s ² 2p ⁵	10 Ne Neon 20.18 2s ² 2p ⁶
3	11 Na Natrium 22.99 3s ¹	12 Mg Magnesium 24.31 3s ²	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIIIB	9 VIIIB	10 VIIIB	11 IB	12 IIB	13 Al Aluminium 26.98 3s ² 3p ¹	14 Si Silicium 28.09 3s ² 3p ²	15 P Phosphor 30.97 3s ² 3p ³	16 S Schwefel 32.06 3s ² 3p ⁴	17 Cl Chlor 35.45 3s ² 3p ⁵	18 Ar Argon 39.95 3s ² 3p ⁶
4	19 K Kalium 39.10 4s ¹	20 Ca Calcium 40.08 4s ²	21 Sc Scandium 44.96 3d ¹ 4s ²	22 Ti Titan 47.87 3d ² 4s ²	23 V Vanadium 50.94 3d ³ 4s ²	24 Cr Chrom 52.00 3d ⁴ 4s ¹	25 Mn Mangan 54.94 3d ⁵ 4s ²	26 Fe Eisen 55.84 3d ⁶ 4s ²	27 Co Kobalt 58.93 3d ⁷ 4s ²	28 Ni Nickel 58.69 3d ⁸ 4s ²	29 Cu Kupfer 63.55 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn Zink 65.41 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga Gallium 69.72 4s ² 4p ¹	32 Ge Germanium 72.64 4s ² 4p ²	33 As Arsen 74.92 4s ² 4p ³	34 Se Selen 78.96 4s ² 4p ⁴	35 Br Brom 79.90 4s ² 4p ⁵	36 Kr Krypton 83.80 4s ² 4p ⁶
5	37 Rb Rubidium 85.47 5s ¹	38 Sr Strontium 87.62 5s ²	39 Y Yttrium 88.91 4d ¹ 5s ²	40 Zr Zirkonium 91.22 4d ² 5s ²	41 Nb Niob 92.91 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo Molybdän 95.94 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc Technetium (98) 4d ⁵ 5s ²	44 Ru Ruthenium 101.07 4d ⁸ 5s ¹	45 Rh Rhodium 102.90 4d ⁹ 5s ¹	46 Pd Palladium 106.42 4d ¹⁰	47 Ag Silber 107.87 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd Cadmium 112.41 4d ¹⁰ 5s ²	49 In Indium 114.82 5s ² 5p ¹	50 Sn Zinn 118.71 5s ² 5p ²	51 Sb Antimon 121.76 5s ² 5p ³	52 Te Tellur 127.60 5s ² 5p ⁴	53 I Iod 126.90 5s ² 5p ⁵	54 Xe Xenon 131.29 5s ² 5p ⁶
6	55 Cs Cäsium 132.91 6s ¹	56 Ba Barium 137.33 6s ²	57 La Lanthan 138.91 5d ¹ 6s ²	72 Hf Hafnium 178.49 5d ² 6s ²	73 Ta Tantal 180.95 5d ⁴ 6s ²	74 W Wolfram 183.84 5d ⁴ 6s ²	75 Re Rhenium 186.21 5d ⁵ 6s ²	76 Os Osmium 190.23 5d ⁶ 6s ²	77 Ir Iridium 192.22 5d ⁷ 6s ²	78 Pt Platin 195.08 5d ⁹ 6s ¹	79 Au Gold 196.97 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg Quecksilber 200.59 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl Thallium 204.38 6s ² 6p ¹	82 Pb Blei 207.2 6s ² 6p ²	83 Bi Bismut 208.98 6s ² 6p ³	84 Po Polonium (209) 6s ² 6p ⁴	85 At Astat (210) 6s ² 6p ⁵	86 Rn Radon (222) 6s ² 6p ⁶
7	87 Fr Francium (223) 7s ¹	88 Ra Radium (226) 7s ²	89 Ac Actinium (227) 6d ¹ 7s ²	104 Rf Rutherfordium (261) 6d ⁴ 7s ²	105 Db Dubnium (262) 6d ⁴ 7s ²	106 Sg Seaborgium (263) 6d ⁴ 7s ²	107 Bh Bohrium (262) 6d ⁴ 7s ²	108 Hs Hassium (265) 6d ⁴ 7s ²	109 Mt Meitnerium (266) 6d ⁴ 7s ²	110 Ds Darmstadtium (271) 6d ⁴ 7s ²	111 Rg Roentgenium (272) 6d ⁴ 7s ²	112	113	114	115	116	117	118

	O ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	CO	H ₂	CO ₂	N ₂
Ti, Cr, Mo, Fe	+	+	+	+	+	+	+
Ni, Co	+	+	+	+	+	+	-
Pd, Pt	+	+	+	+	+	-	-
Mn, Cu	+	+	+	+	±	-	-
Al, Au	+	+	+	+	-	-	-
Li, Na, K	+	+	-	-	-	-	-
Mg, Ag, Zn, Pb	+	-	-	-	-	-	-

* + Starke Chemisorption; ± Chemisorption; - keine Chemisorption.

Abb. 25-28 Die Vulkankurve der katalytischen Aktivität entsteht, da die Reaktanten zwar einigermaßen stark adsorbiert werden müssen, aber doch nicht so stark, dass sie unbeweglich werden. Die untere Kurve gehört zur ersten Reihe der Übergangsmetalle (3d), die obere Kurve zur zweiten und dritten Reihe (4d und 5d). Die

Ammoniaksynthese durch heterogene Katalyse



In the Haber-Bosch process nitrogen (white) reacts with hydrogen (striped) on an iron surface to then form molecules of ammonia which are released from the surface. This reaction, which extracts nitrogen from air, is an important step in the production of artificial fertilizer.

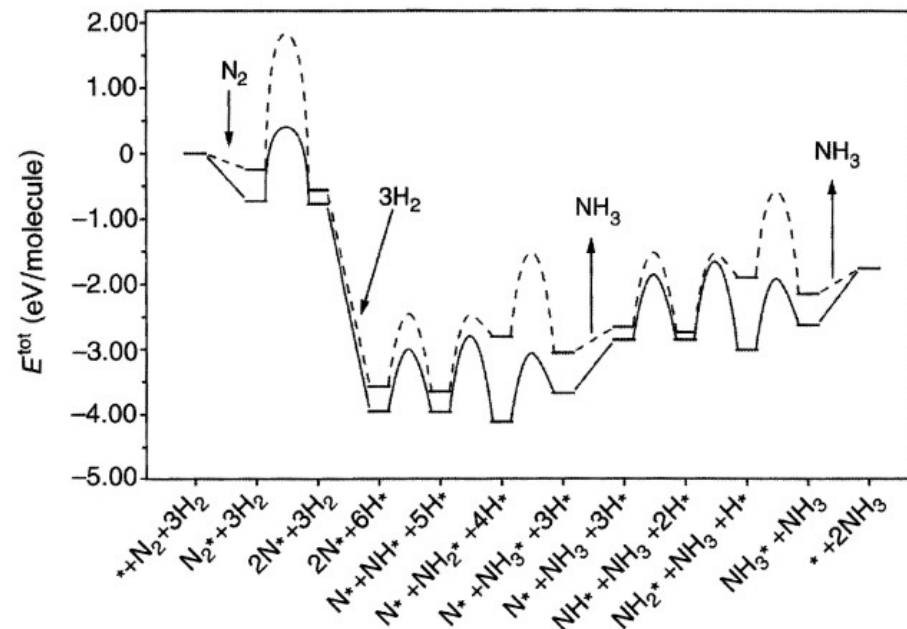
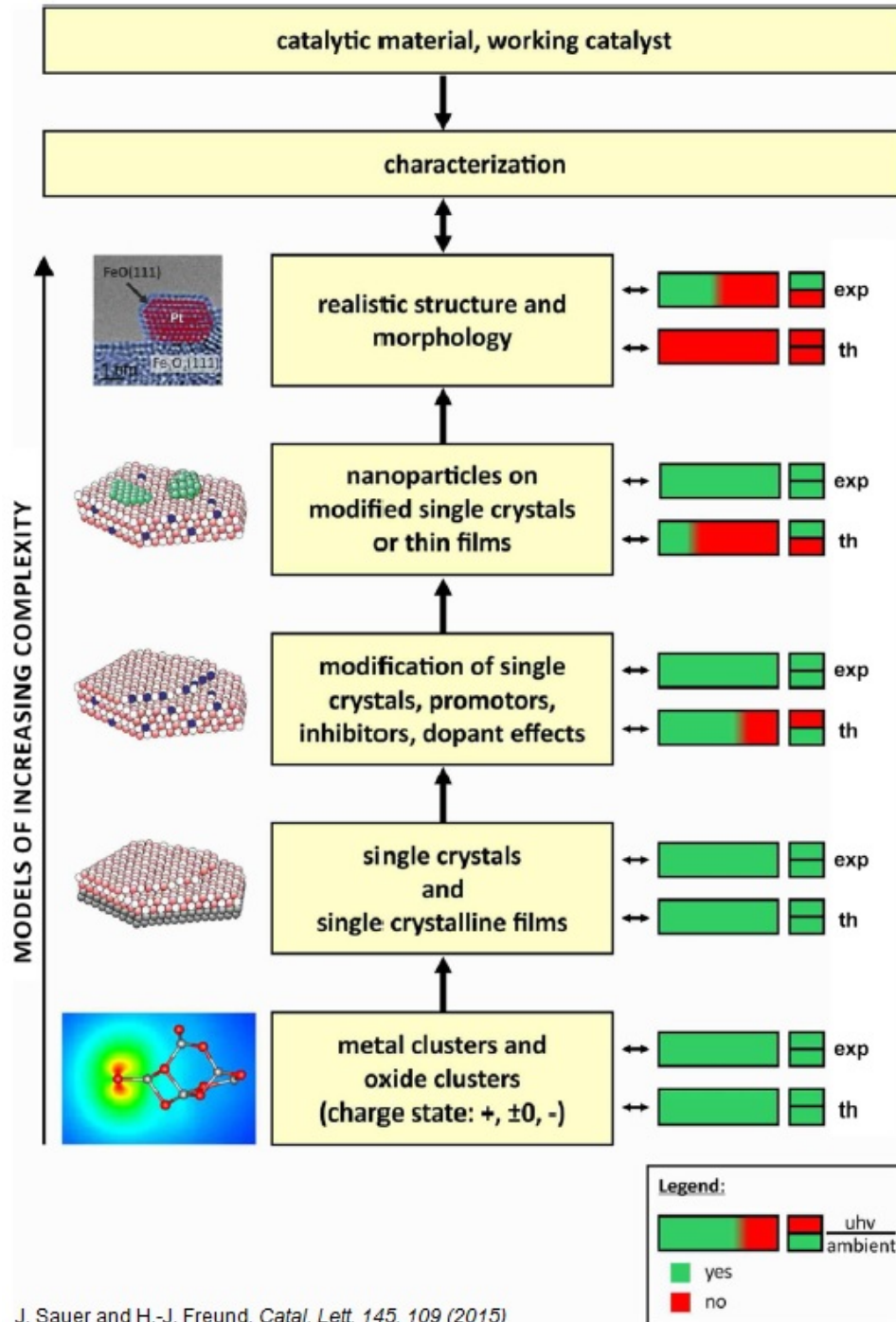
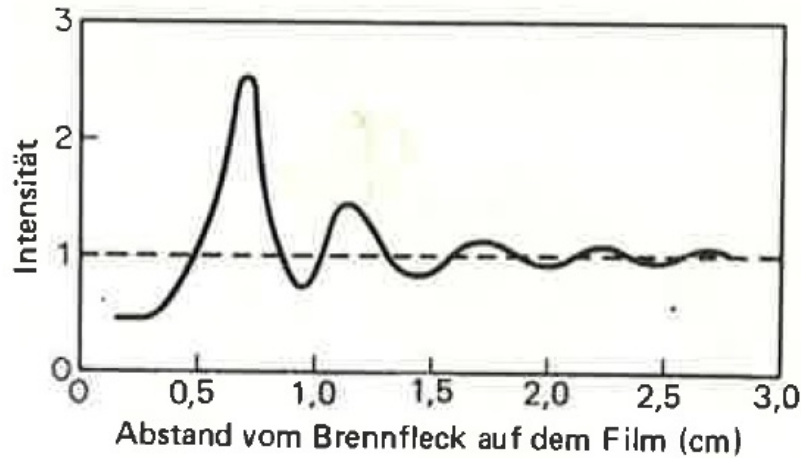


FIGURE 6.13. Theoretical potential energy diagram for NH_3 synthesis on stepped (full line) and flat (broken line) $\text{Ru}(0001)$ surfaces [51].

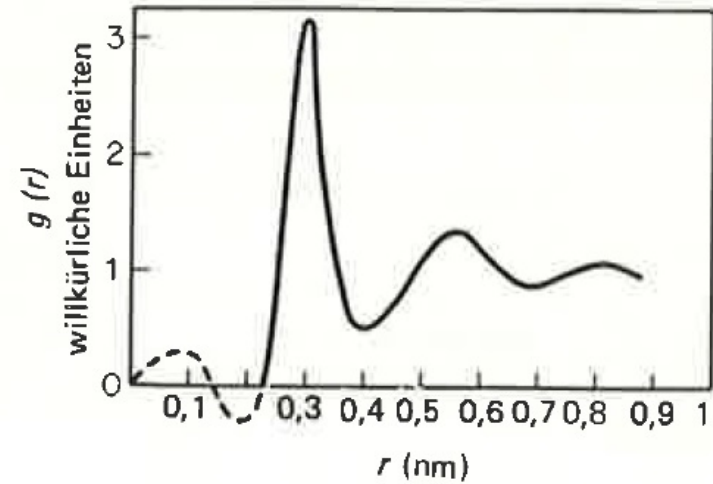
Catalysis: Model systems and real catalysts



Beugung an Flüssigkeiten



(a)



(b)

Abb. 22.2 Röntgenbeugungsdiagramm des flüssigen Quecksilbers. (a) Photometerkurve des Beugungsdiagramms; (b) Radiale Verteilungsfunktion des flüssigen Quecksilbers.

Flüssigkristalle

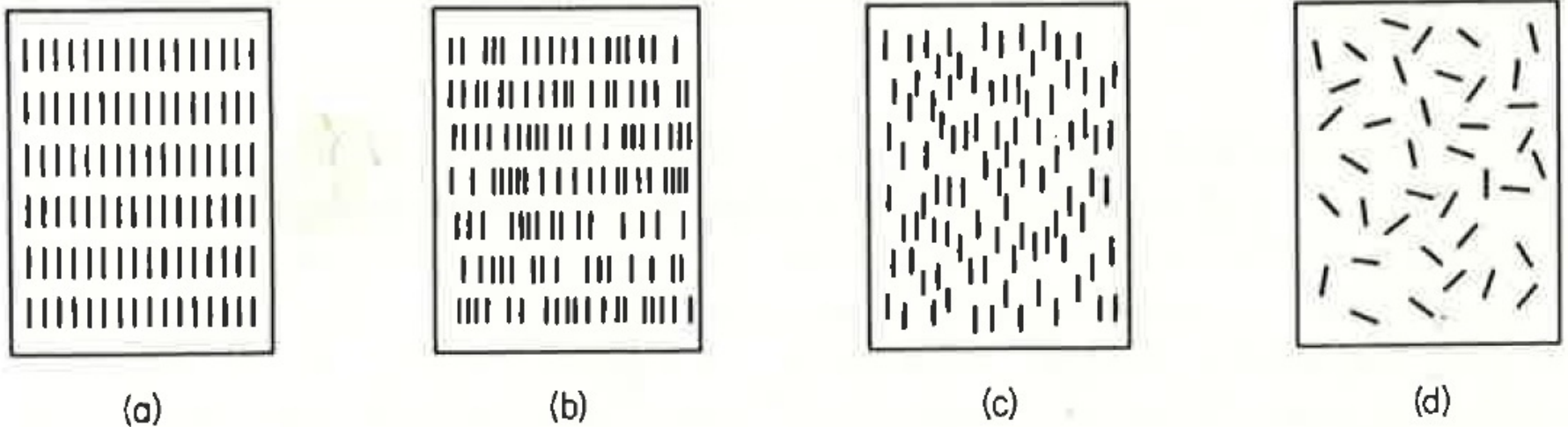


Abb. 22.5 Ordnungszustände von Stäbchenmolekeln in kondensiertem Zustand. (a) Kristallin – Orientierung und Periodizität; (b) Smektisch – Orientierung und Anordnung in Ebenen gleichen Abstands, keine Periodizität innerhalb der Ebenen; (c) Nematisch – Orientierung ohne Periodizität; (d) Isotrope Flüssigkeit – weder Orientierung noch Periodizität.

THE ATOMIC ARRANGEMENT IN GLASS

By W. H. ZACHARIASEN

RECEIVED MAY 13, 1932

PUBLISHED OCTOBER 5, 1932

JACS 54, 3841 (1932)

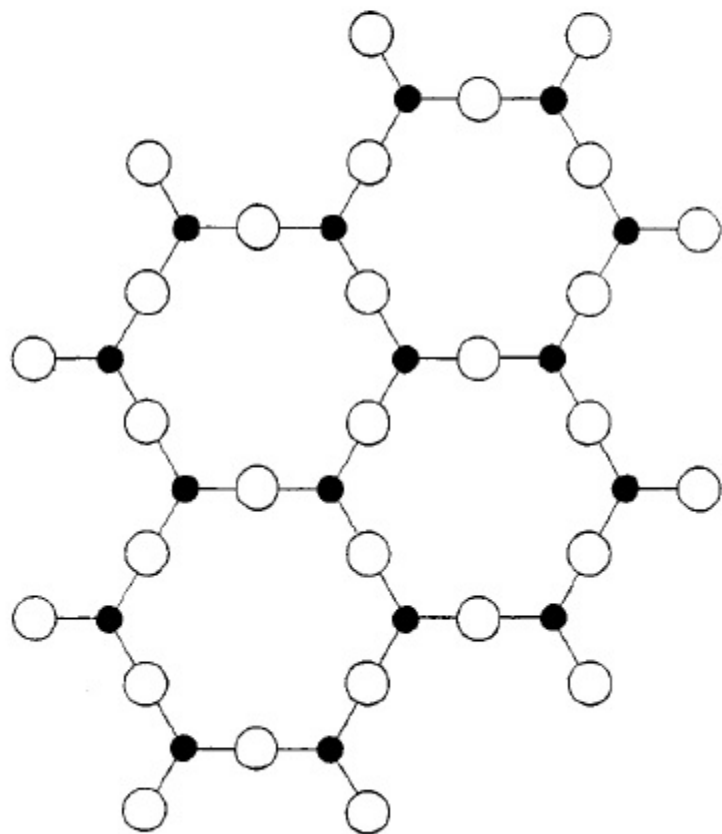


Fig. 1a.

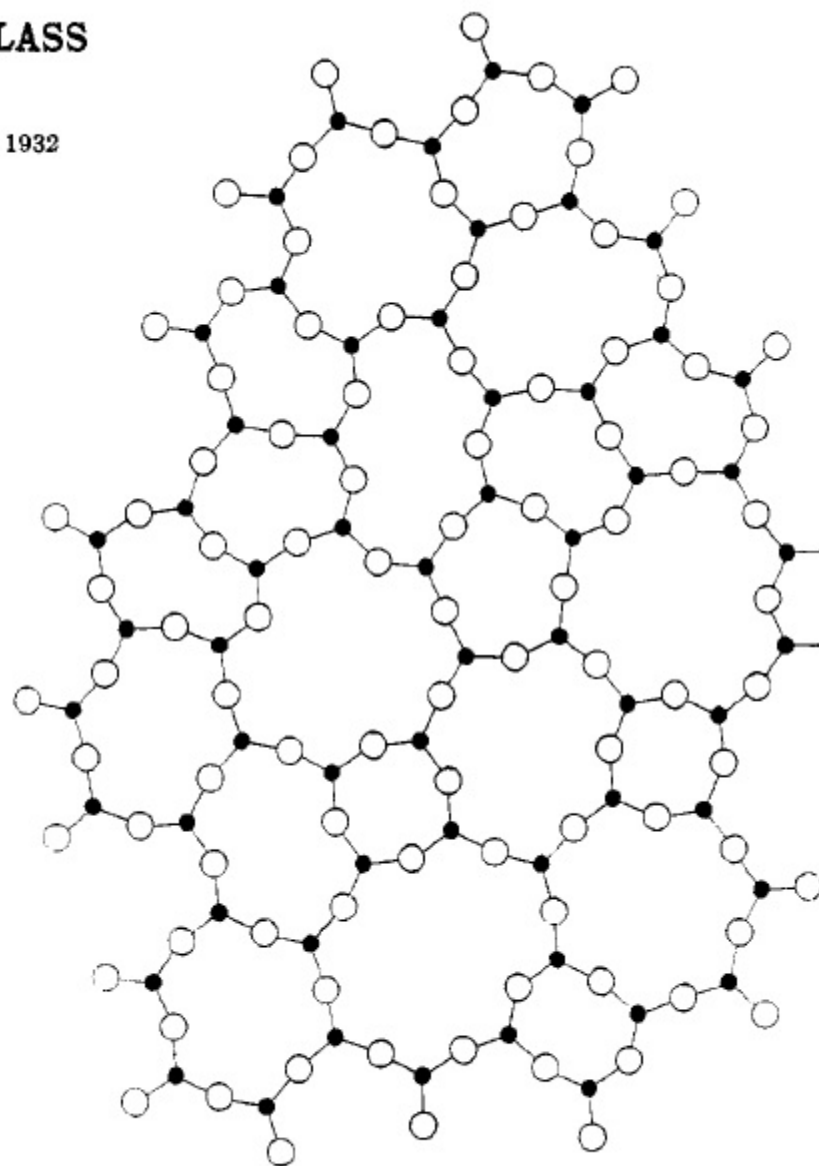


Fig. 1b.

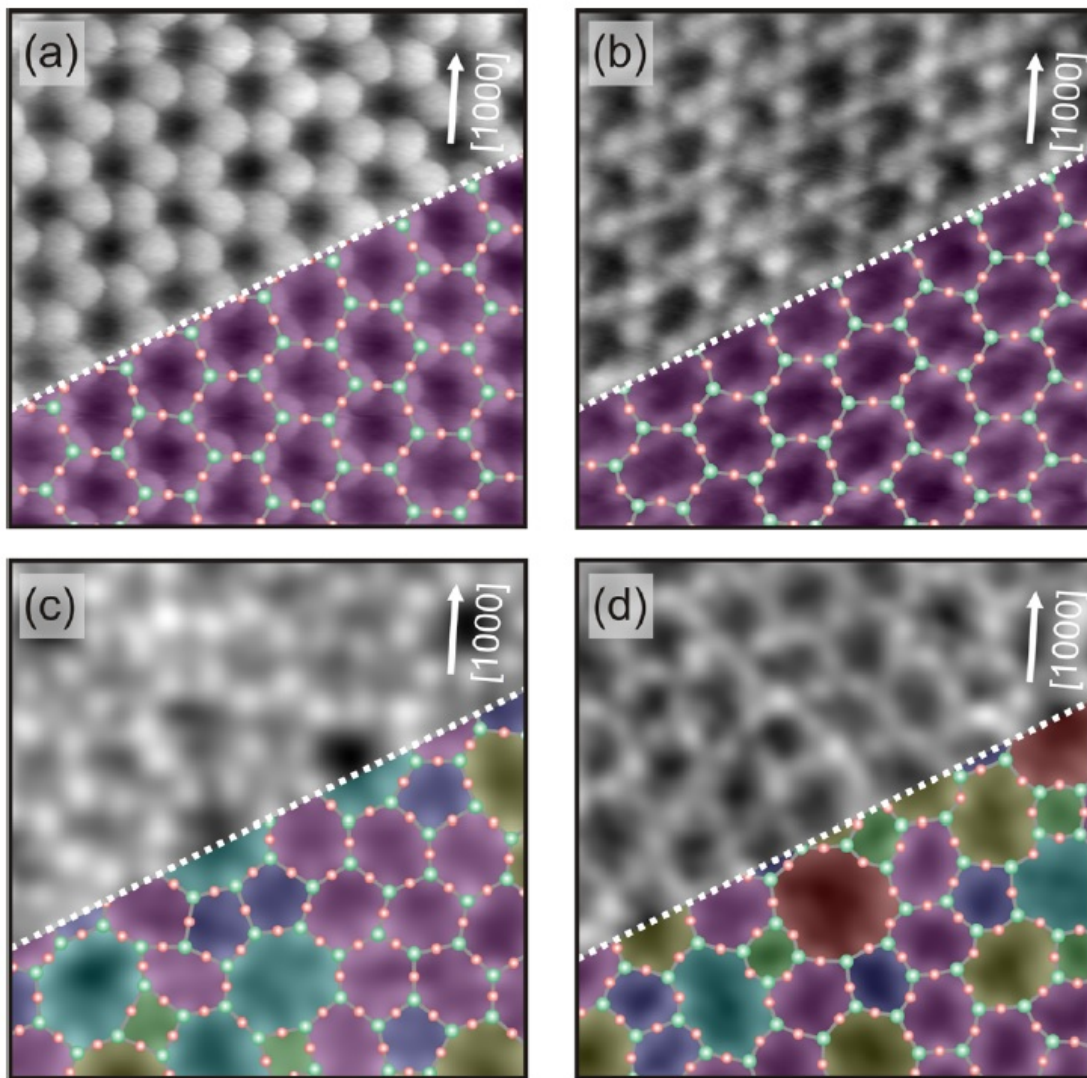


Figure 2. Attomically resolved crystalline and vitreous regions of the thin silica film (the scan area of all images is $3.5 \text{ nm} \times 3.5 \text{ nm}$). (a) STM image of a crystalline area showing the positions of Si atoms ($V_S = 3.0 \text{ V}$, $I_T = 100 \text{ pA}$). (b) STM image of a crystalline patch showing the arrangement of O atoms ($V_S = 100 \text{ mV}$, $I_T = 100 \text{ pA}$). (c) STM image of a vitreous area revealing the positions of Si atoms ($V_S = 2.0 \text{ V}$, $I_T = 50 \text{ pA}$). (d) STM image of a vitreous area showing the arrangement of O atoms ($V_S = 100 \text{ mV}$, $I_T = 100 \text{ pA}$). (a–d) Arrows indicate one crystallographic axis of the Ru(0001) substrate.

H. J. Freund and co-workers,
J. Phys. Chem. C 116, 20426 (2012)

Makromoleküle

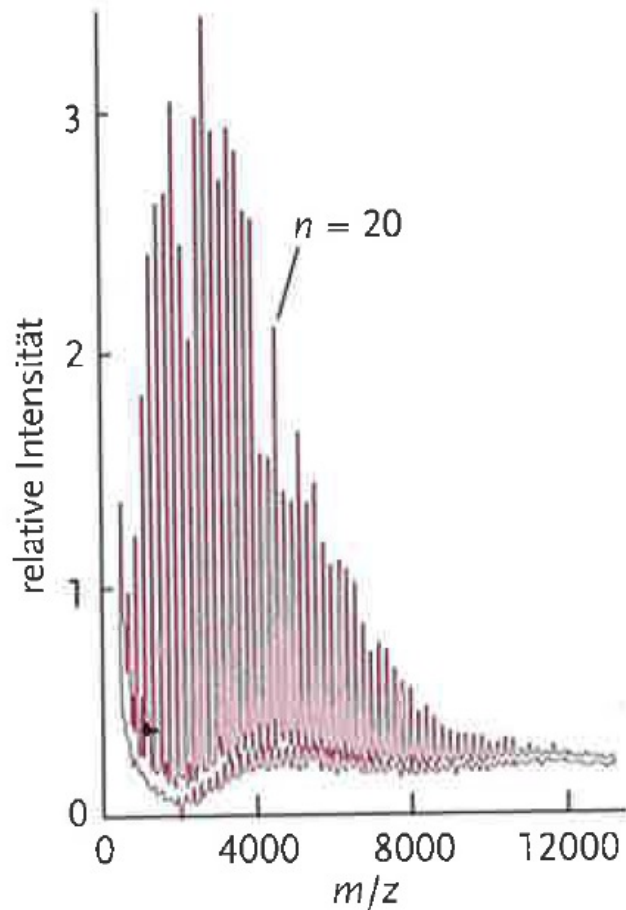


Abb. 19-2 MALDI-TOF Spektrum einer Probe von Poly(butyleneadipat) mit $\bar{M}_N = 4525 \text{ g mol}^{-1}$ (nach Mudiman *et al.*, J. Chem. Educ., **74** (1997) 1288).

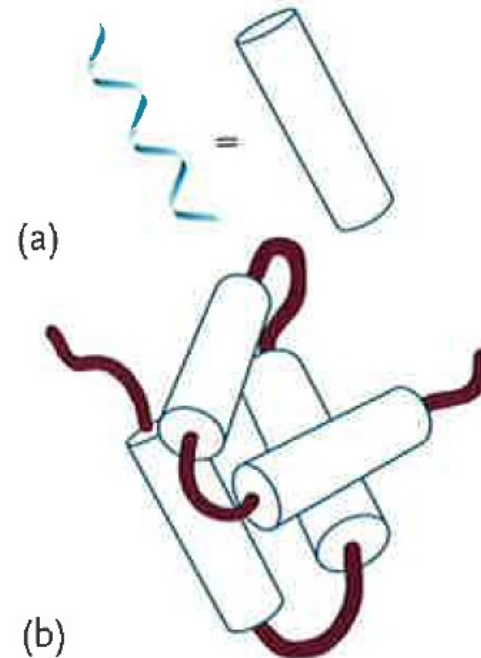
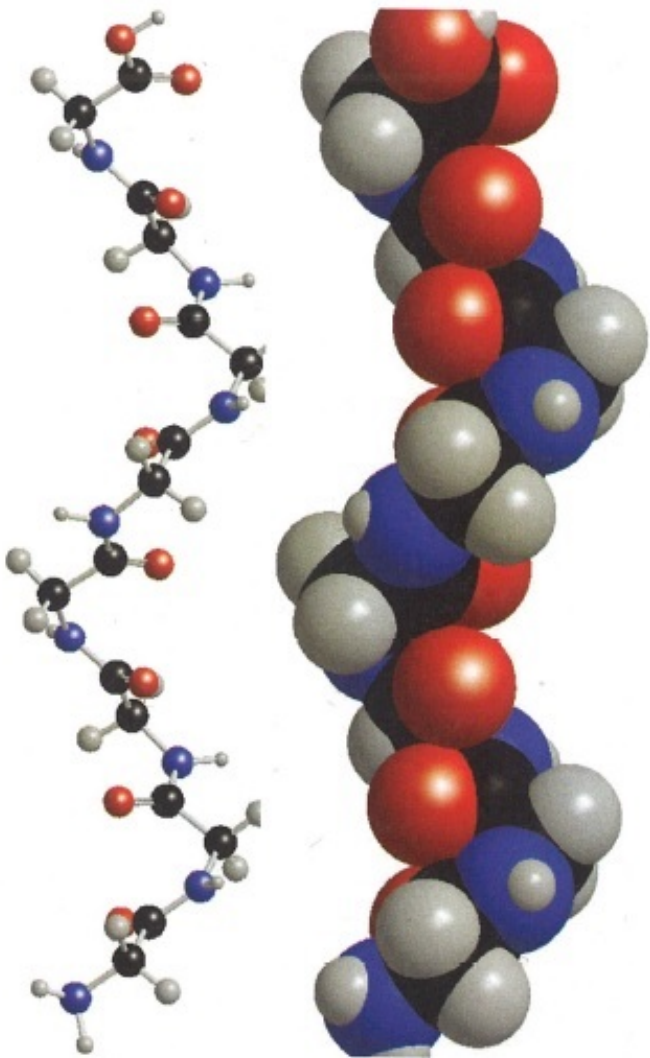


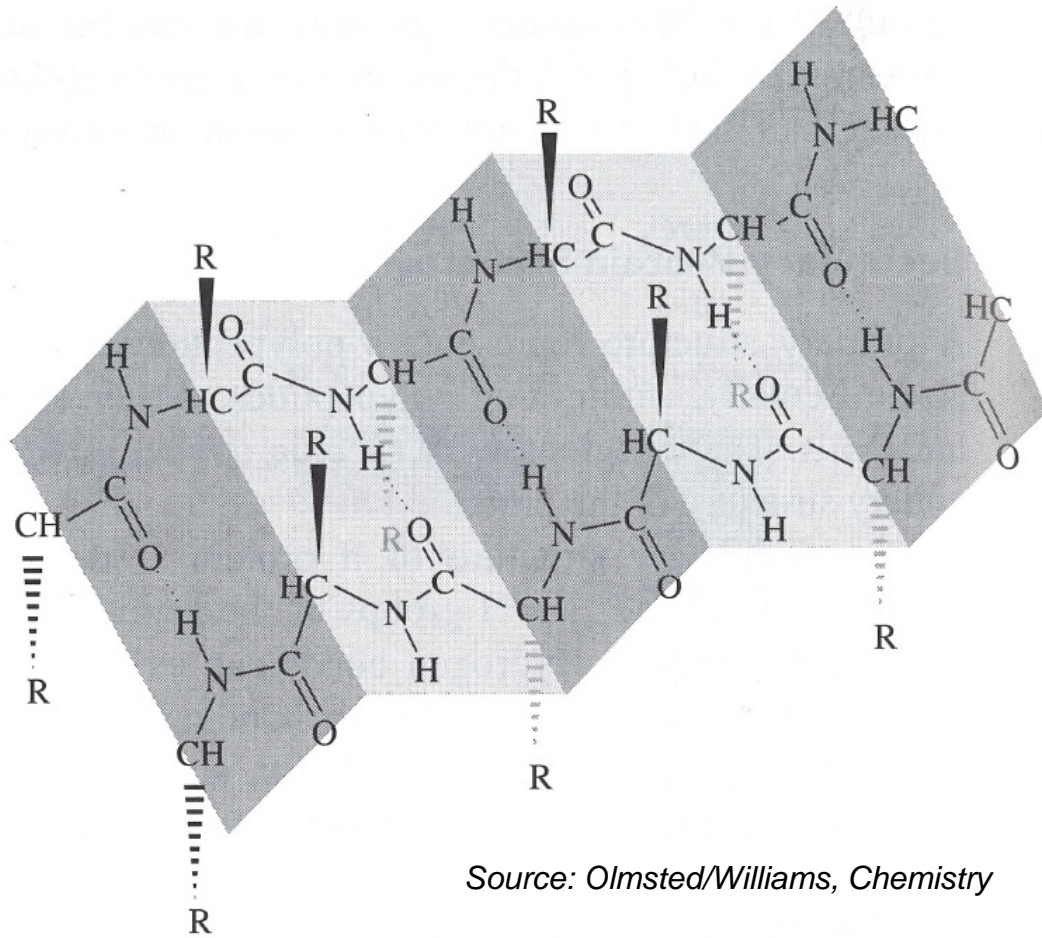
Abb. 19-13 (a) Die hoch geordnete Helixstruktur (hier als Zylinder dargestellt) ist ein Beispiel für eine Sekundärstruktur. (b) Eine Tertiärstruktur entsteht, indem sich mehrere Helixabschnitte, die durch kurze statische Knäuel verbunden sind, zu einer kompakten Struktur zusammenlagern.

Sekundärstrukturen

α -Helix (Polypeptid)



β -Faltblattstruktur



Source: Olmsted/Williams, Chemistry

Source: Atkins/de Paula, Physikalische Chemie

Elektrische Doppelschicht

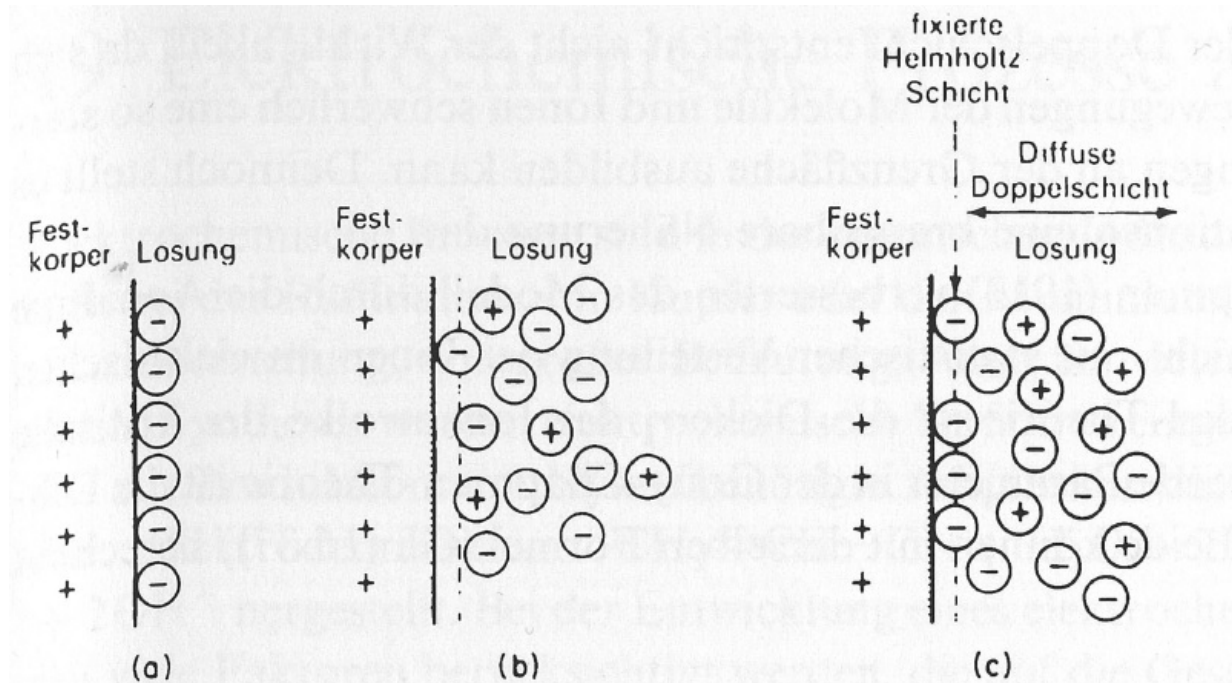


Abbildung 18.14 Verschiedene Modelle für die elektrische Doppelschicht aus fixierten Oberflächenladungen und Ionen in Lösung: (a) Helmholtz-, (b) Gouy-Chapman- und (c) Stern-Modell.

Flockung (Koagulation)

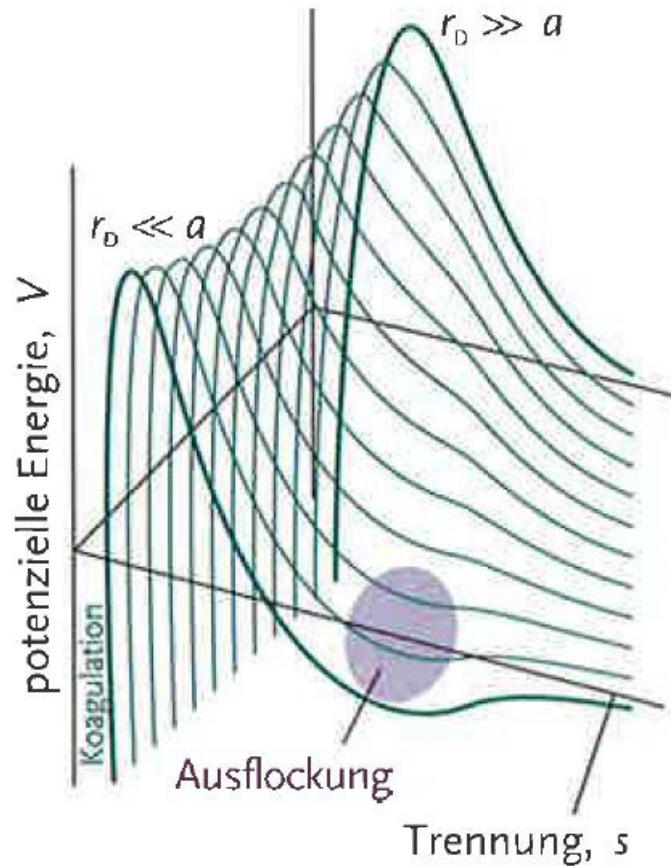


Abb. 19-38 Die potenzielle Energie der Wechselwirkung als Funktion des Abstands der Zentren zweier Teilchen sowie des Verhältnisses von Teilchengröße a zur Dicke r_D der elektrischen Doppelschicht. Die mit Koagulation und Flockung bezeichneten Bereiche sind die Minima der potenziellen Energie, in welchen die jeweiligen Prozesse eintreten.