

# Physikalische Chemie 4

## Statistische Thermodynamik - Grundlagen und Anwendungen in Chemie und Biowissenschaften:

Grundlagen der klassischen Statistischen Mechanik, klassische Ensembletheorie, Boltzmannstatistik, Zustandssumme, Zusammenhang mit thermodynamischen Größen, Gleichverteilungssatz.

Grundlagen der Quantenstatistik, quantenmechanische Ensembletheorie, Systeme aus ununterscheidbaren Teilchen, Maxwell-Boltzmann-, Fermi-Dirac- und Bose-Einstein-Statistik.

Anwendungen der statistischen Thermodynamik: Berechnung chemischer Gleichgewichte idealer Gase, Absolutberechnung von Reaktionsgeschwindigkeiten, reale Gase, Flüssigkeiten, Mischungen und Lösungen, Phasenübergänge und kritische Phänomene, Adsorptionsisothermen, Festkörper (Gitterschwingungen, Halbleiter).

Konformation und strukturelle Phasenübergänge makromolekularer und biopolymerer Systeme: Statistisches Knäuel, Polymerelastizität, Flory-Huggins-Theorie, Proteine, Proteinfaltung, DNA, RNA, Helix-Knäuel-Übergang, Zipper-Modell, nichtreguläre Strukturen.

Berechnung biomolekularer Assoziationsgleichgewichte: Wechselwirkung zwischen Makromolekülen, Ligandenwechselwirkung, Kooperativität.

Computersimulations-Methoden: Molekulardynamik- und Monte Carlo-Verfahren.

### Literaturauswahl:

C. Czeslik, H. Seemann, R. Winter, Basiswissen Physikalische Chemie, B. G. Teubner Verlag, Stuttgart, 4. Auflage, 2010

P.W. Atkins, J. de Paula, Physical Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 2010

D. A. McQuarrie, J. D. Simon, Physical Chemistry - A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997

G. H. Findenegg, Statistische Thermodynamik, Dr. R. Steinkopf Verlag, Darmstadt 1985

D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, New York, 1976

W. Göpel, H.-D. Wiemhöfer, Statistische Thermodynamik, Spektrum Akad. Verlag, Berlin, 2000

T. L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, Addison-Wesley, 1962

K. Huang, Statistical Mechanics, John Wiley, New York, 1987

H. L. Friedman, A Course in Statistical Mechanics, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1985

D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press, Oxford, 1987

C. E. Hecht, Statistical Thermodynamics and Kinetic Theory, Freeman, New York, 1990

R. Reif, Statistische Physik und Theorie der Wärme, Walter de Gruyter, Berlin, 1987

T. M. Reed, K.E. Gubbins, Applied Statistical Mechanics – Thermodynamics and Transport Properties of Fluids, MacGraw Hill, New York, 1973

K. A. Dill, S. Bromberg, Molecular Driving Forces, Garland Science, London & NY, 2011

R. Phillips, J. Kondev, J. Theriot, H.G. Garcia, Physical Biology of the Cell, Garland Science, London, 2013