

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie

A.o. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Harald Paulson Fritzer, derzeit Vorstand

A.o. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Harald Krischner

Das Institut entstand im Jahre 1961 durch Teilung des ehemaligen Doppelinstitutes für „Anorganische und Physikalische Chemie“ (Vorstand G. F. Hüttig). Im Jahre 1969 wurde die Bezeichnung auf „Physikalische und Theoretische Chemie“ ausgedehnt.

Dem Institut obliegt im Rahmen der Technisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät die Ausbildung der Studierenden auf dem Gebiet der Physikalischen Chemie, der Theoretischen Chemie sowie der Strukturlehre. Für die Hörer der Studienrichtungen Technische Chemie, Technische Physik sowie Verfahrenstechnik werden von den Universitätslehrern im Jahresdurchschnitt 13 Stunden Vorlesungen und Seminare sowie 10 Stunden Labor- und Rechenübungen abgehalten. Dazu kommt die Betreuung von Diplomanden und Dissertanten.

Die in der Forschung behandelten Themen betreffen vor allem die Grundlagenforschung, wobei die folgenden Schwerpunkte behandelt werden:

1) Festkörperchemie

Den Schwerpunkt der Tätigkeit dieses Arbeitskreises bilden thermodynamische Untersuchungen an Festkörper-Oxid-Systemen (Al_2O_3 - Cr_2O_3), sowie Festkörper-Metall-Systemen (Ni - Au). Besonderes Interesse finden dabei die metastabilen Zustände von Oxid- bzw. Metall-Phasen, wobei sowohl Stabilitätsgrenzen wie auch der zeitliche Verlauf von Entmischungsreaktionen verfolgt und mit theoretischen Modellen verglichen werden. Das gegenwärtig herangezogene experimentelle Meßverfahren ist jenes der Galvanischen Festkörperkette, wobei dotiertes Thoriumoxid bzw. Zirkonoxid als Festkörperelektrolyt im Temperaturbereich von 700° bis 1200° C verwendet wird. Weiters werden die Röntgendiffraktometrie sowie die Thermogravimetrie zum Studium von Festkörperreaktionen herangezogen.

2) Strukturforschung

Auf dem Gebiet der Strukturforschung werden sowohl Röntgen-Feinstrukturuntersuchungen mittels Pulverdiffraktometrie bei hoher und tiefer Temperatur durchgeführt als auch vollständige Kristallstrukturbestimmungen mittels Beugungsaufnahmen an Einkristallen vorge-

nommen. In den letzten Jahren lag der Schwerpunkt der Forschungstätigkeit auf Strukturuntersuchungen komplexer anorganischer Azide und Azidhydrate. Es gelang bisher, 28 neue Verbindungen röntgenographisch zu charakterisieren und eine größere Anzahl vollständiger Strukturanalysen durchzuführen. Die Kenntnis der räumlichen Anordnung der Atome läßt Gesetzmäßigkeiten im Aufbau komplexer Azidverbindungen erkennen und liefert damit einen wichtigen Beitrag zur Kenntnis dieser bisher kaum bekannten Verbindungsklasse.

3) Theoretische Chemie und Festkörper-Spektroskopie

In diesem Bereich werden optische und magnetische Daten einfacher und komplexer Festkörper, welche dia- und paramagnetische Zentralionen enthalten, mit gruppentheoretischen und quantenchemischen Modellrechnungen im Hinblick auf Fragen der chemischen Bindung korreliert. Die Auswertungen erfolgen unter Berücksichtigung moderner Symmetrieverfahren (Young-Diagramme, symmetrisierte Kronecker-Produktbasen) und quantenchemischen Molekülrechnungen nach der LCAO-MO-Methode. Unter diesen Rechenverfahren, die durch die wachsenden Möglichkeiten der modernen Computer zunehmend an Bedeutung gewinnen, bilden die ab-initio Rechenprogramme einen weiteren Schwerpunkt der Forschungstätigkeit. So konnte z.B. die für derartige Berechnungen benötigte Zeit durch konsequente Verwendung der Molekülsymmetrie auf gruppentheoretischer Basis (Symmetrie-Orbitale) bis zu 30% verringert werden.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten wurden in über 200 wissenschaftlichen Veröffentlichungen in den verschiedensten Fachzeitschriften publiziert und bei zahlreichen wissenschaftlichen Tagungen des In- und Auslandes präsentiert. Die Professoren scheinen als Autoren bzw. Übersetzer verschiedener Lehrbücher auf.

Dem Institut stehen Räume in zwei verschiedenen Gebäuden (Reichbauerstraße 12 und Technikerstraße 4) als Provisorium zur Verfügung. Die ursprünglich geplante Übersiedlung in das neu erbaute Physikgebäude kam nicht zustande. Eine endgültige Unterbringung in einem neu zu errichtenden zweiten Chemiegebäude ist seit langem vorgesehen.