

Vorwort		XIX
Kapitel 1	Grundbegriffe der Thermodynamik	1
Kapitel 2	Wärme, Arbeit, Innere Energie, Enthalpie und der erste Hauptsatz der Thermodynamik	19
Kapitel 3	Die Bedeutung von Zustandsfunktionen: Innere Energie und Enthalpie	53
Kapitel 4	Thermochemie	79
Kapitel 5	Entropie und der zweite und dritte Hauptsatz der Thermodynamik	99
Kapitel 6	Das chemische Gleichgewicht	139
Kapitel 7	Die Eigenschaften realer Gase	177
Kapitel 8	Phasendiagramme und die Existenzbereiche von Feststoffen, Flüssigkeiten und Gasen	197
Kapitel 9	Ideale und reale Lösungen	229
Kapitel 10	Elektrolytlösungen	267
Kapitel 11	Elektrochemische Zellen, Batterien und Brennstoffzellen	285
Kapitel 12	Von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik	327
Kapitel 13	Die Schrödingergleichung	345
Kapitel 14	Die Quantenmechanischen Postulate	371
Kapitel 15	Die Anwendung der Quantenmechanik auf einfache Systeme	381
Kapitel 16	Das Teilchen im Kasten und die wirkliche Welt	401
Kapitel 17	Kommutierende und nicht-kommutierende Operatoren und die überraschenden Folgen der Quantenverschränkung	425
Kapitel 18	Ein quantenmechanisches Modell für die Schwingung und Rotation von Molekülen	451
Kapitel 19	Schwingungs- und Rotationsspektroskopie von zweiatomigen Molekülen	483

Kapitel 20	Das Wasserstoffatom	523
Kapitel 21	Mehrelektronenatome	547
Kapitel 22	Beispiele der Atomspektroskopie	587
Kapitel 23	Die Chemische Bindung bei H_2^+ und H_2	611
Kapitel 24	Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen	631
Kapitel 25	Molekülstruktur und Energieniveaus von vielatomigen Molekülen	659
Kapitel 26	Elektronische Spektroskopie	693
Kapitel 27	Computerchemie	719
Kapitel 28	Molekülsymmetrie	797
Kapitel 29	Kernresonanzspektroskopie	831
Kapitel 30	Wahrscheinlichkeit	871
Kapitel 31	Die Boltzmann-Verteilung	899
Kapitel 32	Ensemble und molekulare Zustandssummen	923
Kapitel 33	Statistische Thermodynamik	959
Kapitel 34	Die kinetische Gastheorie	991
Kapitel 35	Transportphänomene	1017
Kapitel 36	Grundlagen der Reaktionskinetik	1055
Kapitel 37	Komplexe Reaktionsmechanismen	1107
	Anhang	1151
	Index	1221

Kapitel 1	Grundbegriffe der Thermodynamik	1
1.1	Was ist Thermodynamik und wozu ist sie gut?	2
1.2	Grundlegende Definitionen zur Beschreibung von thermodynamischen Systemen	3
1.3	Temperaturmessung	5
1.4	Zustandsgleichungen und das Zustandsgesetz der idealen Gase	8
1.5	Eine kurze Einführung in die realen Gase	11
Kapitel 2	Wärme, Arbeit, Innere Energie, Enthalpie und der erste Hauptsatz der Thermodynamik	19
2.1	Die Innere Energie und der erste Hauptsatz der Thermodynamik	20
2.2	Arbeit	21
2.3	Wärme	23
2.4	Wärmekapazität	28
2.5	Zustandsfunktionen und wegababhängige Funktionen	30
2.6	Gleichgewicht, Zustandsänderungen und Reversibilität	33
2.7	Vergleich der Arbeit bei reversiblen und irreversiblen Prozessen	35
2.8	Bestimmung von ΔU und Einführung der Enthalpie, einer neuen Zustandsfunktion	40
2.9	Berechnung von q , w , ΔU und ΔH für Prozesse mit idealen Gasen	40
2.10	Die reversible adiabatische Expansion und Kompression eines idealen Gases ...	45
Kapitel 3	Die Bedeutung von Zustandsfunktionen: Innere Energie und Enthalpie	53
3.1	Die mathematischen Eigenschaften von Zustandsfunktionen	54
3.2	Die Abhängigkeit von U von V und T	57
3.3	Hängt die Innere Energie stärker von V oder T ab?	61
3.4	Temperaturabhängigkeit der Enthalpie bei konstantem Druck	65
3.5	In welchem Zusammenhang stehen C_p und C_v ?	68
3.6	Druckabhängigkeit der Enthalpie bei konstanter Temperatur	68
3.7	Der Joule-Thomson-Versuch	71
3.8	Verflüssigung von Gasen über isenthalpe Expansion	74
Kapitel 4	Thermochemie	79
4.1	In chemischen Bindungen gespeicherte Energie wird in chemischen Reaktionen freigesetzt oder aufgenommen	80
4.2	Innere Energie und Enthalpieänderungen in chemischen Reaktionen	80

4.3	Der Satz von Hess besagt, dass die Enthalpie eine Zustandsfunktion ist.....	84
4.4	Die Temperaturabhängigkeit von Reaktionsenthalpien	89
4.5	Die experimentelle Bestimmung von ΔU und ΔH für chemische Reaktionen	89
4.6	Differenzial-Scanning-Kalorimetrie	93

Kapitel 5 Entropie und der zweite und dritte Hauptsatz der Thermodynamik

		99
5.1	Veränderungen im Universum haben eine vorgegebene Richtung	100
5.2	Wärme­kraft­ma­schin­en und der zweite Hauptsatz der Thermodynamik	101
5.3	Einführung in die Entropie	107
5.4	Die Berechnung von Entropieänderungen	108
5.5	Die Verwendung der Entropie zur Berechnung der natürlichen Zustandsänderung in einem isolierten System	112
5.6	Die Clausius'sche Ungleichung	114
5.7	Die Entropieänderung in der Umgebung und $\Delta S_{\text{gesamt}} = \Delta S + \Delta S_{\text{Umgebung}}$	115
5.8	Absolute Entropien und der dritte Hauptsatz der Thermodynamik	118
5.9	Standardzustände in Entropieberechnungen.....	122
5.10	Entropieänderungen in chemischen Reaktionen.....	123
5.11	Kühlschränke, Wärmepumpen und reale Wärme­kraft­ma­schin­en.....	124
5.12	Ergänzung – Bestimmung der Abhängigkeit von S von V und T über die Tatsache, dass S eine Zustandsfunktion ist	129
5.13	Ergänzung – Die T - und p -Abhängigkeit von S	130
5.14	Ergänzung – Die thermodynamische Temperaturskala.....	131

Kapitel 6 Das chemische Gleichgewicht

		139
6.1	Die Gibbs-Energie und die Helmholtz-Energie.....	140
6.2	Die Differenzialformen von U , H , A und G	144
6.3	Die Abhängigkeit der Gibbs- und Helmholtz-Energien von p , V und T	145
6.4	Die Gibbs-Energie einer Reaktionsmischung	148
6.5	Die Gibbs-Energie eines Gases in einer Mischung	150
6.6	Berechnung der Gibbs-Mischungsenergie für ideale Gase	150
6.7	Das chemische Gleichgewicht in einer idealen Gasmischung, ausgedrückt über das chemische Potenzial.....	153
6.8	Berechnung von $\Delta G_{\text{Reaktion}}$ und Einführung der Gleichgewichtskonstante für eine Mischung von idealen Gasen	155
6.9	Berechnung der Gleichgewichtspartialdrücke in einer Mischung von idealen Gasen	157
6.10	Die Änderung von K_p mit der Temperatur.....	157
6.11	Gleichgewichte zwischen idealen Gasen und festen oder flüssigen Phasen....	160
6.12	Formulieren der Gleichgewichtskonstante mit Molenbrüchen oder Molaritäten.....	160
6.13	Die Abhängigkeit von ξ_{eq} von T und p	162
6.14	Ergänzung – Eine Fallstudie: Die Ammoniaksynthese.....	163
6.15	Ergänzung – Darstellung von U und H und der Wärmekapazitäten über Messgrößen.....	168

Kapitel 7	Die Eigenschaften realer Gase	177
7.1	Reale Gase und ideale Gase	178
7.2	Zustandsgleichungen für reale Gase und ihr Anwendungsbereich	178
7.3	Der Kompressionsfaktor	183
7.4	Das Gesetz der korrespondierenden Zustände	186
7.5	Fugazität und die Gleichgewichtskonstante für reale Gase	190

Kapitel 8	Phasendiagramme und die Existenzbereiche von Feststoffen, Flüssigkeiten und Gasen	197
8.1	Wodurch wird die relative Stabilität der festen, flüssigen und gasförmigen Phasen bestimmt?	198
8.2	Das Druck-Temperatur-Phasendiagramm	201
8.3	Druck-Volumen- und Druck-Volumen-Temperatur-Phasendiagramme	208
8.4	Die theoretische Grundlage des p - T -Phasendiagrammes	211
8.5	Anwendung der Clapeyron-Gleichung zur Berechnung des Dampfdrucks als Funktion von T	212
8.6	Der Dampfdruck eines Reinstoffes hängt vom angewandten Druck ab	214
8.7	Oberflächenspannung	216
8.8	Chemie in überkritischen Fluiden	220
8.9	Flüssigkristalle und LCD-Displays	221

Kapitel 9	Ideale und reale Lösungen	229
9.1	Definition der idealen Lösung	230
9.2	Das chemische Potenzial einer Komponente in der Gasphase und in den Lösungen	232
9.3	Anwendung des Modells der idealen Lösung auf binäre Lösungen	233
9.4	Das Temperatur-Zusammensetzungs-Diagramm und die fraktionierte Destillation	238
9.5	Die Gibbs-Duhem-Gleichung	241
9.6	Kolligative Eigenschaften	242
9.7	Gefrierpunktniedrigung und Siedepunkterhöhung	244
9.8	Der osmotische Druck	246
9.9	Reale Lösungen weisen Abweichungen vom Raoult'schen Gesetz auf	248
9.10	Die ideale verdünnte Lösung	252
9.11	Aktivitäten werden in Bezug auf Standardzustände definiert	254
9.12	Das Henry-Gesetz und die Löslichkeit von Gasen in einem Lösungsmittel	258
9.13	Chemisches Gleichgewicht in Lösungen	259

Kapitel 10	Elektrolytlösungen	267
10.1	Die Enthalpie, Entropie und freie Enthalpie der Ionenbildung in Lösungen ...	268
10.2	Erklärung der thermodynamischen Funktionen bei Ionenbildung und -lösung	271
10.3	Aktivitäten und Aktivitätskoeffizienten für Elektrolytlösungen	273

10.4	Berechnung von γ_{\pm} über die Debye-Hückel-Theorie	275
10.5	Chemisches Gleichgewicht in Elektrolytlösungen	280

Kapitel 11 Elektrochemische Zellen, Batterien und Brennstoffzellen **285**

11.1	Die Auswirkung eines elektrischen Potentials auf das chemische Potential geladener Stoffe	286
11.2	Konventionen und Standardzustände der Elektrochemie	288
11.3	Messung des reversiblen Zellenpotentials	291
11.4	Chemische Reaktionen in elektrochemischen Zellen und die Nernst-Gleichung	292
11.5	Kombination von Standardelektrodenpotentialen zur Bestimmung des Zellenpotentials	294
11.6	Bestimmung von Reaktions-Gibbs-Energien und Reaktions-Entropien aus Zellenpotentialen	296
11.7	Die Beziehung zwischen Zell-EMK und Gleichgewichtskonstante	297
11.8	Bestimmung von E° und der Aktivitätskoeffizienten unter Verwendung einer elektrochemischen Zelle	299
11.9	Zell-Nomenklatur und Typen elektrochemischer Zellen	299
11.10	Die elektrochemische Spannungsreihe	302
11.11	Thermodynamik von Batterien und Brennstoffzellen	303
11.12	Die Elektrochemie häufig verwendeter Batterien	303
11.13	Brennstoffzellen	307
11.14	Ergänzung – Elektrochemie im atomaren Maßstab	308
11.15	Ergänzung – Maschinenbau im Nanobereich durch Elektrochemie	315
11.16	Ergänzung – Absolute Halbzellenpotenziale	317

Kapitel 12 Von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik **327**

12.1	Warum sich mit der Quantenmechanik befassen?	328
12.2	Die Entwicklung der Quantenmechanik aus dem Zusammenspiel von Theorie und Experiment	329
12.3	Strahlung eines schwarzen Körpers	330
12.4	Der Photoelektrische Effekt	332
12.5	Wellenartiges Verhalten von Teilchen	335
12.6	Beugung am Doppelspalt	336
12.7	Atomspektren	339

Kapitel 13 Die Schrödingergleichung **345**

13.1	Was entscheidet, ob ein System mit Hilfe der Quantenmechanik betrachtet werden muss?	346
13.2	Klassische Wellen und die nicht-dispersive Wellengleichung	351
13.3	Wellen können durch komplexe Funktionen einfach ausgedrückt werden	355
13.4	Quantenmechanische Wellen und die Schrödingergleichung	357
13.5	Die Lösung der Schrödingergleichung: Operatoren, Observablen, Eigenfunktionen und Eigenwerte	358

13.6	Die Eigenfunktionen eines quantenmechanischen Operators sind orthogonal..	360
13.7	Die Eigenfunktionen eines quantenmechanischen Operators bilden ein vollständiges System.....	363
13.8	Zusammenfassung der neuen Konzepte	365

Kapitel 14 Die Quantenmechanischen Postulate 371

14.1	Die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion.....	372
14.2	Jede Observable besitzt einen entsprechenden Operator.....	374
14.3	Das Ergebnis einer einzelnen Messung	375
14.4	Der Erwartungswert.....	375
14.5	Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems	379

Kapitel 15 Die Anwendung der Quantenmechanik auf einfache Systeme 381

15.1	Das Freie Teilchen	382
15.2	Das Teilchen im eindimensionalen Kasten	383
15.3	Der zwei- und der dreidimensionale Kasten.....	389
15.4	Die Postulate erleichtern das Verständnis des Teilchens im Kasten und umgekehrt	390

Kapitel 16 Das Teilchen im Kasten und die wirkliche Welt 401

16.1	Das Teilchen im Kasten endlicher Tiefe	402
16.2	Unterschiedliche Überlappung bei Rumpf- und Valenzelektronen	403
16.3	Pi-Elektronen konjugierter Moleküle und Teilchen im Kasten.....	404
16.4	Wieso leitet Natrium Elektrizität und warum ist Diamant ein Isolator?	405
16.5	Das Passieren von Barrieren mittels Tunneleffekt	407
16.6	Das Rastertunnelmikroskop	408
16.7	Der Tunneleffekt bei chemischen Reaktionen.....	413
16.8	Ergänzung – Quantentöpfe und Quantenpunkte	414

Kapitel 17 Kommutierende und nicht-kommutierende Operatoren und die überraschenden Folgen der Quantenverschränkung 425

17.1	Kommutationsrelationen	426
17.2	Das Stern-Gerlach-Experiment	428
17.3	Die Heisenberg'sche Unschärferelation	431
17.4	Ergänzung – Die Heisenberg'sche Unschärferelation als Funktion von Standardabweichungen	435
17.5	Ergänzung – Ein Gedankenexperiment mit einem Teilchen im dreidimensionalen Kasten	438
17.6	Ergänzung – Verschränkte Zustände, Teleportation und Quantencomputer	440

Kapitel 18 Ein quantenmechanisches Modell für die Schwingung und Rotation von Molekülen	451
18.1 Die Lösung der Schrödingergleichung für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator	452
18.2 Die Lösung der Schrödingergleichung für die zweidimensionale Rotation	458
18.3 Die Lösung der Schrödingergleichung für die dreidimensionale Rotation	462
18.4 Die Quantelung des Drehimpulses	464
18.5 Die Kugelflächenfunktionen	466
18.6 Optionaler Rückblick – Der klassische harmonische Oszillator	469
18.7 Optionaler Rückblick – Drehbewegungen und der klassische starre Rotator ...	474
18.8 Ergänzung – Räumliche Quantisierung	477

Kapitel 19 Schwingungs- und Rotationspektroskopie von zweiatomigen Molekülen	483
19.1 Eine Einführung in die Spektroskopie	484
19.2 Absorption, spontane Emission und stimulierte Emission	487
19.3 Eine Einführung in die Schwingungsspektroskopie	489
19.4 Die Herkunft der Auswahlregeln	493
19.5 Infrarot-Absorptionspektroskopie	495
19.6 Rotationspektroskopie	499
19.7 Ergänzung – Fouriertransform-Infrarot-Spektroskopie	506
19.8 Ergänzung – Raman-Spektroskopie	508
19.9 Ergänzung – Wie hängen die Übergangsraten zwischen Zuständen von der Frequenz ab?	511

Kapitel 20 Das Wasserstoffatom	523
20.1 Formulierung der Schrödingergleichung	524
20.2 Die Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom	524
20.3 Eigenwerte und Eigenfunktionen der Gesamtenergie	526
20.4 Die Orbitale des Wasserstoffatoms	533
20.5 Die radiale Verteilungsfunktion	536
20.6 Die Gültigkeit des Schalenmodells der Atome	541

Kapitel 21 Mehrelektronenatome	547
21.1 Helium: Das kleinste Mehrelektronenatom	548
21.2 Einführung des Elektronenspins	550
21.3 Die Wellenfunktionen müssen die Ununterscheidbarkeit der Elektronen wiedergeben	551
21.4 Die Lösung der Schrödingergleichung mit der Variationsmethode	555
21.5 Die Hartree-Fock-Methode des selbstkonsistenten Feldes	557
21.6 Trends im Periodensystem über die Hartree-Fock-Berechnungen verstehen ...	562
21.7 Gute Quantenzahlen, Terme, Niveaus und Zustände	565

21.8	Die Energie einer Konfiguration hängt sowohl vom Bahn- als auch vom Spindrehimpuls ab.....	567
21.9	Die Spin-Bahn-Kopplung spaltet einen Term in Niveaus auf.....	575
21.10	Ergänzung – Die Energien von Konfigurationen mit gepaarten und ungepaarten Elektronenspins sind verschieden.....	577

Kapitel 22 Beispiele der Atomspektroskopie **587**

22.1	Die Grundlagen der Atomspektroskopie.....	588
22.2	Analysetechniken auf Basis der Atomspektroskopie.....	590
22.3	Der Dopplereffekt.....	594
22.4	Der Helium-Neon-Laser.....	595
22.5	Laserisotopentrennung.....	600
22.6	Auger-Elektronen- und Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie.....	601
22.7	Die selektive Chemie der angeregten Zustände: O(³ P) und O(¹ D).....	605

Kapitel 23 Die Chemische Bindung bei H₂⁺ und H₂ **611**

23.1	Quantenmechanik und Chemische Bindung.....	612
23.2	Das einfachste Ein-Elektronen-Molekül: H ₂ ⁺	612
23.3	Die Molekülwellenfunktion für H ₂ ⁺ im Grundzustand.....	614
23.4	Die Energie der Molekülwellenfunktionen ψ_g und ψ_u	615
23.5	Eine genauere Betrachtung der Molekülwellenfunktionen ψ_g und ψ_u	618
23.6	Das H ₂ -Molekül: Molekülorbital- und Valenzbindungsmodell.....	623
23.7	Vergleich des Valenzbindungs- und Molekülorbital-Modells der Chemischen Bindung.....	626

Kapitel 24 Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen **631**

24.1	Lösung der Schrödingergleichung für Mehr-Elektronen-Moleküle.....	632
24.2	Darstellung von Molekülorbitalen als Linearkombinationen von Atomorbitalen.....	632
24.3	Das Molekülorbital-Energiediagramm.....	637
24.4	Molekülorbitale von homonuklearen zweiatomigen Molekülen.....	639
24.5	Die elektronische Struktur von Mehr-Elektronen-Molekülen.....	644
24.6	Bindungsordnung, Bindungsenergie und Bindungslänge.....	647
24.7	Heteronukleare zweiatomige Moleküle.....	649
24.8	Ergänzung – Das Molekulare Elektrostatische Potenzial (MEP).....	651

Kapitel 25 Molekülstruktur und Energieniveaus von vielatomigen Molekülen **659**

25.1	Lewis-Strukturen und das VSEPR-Modell.....	660
25.2	Beschreibung lokalisierter Bindungen über Hybridisierung für Methan, Ethen und Acetylen.....	663
25.3	Konstruktion von Hybridorbitalen für nicht-äquivalente Liganden.....	667
25.4	Hybridisierung zur Beschreibung chemischer Bindung.....	672

25.5	Vorhersage der Molekülstruktur mittels Molekülorbitaltheorie	674
25.6	Wie unterschiedlich sind lokalisierte und delokalisierte Bindungsmodelle? ...	678
25.7	Qualitative Molekülorbitaltheorie für konjugierte und aromatische Moleküle: Das Hückel-Modell	680
25.8	Von Molekülen zu Festkörpern	687
25.9	So macht man Halbleiter bei Raumtemperatur leitfähig	689

Kapitel 26 Elektronische Spektroskopie **693**

26.1	Die Energie von elektronischen Übergängen	694
26.2	Termsymbole von Molekülen	695
26.3	Übergänge zwischen elektronischen Zuständen von zweiatomigen Molekülen	698
26.4	Die Schwingungsfinestruktur von elektronischen Übergängen in zweiatomigen Molekülen	700
26.5	Absorption von UV/Vis Licht in mehratomigen Molekülen	702
26.6	Übergänge zwischen Grundzuständen und angeregten Zuständen	705
26.7	Singulett-Singulett-Übergänge: Absorption und Fluoreszenz	706
26.8	Intersystem-Crossing und Phosphoreszenz	708
26.9	Fluoreszenzspektroskopie und analytische Chemie	710
26.10	UV-Photoelektronenspektroskopie	711
26.11	Ergänzung – Die Zuweisung von + und – in Σ -Termen zweiatomiger Moleküle	715

Kapitel 27 Computerchemie **719**

27.1	Das Versprechen der Computerchemie	720
27.2	Potenzialhyperflächen	721
27.3	Die Molekülorbitaltheorie und das Hartree-Fock-Verfahren: Ein direkter Abkömmling der Schrödingergleichung	726
27.4	Eigenschaften von Hartree-Fock-Modellen – Das Hartree-Fock-Limit	728
27.5	Theoretische Modelle und Modellchemie	734
27.6	Weiterentwicklungen der Hartree-Fock-Theorie	735
27.7	Gauß'sche Basissätze	741
27.8	Die Wahl eines theoretischen Modells	745
27.9	Grafische Modelle	763
27.10	Zusammenfassung	771

Kapitel 28 Molekülsymmetrie **797**

28.1	Symmetrieelemente, Symmetrioperationen und Punktgruppen	798
28.2	Zuordnung von Molekülen zu Punktgruppen	801
28.3	Das H_2O -Molekül und die C_{2v} -Punktgruppe	803
28.4	Darstellungen von Symmetrieeoperatoren, Basen für Darstellungen und der Charaktertafel	808
28.5	Die Dimension einer Darstellung	810
28.6	Verwendung der C_{2v} -Darstellungen zur Konstruktion von Molekülorbitalen für H_2O	814

28.7	Die Symmetrien der Normalmoden von Molekülen	817
28.8	Auswahlregeln und Infrarot- oder Raman-Aktivität	821
28.9	Ergänzung – Verwendung der Projektionsoperatormethode zur Erzeugung von Molekülorbitalen, die Basen für irreduzible Darstellungen sind	823

Kapitel 29 Kernresonanzspektroskopie **831**

29.1	Kerndrehimpuls und magnetisches Moment	832
29.2	Die Energie von Atomkernen mit nicht-verschwindendem Kernspin in einem Magnetfeld	833
29.3	Die chemische Verschiebung für ein isoliertes Atom	836
29.4	Die chemische Verschiebung für ein Atom in einem Molekül	838
29.5	Die Elektronegativität benachbarter Gruppen und chemische Verschiebungen	839
29.6	Die Magnetfelder benachbarter Gruppen und chemische Verschiebungen	839
29.7	Multiplettaufspaltung von NMR-Peaks als Konsequenz der Spin-Spin-Kopplung	841
29.8	Multiplettaufspaltung bei mehr als zwei wechselwirkenden Spins	847
29.9	Die Peakbreite in der NMR-Spektroskopie	849
29.10	Festkörper-NMR	850
29.11	NMR-Bildgebung	852
29.12	Ergänzung – Das NMR-Experiment im Labor und im rotierenden Bezugssystem	854
29.13	Ergänzung – Die Fourier-Transform-NMR-Spektroskopie	856
29.14	Ergänzung – Die zweidimensionale NMR-Spektroskopie	861

Kapitel 30 Wahrscheinlichkeit **871**

30.1	Wozu dient die Wahrscheinlichkeit?	872
30.2	Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie	873
30.3	Stirling-Formel	882
30.4	Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen	883
30.5	Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit diskreten und stetigen Variablen	885
30.6	Charakterisierung von Verteilungsfunktionen	888

Kapitel 31 Die Boltzmann-Verteilung **899**

31.1	Mikrozustände und Konfigurationen	900
31.2	Ableitung der Boltzmann-Verteilung	907
31.3	Dominanz der Boltzmann-Verteilung	912
31.4	Physikalische Bedeutung des Boltzmann-Verteilungsgesetzes	914
31.5	Die Definition von β	915

Kapitel 32 Ensemble und molekulare Zustandssummen **923**

32.1	Das Kanonische Ensemble	924
32.2	Die Beziehung von Q zu q in einem idealen Gas	925
32.3	Molekulare Energieniveaus	927

32.4	Translationszustandssumme	928
32.5	Rotationszustandssumme: Zweiatomige Moleküle	931
32.6	Rotationszustandssumme: Mehratomige Moleküle	940
32.7	Schwingungszustandssumme	942
32.8	Das Gleichverteilungstheorem	947
32.9	Elektronische Zustandssumme	949
32.10	Zusammenfassung	952

Kapitel 33 Statistische Thermodynamik **959**

33.1	Energie	960
33.2	Energie und die energetischen Freiheitsgrade von Molekülen	964
33.3	Wärmekapazität	968
33.4	Entropie	973
33.5	Nullpunktentropie	976
33.6	Andere thermodynamische Funktionen	979
33.7	Chemisches Gleichgewicht	981

Kapitel 34 Die kinetische Gastheorie **991**

34.1	Eine kinetische Betrachtung der Teilchenbewegungen und des Drucks in der Gasphase	992
34.2	Die eindimensionale Geschwindigkeitsverteilung	995
34.3	Die Maxwell-Verteilung von Molekülgeschwindigkeiten	999
34.4	Vergleich der die Geschwindigkeitsverteilung charakterisierenden Werte: v_{ave} , v_{mp} und v_{RMS}	1002
34.5	Die Effusion von Gasen	1004
34.6	Stöße zwischen Molekülen	1007
34.7	Die mittlere freie Weglänge	1010

Kapitel 35 Transportphänomene **1017**

35.1	Was bedeutet Transport?	1018
35.2	Massetransport: Diffusion	1019
35.3	Die zeitliche Entwicklung des Konzentrationsgradienten	1023
35.4	Ergänzung – Die Diffusion aus statistischer Perspektive	1026
35.5	Wärmeleitung	1028
35.6	Die Viskosität von Gasen	1032
35.7	Viskositätsmessung	1035
35.8	Diffusion in Flüssigkeiten und Viskosität von Flüssigkeiten	1037
35.9	Ergänzung – Sedimentation und Zentrifugation	1039
35.10	Ionenleitung	1042

Kapitel 36 Grundlagen der Reaktionskinetik	1055
36.1 Einführung in die Kinetik.....	1056
36.2 Reaktionsgeschwindigkeiten.....	1057
36.3 Gesetze der Reaktionskinetik.....	1059
36.4 Reaktionsmechanismen.....	1065
36.5 Integrierte Geschwindigkeitsgesetze.....	1067
36.6 Ergänzung – Numerische Verfahren.....	1072
36.7 Folgereaktionen erster Ordnung.....	1074
36.8 Parallelreaktionen.....	1080
36.9 Temperaturabhängigkeit von Geschwindigkeitskonstanten.....	1082
36.10 Reversible Reaktionen und Gleichgewicht.....	1084
36.11 Ergänzung – Relaxations-Verfahren.....	1088
36.12 Ergänzung – Die Autoionisation von Wasser: Ein Beispiel zur Temperatursprung-Methode.....	1090
36.13 Potenzialenergieflächen.....	1091
36.14 Theorie des aktivierten Komplexes.....	1094

Kapitel 37 Komplexe Reaktionsmechanismen	1107
37.1 Reaktionsmechanismen und Reaktionsgeschwindigkeitsgesetze.....	1108
37.2 Die Näherung des vorgelagerten Gleichgewichtes.....	1110
37.3 Der Lindemann-Mechanismus.....	1111
37.4 Katalyse.....	1114
37.5 Radikalkettenreaktionen.....	1127
37.6 Radikalkettenpolymerisation.....	1129
37.7 Explosionen.....	1130
37.8 Fotochemie.....	1133

Anhang	1151
A Mathematischer Anhang.....	1152
B Datentabellen.....	1175
C Punktgruppen-Charaktertabellen.....	1198
D Lösungen zu ausgewählten Aufgaben.....	1204

Index	1221
--------------	-------------