

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	V
Liste der wichtigsten Symbole	XI
1 Aggregatzustände	1
1.1 Ideale Gase	1
1.1.1 Das ideale Gasgesetz	1
1.1.2 Gasmischungen	4
1.1.3 Geschwindigkeiten von Gasteilchen	6
1.1.4 Effusion	11
1.1.5 Stöße zwischen Gasteilchen	12
1.1.6 Flüsse: Diffusion, Viskosität und Wärmeleitung	14
1.2 Reale Gase	22
1.2.1 Zwischenmolekulare Kräfte	23
1.2.2 Virial- und VAN DER WAALS-Gleichung	25
1.3 Flüssigkeiten	30
1.3.1 Niedermolekulare Flüssigkeiten	30
1.3.2 Flüssigkristalle	32
1.3.3 Lösungen von Makromolekülen	32
1.4 Kristalline Festkörper	37
2 Thermodynamik	41
2.1 Erster Hauptsatz der Thermodynamik	41
2.1.1 Begriffe und Definitionen	41
2.1.2 Formulierung des ersten Hauptsatzes	42
2.1.3 Innere Energie und Enthalpie	45
2.1.4 Wärmekapazitäten	47
2.1.5 Adiabatische Prozesse	48
2.1.6 Thermochemie	52
2.1.7 Differenz-Scanning-Kalorimetrie	57
2.2 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	59
2.2.1 Einführung der Größe Entropie	59
2.2.2 Eigenschaften der Entropie	62
2.2.3 GIBBS-Energie und HELMHOLTZ-Energie	66
2.3 Mischungen	71
2.3.1 Partielle molare Größen	72
2.3.2 Das chemische Potenzial	74
2.3.3 Mischungsgrößen	77
2.3.4 Exzessgrößen	78
2.3.5 Das RAOULTSche Gesetz	80
2.3.6 Das HENRYsche Gesetz	82
2.3.7 Kolligative Eigenschaften	85
2.4 Chemische Gleichgewichte	89
2.4.1 Gleichgewichtskonstanten	90

2.4.2	Temperatur- und Druckabhängigkeit von Gleichgewichtskonstanten	94
2.4.3	Ermittlung von Gleichgewichtskonstanten	96
2.5	Phasendiagramme	99
2.5.1	GIBBSsche Phasenregel	99
2.5.2	Einkomponentensysteme	100
2.5.3	Zweikomponentensysteme	103
2.5.4	Klassifikation von Phasenumwandlungen	111
3	Aufbau der Materie	115
3.1	Grenzen der klassischen Physik	115
3.2	Einführung in die Quantenmechanik	117
3.3	Mikroskopische Teilchen in Bewegung	120
3.3.1	Translation	120
3.3.2	Rotation	124
3.3.3	Schwingung	129
3.4	Atome	132
3.4.1	Das Wasserstoffatom	133
3.4.2	Der Elektronenspin	138
3.4.3	Aufbau des Periodensystems der Elemente	140
3.4.4	Termsymbole für Atome	144
3.5	Moleküle	146
3.5.1	Die BORN-OPPENHEIMER-Näherung	146
3.5.2	Der LCAO-Ansatz	147
3.5.3	Die chemische Bindung	149
3.5.4	Ab-initio-Molekülorbital-Rechnungen	153
3.5.5	Molekulardynamik-Computersimulationen	162
3.5.6	Die HÜCKEL-MO-Methode	162
3.6	Photoelektronenspektroskopie	165
4	Statistische Thermodynamik	167
4.1	Isolierte Systeme	167
4.2	Geschlossene Systeme	169
4.2.1	Thermodynamische Größen geschlossener Systeme	172
4.3	Offene Systeme	174
4.3.1	Thermodynamische Größen offener Systeme	176
4.4	Anwendung: Ideale Gase	178
4.4.1	Thermodynamische Größen idealer Gase	182
4.5	Das Äquipartitionstheorem	188
4.6	Anwendung: Wärmekapazitäten kristalliner Festkörper	189
5	Oberflächenerscheinungen	193
5.1	Einleitung	193
5.2	Die Oberflächenspannung	194
5.3	Gekrümmte Oberflächen	196
5.4	Benetzung fester Oberflächen	199
5.5	Thermodynamische Oberflächengrößen	200

5.6	Oberflächenerscheinungen von Mischungen	203
5.6.1	Oberflächenkonzentrationen	203
5.6.2	Der Spreitungsdruck von Oberflächenfilmen	206
5.7	Gasadsorption an Festkörperoberflächen	208
5.7.1	Theorien der Gasadsorption	209
5.7.2	Isostere Adsorptionsenthalpie	211
6	Elektrochemie	213
6.1	Ionentransport in Elektrolytlösungen	213
6.1.1	Mikroskopische Beschreibung der Ionenwanderung im elektrischen Feld	217
6.1.2	Diffusion in Elektrolytlösungen	220
6.1.3	FARADAY-Gesetze (Coulombmeter)	222
6.1.4	Überführungszahlen	223
6.1.5	Leitfähigkeit schwacher Elektrolyte	227
6.2	Thermodynamische Eigenschaften von Ionen in Lösung	228
6.3	Aktivitätskoeffizienten von Elektrolytlösungen	231
6.3.1	DEBYE-HÜCKEL-Theorie	233
6.4	Elektrochemische Thermodynamik	239
6.4.1	Die elektromotorische Kraft	239
6.4.2	Bestimmung von Standard-Potenzialen, Aktivitätskoeffizienten und pH-Werten	247
6.4.3	Diffusionspotenziale	252
6.4.4	Konzentrationsketten	253
6.5	Technisch wichtige Zellen (Galvanische Elemente)	257
6.6	Elektrolyse und Potenziale von Zellen unter Belastung	259
7	Reaktionskinetik	265
7.1	Grundbegriffe und Messmethoden	265
7.2	Einfache Geschwindigkeitsgesetze (Formalkinetik)	268
7.3	Bestimmung der Geschwindigkeitsgleichung	274
7.4	Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten	276
7.5	Komplexe Reaktionen	278
7.5.1	Reversible Reaktionen	279
7.5.2	Parallelreaktionen 1. Ordnung	281
7.5.3	Folgereaktionen	282
7.5.4	Kettenreaktionen	285
7.5.5	Explosionen	286
7.5.6	Enzymreaktionen	287
7.6	Theorien der Elementarreaktionen	289
7.6.1	Stoßtheorie bimolekularer Reaktionen	290
7.6.2	Theorie des Übergangszustandes	291
7.6.3	Katalysatoren	299
7.7	Reaktionen in Lösung	299
7.7.1	Reaktionen zwischen Ionen	302
7.8	Relaxationsverfahren	303

8 Molekülspektroskopie	305
8.1 Elektrische Eigenschaften der Materie	305
8.1.1 Messung von elektrischen Dipolmomenten	307
8.2 Prinzipien der Spektroskopie	310
8.3 Reine Rotationsspektren	314
8.3.1 Der unstarre lineare Rotator	317
8.4 Schwingungsspektroskopie	317
8.4.1 Rotations-Schwingungsspektren	318
8.4.2 Schwingungen mehratomiger Moleküle	322
8.5 RAMAN-Spektroskopie	323
8.5.1 Rotations-RAMAN-Spektren	325
8.5.2 Schwingungs-RAMAN-Spektren	327
8.6 Elektronenschwingungsspektren von Molekülen	328
8.6.1 Elektronenschwingungsspektren in der Gasphase	330
8.6.2 Desaktivierung elektronisch angeregter Zustände	335
8.7 NMR-Spektroskopie	337
8.7.1 Grundlagen	337
8.7.2 Die chemische Verschiebung	342
8.7.3 Spin-Spin-Wechselwirkung	346
8.7.4 Chemischer Austausch	349
8.8 Elektronen-Spin-Resonanz (ESR)	350
A Literaturauswahl	355
B SI-Einheiten und abgeleitete Größen	359
C Naturkonstanten	361
Index	364