

Teil I: Atome, Moleküle, Kerne

Kapitel 1 Gasmoleküle und ihre Energie	1
1.1 Die Gasgesetze von Boyle-Mariotte und Gay-Lussac	2
1.2 Das ideale Gasgesetz und die Gaskonstante	6
1.3 Daltonsches Partialdruckgesetz und mittlere Molmasse	9
1.4 Das kinetische Modell der Gase	11
1.5 Mittlere kinetische Energie und Gleichverteilungssatz	14
1.6 Die MB-Geschwindigkeitsverteilung	16
1.7 Gasmoleküle als starre Kugeln	22
1.8 Reale Gase und Moleküldurchmesser	24
Kapitel 2 Die quantenmechanische Beschreibung atomarer Teilchen .	31
2.1 Licht-Materiewechselwirkung	32
2.2 Das Bohrsche Atommodell	36
2.3 Das Konzept der Quantenmechanik	44
2.4 Teilchen in einem eindimensionalen Potentialtopf	48
2.5 Teilchen in einem dreidimensionalen Potentialtopf	52
2.6 Die Translationsenergie	54
2.7 Die Rotationsenergie	56
2.8 Die Schwingungsenergie	61
2.9 Normalschwingungen mehratomiger Moleküle	67
Kapitel 3 Der Atomaufbau	78
3.1 Die Energieeigenwerte der Einelektronenatome	78
3.2 Die Eigenfunktionen der Einelektronenatome	82
3.3 Das Vektormodell der Einelektronenatome	89
3.4 Zweielektronenatome	96
3.5 Das Antisymmetrieprinzip	99
3.6 Das He-Atom	101
3.7 Atomaufbau der Elemente	107
3.8 Elektronenkonfiguration und chemisches Verhalten der Atome	116
Kapitel 4 Molekülsymmetrie und Gruppentheorie	119
4.1 Symmetrioperationen in Matrizendarstellung	120
4.2 Die Prinzipien der Gruppentheorie	124
4.3 Der Charakter von Matrizendarstellungen	128
4.4 Molekülsymmetrie und Charaktertafel	131
4.5 Gruppentheoretische Anwendungen	136

Kapitel 5 Chemische Bindung und Molekülaufbau	144
5.1 Klassische Deutungsversuche und Ionenbindung	145
5.2 Das H ₂ -Molekül	148
5.3 VB-Methode und Hybridisierung von Atomorbitalen	154
5.4 Valenzorbitale und ihre Symmetrie	157
5.5 Resonanzhybridisierung	162
5.6 Variationsrechnung und MO-Theorie	164
5.7 Zweiatomige, homonukleare Moleküle und ihre Symmetrie	170
5.8 Zweiatomige, heteronukleare Moleküle und Elektronegativität	175
5.9 Konjugierte π -Elektronensysteme	181
5.10 Koordinations- und Elektronenüberschußverbindungen	185
Kapitel 6 Molekülspektren	191
6.1 Strahlungstheorie	191
6.2 Das Lambert-Beersche Absorptionsgesetz	196
6.3 Rotationsspektren	200
6.4 Schwingungsspektren	206
6.5 Elektronenspektren	213
6.6 Photoelektronen- und Massenspektroskopie	223
6.7 Kern- und Elektronenresonanzspektroskopie	228
Kapitel 7 Elektrische und magnetische Molekülmomente	241
7.1 Die dielektrische Polarisation	241
7.2 Das elektrische Dipolmoment	247
7.3 Messung des Dipolmoments und der Polarisierbarkeit	251
7.4 Dipolmoment und Ionencharakter	256
7.5 Magnetische Molekülmomente	260
Kapitel 8 Lichtstreuung an Molekülen	268
8.1 Ramanspektren	269
8.2 Rayleighstreuung an Makromolekülen	273
8.3 Beugungserscheinungen	278
8.4 Die Wierlgleichung	282
8.5 Auswertung des Beugungsspektrums	287
Kapitel 9 Aufbau der Atomkerne	293
9.1 Allgemeine Kerneigenschaften	293
9.2 Tröpfchenmodell und Stabilität der Atomkerne	301
9.3 Das Schalenmodell der Atomkerne	306
9.4 Natürliche und künstliche radioaktive Kerne	310
9.5 Kernanregung, Kernreaktionen und Kernspaltung	314
9.6 Elementarteilchen	319

Teil II: Gase, Flüssigkeiten, Festkörper und Mischphasen

Kapitel 10	Statistische Beschreibung der Materie	1
10.1	Das Antisymmetrieprinzip	2
10.2	Die FD- und die BE-Statistik	4
10.3	Die MB-Verteilung und der Multiplikator β	11
10.4	Das Konzept der Zustandssumme	14
10.5	Die Zustandssummen der Translation, der Rotation und der Schwingung und die mittlere Gesamtenergie eines Gases	17
10.6	Statistische Begründung der MB-Geschwindigkeitsverteilung	22
10.7	Die Entropie	25
10.8	Die Mischungsentropie	30
10.9	Das chemische Potential μ und der Multiplikator α	32
Kapitel 11	Die Thermodynamik	36
11.1	Zustandsfunktionen und Energieerhaltungssatz	36
11.2	Wärme und Volumenarbeit	41
11.3	Enthalpie und spezifische Wärme bei konstantem Druck	45
11.4	Statistische Berechnung der Molwärme	50
11.5	Entropie und 2. Hauptsatz	53
11.6	Die freie Enthalpie	59
11.7	Unerreichbarkeit des absoluten Nullpunktes	64
11.8	Entropie und 3. Hauptsatz	65
11.9	Das thermodynamische Formelgebäude	70
Kapitel 12	Reale Gase	74
12.1	Das reale Verhalten der Gase	74
12.2	Das Theorem der übereinstimmenden Zustände	78
12.3	Das van der Waalsgas	79
12.4	Statistische Behandlung realer Gase	81
12.5	Statistische Interpretation des van der Waalsgases	87
12.6	Die Molwärmedifferenz und der Joule-Thomsonkoeffizient	89
12.7	Die freie Enthalpie	93
Kapitel 13	Die Kristallstruktur	100
13.1	Die Kristallsymmetrie	100
13.2	Kristallgitter und Elementarzelle	105
13.3	Braggsche Reflexion und Einkristallverfahren	109
13.4	Das Debye-Scherrerverfahren und die NaCl-Struktur	116
13.5	Der Strukturfaktor	121
13.6	Fouriersynthese der Elektronendichte	124

Kapitel 14 Festkörper	129
14.1 Ionenkristalle und Gitterenergie	130
14.2 Die Molwärme	136
14.3 Die Molwärme der Metalle und das Elektronengasmodell	142
14.4 Bändermodell und Metalle	146
14.5 Valenzkristalle und Halbleiter	153
14.6 Molekülkristalle	157
14.7 Der reale Festkörper	162
14.8 Diffusion und Leitfähigkeit	167
Kapitel 15 Flüssigkeiten	176
15.1 Flüssigkeitsstruktur und Röntgenbeugung	177
15.2 Paarverteilungsfunktion und thermodynamische Eigenschaften	182
15.3 van der Waalswechselwirkungen	186
15.4 Dampfdruck und Verdampfungsenthalpie	193
15.5 Verdampfungsentropie und Gasmodell	196
15.6 Die Molwärme	199
15.7 Computersimulation	201
15.8 Die Viskosität und das Hagen-Poiseuillesche Gesetz	204
15.9 Die Oberflächenspannung	208
Kapitel 16 Systeme aus mehreren chemischen Komponenten und Phasen	214
16.1 Phasen, Komponenten und Freiheiten	214
16.2 Das chemische Potential von Komponenten in Mischphasen	217
16.3 Zustandsdiagramme einkomponentiger Systeme	219
16.4 Zustandsdiagramme zweikomponentiger flüssiger Systeme	223
16.5 Thermodynamik idealer und realer flüssiger Mischungen	228
16.6 Unvollständig mischbare Flüssigkeiten	236
16.7 Schmelzdiagramme	238
16.8 Zustandsdiagramme dreikomponentiger Systeme	243
16.9 Freie Enthalpie und Stabilität von Mischkristallen	245
16.10 Phasenumwandlungen zweiter Ordnung	248
Kapitel 17 Kolligative Eigenschaften von Lösungen	256
17.1 Dampfdruckerniedrigung	257
17.2 Siedepunkterhöhung	259
17.3 Gefrierpunkterniedrigung	262
17.4 Der osmotische Druck	265
17.5 Löslichkeit von Gasen und festen Stoffen	268
17.6 Lösungswärmen	271
17.7 Nernstsches Verteilungsgesetz	275

Kapitel 18 Elektrolyt- und Makromoleküllösungen	281
18.1 Elektrolytlösungen und ihre Leitfähigkeit	282
18.2 Die Hydratation der Ionen	288
18.3 Die Ionenwolke und der Aktivitätskoeffizient	290
18.4 Theorie der elektrolytischen Leitfähigkeit	295
18.5 Makromolekulare Lösungen	298
18.6 Diffusion und Brownsche Molekularbewegung	300
18.7 Sedimentation	303
18.8 Viskosität	305

Teil III: Thermodynamische und kinetische Behandlung chemischer Reaktionen

Kapitel 19 Thermochemie	1
19.1 Reaktionsenergie und Reaktionsenthalpie	2
19.2 Direkte und indirekte Bestimmung der Reaktionswärme	4
19.3 Standardbildungsenthalpie	7
19.4 Temperaturabhängigkeit der Reaktionsenthalpie	9
19.5 Statistische Berechnung der Reaktionsenthalpie	11
19.6 Thermochemische Bindungsenergien	12
19.7 Gitter- und Hydratationsenthalpie	14

Kapitel 20 Das chemische Gleichgewicht	20
20.1 Die freie Reaktionsenthalpie	21
20.2 Temperatur- und Druckabhängigkeit der freien Reaktionsenthalpie	22
20.3 Die Gleichgewichtskonstante	25
20.4 Statistische Berechnung der Gleichgewichtskonstante	29
20.5 Allgemeine Formulierung des chemischen Gleichgewichts	33
20.6 Säure-Basengleichgewicht	37
20.7 Das Löslichkeitsprodukt	43

Kapitel 21 Das elektrochemische Gleichgewicht	47
21.1 Die elektrochemische Zelle	47
21.2 Die EMK und das Elektrodenpotential	51
21.3 Konzentrationszellen, Diffusionspotential und Salzbrücken	57
21.4 Spezielle Elektroden und ihre Anwendung	61
21.5 Bestimmung thermodynamischer Größen aus EMK-Daten	67
21.6 Membrangleichgewicht und elektrochemisches Potential	69
21.7 Das Donnan-Gleichgewicht	74

Kapitel 22 Kinetik homogener Reaktionen	79
22.1 Phänomenologische Begriffe der chemischen Kinetik	79
22.2 Vollständige Reaktionen erster und höherer Ordnung	82
22.3 Unvollständige Reaktionen und chemische Relaxation	87
22.4 Folgereaktionen und Näherung des stationären Zustandes	92
22.5 Homogene Katalyse und Enzymreaktionen	97
22.6 Die Geschwindigkeitskonstante	100
22.7 Theorie des Übergangszustandes	103
22.8 Die Stoßtheorie	107
22.9 Theorie monomolekularer Zerfallsreaktionen	113
22.10 Theorie diffusionskontrollierter Reaktionen	118
22.11 Quantenstatistische Geschwindigkeitstheorie	120
Kapitel 23 Phasengrenzflächen und Kinetik heterogener Reaktionen	127
23.1 Die elektrische Doppelschicht	128
23.2 Elektrodenkinetik	132
23.3 Festkörperkontakte	141
23.4 Adsorption von Gasmolekülen an Festkörperoberflächen	145
23.5 Heterogene Katalyse	153
23.6 Die Oxidation von Metallen	157
23.7 Lösungsreaktionen	162
23.8 Adsorption an Flüssigkeitsoberflächen	166
Kapitel 24 Photochemie	170
24.1 Strahlungsgleichgewicht und Lebensdauer angeregter Zustände	170
24.2 Fluoreszenz und Phosphoreszenz	176
24.3 Induzierte Emission und Laser	182
24.4 Photochemische Reaktionen und Blitzlichtphotolyse	186
24.5 Photoeffekte an Halbleiterkontakten	190
Kapitel 25 Irreversible Thermodynamik	195
25.1 Kinetik und Thermodynamik	196
25.2 Die Entropieproduktion irreversibler Prozesse	200
25.3 Elektrokinetische Effekte	205
25.4 Atomistische Behandlung der Elektroosmose und des Strömungspotentials	208
25.5 Onsagerrelationen und Prinzip der minimalen Entropieproduktion	213
25.6 Nichtlineare Prozesse	215

Anhang

I.	Vektoren und Vektoroperationen	1
II.	Integrale vom Typ $\int_{x=0}^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx$	4

III.	Ersatz von Summen durch Integrale	5
IV.	Energiedichte des elektrostatischen bzw. elektromagnetischen Feldes	6
V.	Transformation des Laplaceoperators in Kugelkoordinaten	8
VI.	Zugeordnete Legendresche Polynome	10
VII.	Hermiteische Polynome	13
VIII.	Taylorreihenentwicklung	14
IX.	Determinanten und Gleichungssysteme	16
X.	Zugeordnete Laguerresche Polynome	19
XI.	Orthogonalität von Eigenfunktionen	20
XII.	Variationstheorem	21
XIII.	Fourierreihe und Fourierintegral	22
XIV.	Tunneleffekt	25
XV.	Stirlingsche Näherungsformel	29
XVI.	Lagrangesche Multiplikatoren	29

XVII.	Ermittlung des Integrals $\frac{N_a}{N} = \int_{E=E_a}^{\infty} f(E) dE$	31
-------	--	----

XVIII.	Kontinuitätsgleichung	32
XIX.	Londonsche Dispersionsenergie	33
XX.	Die Gaußsche Verteilung	37
XXI.	Poissonsche Gleichung und Debye-Hückeltheorie	40

Symbolverzeichnis	43
------------------------------------	-----------

Tabellenanhang

Basisgrößen, Einheiten, Vielfache und Definitionen des internationalen Einheitensystems (SI)	46
Abgeleitete SI-Einheiten und SI-fremde Einheiten	47
Konzentrationseinheiten und Umrechnungsfaktoren	48
Energieumrechnungsfaktoren und einige wichtige physikalische Konstanten in SI-Einheiten	49
Atomgewichte	50
Isotopentabelle	52
($G^\circ - E^\circ$)/T- und ($H_{298}^\circ - E_0^\circ$)-Daten	59
Elektrodenstandardpotentiale	61
Thermodynamische Eigenschaften eigener Substanzen	65
Thermodynamische Eigenschaften von Ionen in wäßriger Lösung	68
Charaktertafeln	70

Sachwortverzeichnis	73
--------------------------------------	-----------