

Sachregister

a

- a_1 -Orbitale 453
 ab-initio-Verfahren 423 f.
 Abkühlung, freiwillige 106
 Abkühlungskurve 142, 195
 Ableitungen 42
 – IUPAC-Richtlinien 222
 – partielle 56, 94 ff.
 Ablösearbeit 271
 Abschirmung
 – bei der NMR-Spektroskopie 554 ff.
 – Beiträge, lokale, molekulare und Solvens- 555 f.
 – der Kernladung 362 f.
 – des magnetischen Feldes durch Ringströme 558
 Abschirmungskonstante
 – effektive Kernladung 362 f.
 – Kernresonanz 553, 555
 Absolute Konfiguration, Bestimmung durch CD-Spektren 526
 Absolute Temperatur 6, 22
 Absoluter Nullpunkt 112, 158
 Absorption 467 ff.
 – Boltzmann-Verteilung der Zustände 470
 – Einstein-Koeffizienten 528 f.
 – funktioneller Gruppen 523
 – induzierte 528 f.
 – thermisches Gleichgewicht 529 f.
 – Übergangswahrscheinlichkeit bei induzierter 528 f
 Absorptionsbanden 515
 Absorptionsintensität 521
 Absorptionskoeffizient 514 f.
 – der Rotationsübergänge in NF_3 und HCl 478
 – integraler 515
 – molarer 514
 – nach Einstein, Gleichheit bei Absorption und Emission 529
 – Netto- 468
 Absorptionsspektren
 – Infrarot- 495
 – Vergleich mit CD-Spektren 526
 – Vergleich mit Emissionsspektren 468
 Absorptionsspektrometer, Aufbau 468 f.
 Absorptionsspektroskopie 467 ff.
 – Abstand, quadratisch gemittelter 700
 Achiralität 448
 Adenosin-Diphosphat 223 ff., 874 ff.
 Adenosin-Triphosphat 223 ff., 874 ff.
 Adiabate 66
 Adiabatische Entmagnetisierung 610
 – Kern- 610
 Adiabatische Expansion 66, 103 f.
 Adiabatische Prozesse 86
 Adiabatische Volumenarbeit 66
 Adiabatische Zustandsänderungen 64 f., 101
 Adiabatisches Bombenkalorimeter 55
 Adiabatisches System 21
 Adiabatisches Verbrennungskalorimeter 59
 Adiabatische Wand 21
 ADP, *siehe* Adenosin-Diphosphat
 Adsorbat 942
 Adsorbens 942
 Adsorption 942, 946 ff.
 – Geschwindigkeit 954
 Adsorptionenthalpie, isostere 950 f.
 Adsorptionisothermen 948 ff., 957 f.
 Adsorptionswahrscheinlichkeit 954
 Aerosol 710
 Aggregatzustände 144 ff., 799
 – gasförmig 19 ff.
 Akkomodation 947
 Akkumulator 922
 Aktives Zentrum 935
 Aktivierter Komplex 851, 898 ff.
 – Geschwindigkeitskonstante 900
 – Konzentration 899
 – Lebensdauer 911 ff.
 – spektroskopische Beobachtung 901 f.
 – thermodynamische Aspekte 902 ff.
 – Zerfallsgeschwindigkeit 899
 Ähnlichkeitstransformation 437
 Aktivierungsenergie 849 ff., 857
 – bei Oberflächenprozessen 953 ff.
 – Boltzmann-Verteilung 851 f.
 – einer zusammengesetzten Reaktion 861
 – heterogen-katalysierte Reaktionen 956
 – und Viskosität 806
 – und zwischenmolekulare Stöße 886 ff.
 – von diffusionskontrollierten Reaktionen 893 ff.
 Aktivierungsenthalpie 902 f.
 – des Elektronentransfers 915
 – freie 902 f.
 Aktivierungsentropie 903
 Aktivierungskontrollierte Reaktion 895
 Aktivität 198 ff., 226 f.
 – als Funktion der Molalität 202
 – biochemische 415 f.
 – in Lösung 200, 203 ff.
 – Lösungsmittel 199 f.
 – katalytische an Oberflächen 958
 – Messung 201
 – optische 448
 – von Elektroden 246
 Aktivitätskoeffizient 200 ff.
 – experimentelle Bestimmung 249
 – in Elektrolytlösungen 249
 – mittlerer 204 ff.
 – und chemisches Gleichgewicht 228 ff.
 – von Ionen 810
 Alanin, L- 448
 Ammoniakmolekül, Symmetrieelemente 460
 Ammoniaksynthese 228
 – Druckabhängigkeit 234
 – Gleichgewichtskonstante 228
 – Temperaturabhängigkeit 237
 Ampere 11
 Amplitude 276 f., 296
 Anfangsgeschwindigkeiten, Methode der 839
 Angeregte Zustände 513 ff., 866 ff.
 Anharmonizität 488 f.
 – bei Schwingungsspektren mehratomiger Moleküle 495
 – bei Rotationsschwingungsspektren 491
 Anharmonizitätskonstante 488 f.
 Anisotropie
 – der Polarisierbarkeit 481 f.
 – magnetische 556 ff.
 Anode 241
 Anomale Röntgenstreuung, *siehe* Röntgenstreuung, anomale
 Anti-Stokes-Linien 482 f.
 Anti-Stokes-Raman-Spektroskopie, kohärente (CARS) 499
 Anti-Stokes-Streuung 468
 Antiferromagnetismus 773
 Antiparallelität des Kernspins 562, 564 ff.
 Äquivalenz, chemische und magnetische in der Kernresonanzspektroskopie 565 f.
 Arbeit 46 ff., 97 ff.
 – Ablöse- 291
 – als koordinierte Bewegung 47

- Arten von 51
 - bei gasbildenden Reaktionen 54
 - bei der Oberflächenspannung 682 f.
 - elektrische 121, 123, 166, 241 ff.
 - maximale 118 f.
 - nichtmechanische oder zusätzliche 51
 - Nichtvolumen- 120 f.
 - Volumen- 50 ff.
 - Wegabhängigkeit 76 f.
 - Arbeitsfunktion 118
 - Argonionenlaser 538
 - Aromatische Stabilität 421
 - aromatische Verbindungen, Ringstrom 558
 - Arrheniusgleichung 849 ff.
 - Arrheniusparameter 849 f., 903
 - Gasphasenreaktionen 890
 - Reaktionen in Lösung 894
 - Assoziiertes Laguerre-Polynom 345 f.
 - Assoziiertes Legendre-Polynom 326 f.
 - Asymmetriespannung 252
 - Atmosphäre
 - Druckeinheit 13, 20
 - Atome
 - im Grundzustand 347 f.
 - Konfiguration 358 f.
 - wasserstoffähnliche 341 ff.
 - Atombau 341 ff.
 - Atomkerne
 - Energie im Magnetfeld 549 f.
 - in der NMR-Spektroskopie 550
 - Atommassen, Einfluss auf
 - Trägheitsmoment 471 f.
 - Atomorbitale 347 ff.
 - Energieniveaus 348
 - Atomrumpf 363
 - Atomspektren 269, 341 ff.
 - Feinstruktur 376
 - Spin-Bahn-Kopplungskonstante 376
 - Atomspektroskopie, Termsymbole 376 f.
 - Atomstruktur 341 ff.
 - ATP, *siehe* Adenosin-Triphosphat
 - attraktive Hyperfläche 910
 - Aufbauprinzip 363 f.
 - Auflösung
 - Elektronenmikroskopie 273
 - Aufspannen, einer irreduziblen
 - Darstellung 454
 - Augerelektronen 944
 - Augerelektronenspektroskopie 944
 - Auslöschungen
 - systematische 746
 - Aussalzeffekt 219
 - Ausschlussregel, Raman und IR 498 f.
 - äußeres Potenzial, *siehe* Volta-Potenzial
 - Austausch
 - -Korrelationsenergie 425
 - -Korrelationspotenzial 425
 - Austauschprozesse
 - chemische 568
 - Kernresonanzspektroskopie 567 f.
 - Austauschstromdichte 919 f.
 - Auswahlregeln
 - allgemeine 469
 - aufgrund der Drehimpulserhaltung 380
 - aufgrund von
 - Symmetriebetrachtungen 461
 - bei der Rotations-Ramanspektroskopie 481
 - bei Rotationsübergängen 478 f.
 - für Atomspektren 356, 376
 - für Elektronenspektren 518
 - für Molekülspektren 469
 - für Schwingungsübergänge 486 f.
 - Herleitung 462
 - in der Rotationsspektroskopie 505 ff.
 - in der Schwingungsspektroskopie 505 ff.
 - Laporte-Auswahlregel für
 - zentrosymmetrische Moleküle 518 f.
 - spektroskopische Übergänge 356
 - spezielle 469 f.
 - und Übergangsmomente 469
- Autokatalyse 967
- Autoprotolyse 848
- Avogadro-Prinzip 23 ff.
- Avogadro-Konstante 124, 772, 793, 887
- Axilrod-Teller-Formel 675
- Azeotrop 188 f.
- Azimut 325
- b**
- Bahndrehimpuls 327 ff.
 - Balmer-Serie 341
 - Banden, parallele und senkrechte 495
 - Bandenkopf 522
 - Bandenspektren, *siehe*
 - Rotationsschwingungsspektren
 - Bändermodell 762 ff.
 - Besetzung der Orbitale 764
 - Bandlücke 763
 - Bar 20
 - Barometer 20
 - Basenkatalyse 934
 - Basenpaare 708 f.
 - Basis, einer Darstellung 450 f., 460
 - Basiseinheiten 11
 - Basissatz 411
 - Bedeckungsgrad 946
 - Belastung 759
 - Benzol 421 f.
 - Symmetrieelemente 440 ff.
 - Benzolradikalanion,
 - Elektronenspinresonanzspektrum 583
 - Berthelot-Gleichung 34
 - Besetzungsinversion, *siehe* Besetzungszahlen,
 - inverse
 - Besetzungszahlen 596 f.
 - bei chemischen Reaktionen 231 ff.
 - Einfluss auf Rotations- und
 - Schwingungsspektren 467 ff.
 - harmonischer Oszillator 601
 - inverse, beim Laser 533 ff.
 - wahrscheinlichste 599
 - BET-Isotherme 951 f., 962 f.
 - Betrag oder Absolutwert einer komplexen
 - Zahl 301
 - Betragsquadrat der Wellenfunktion 276 f.
 - Beugung 740 f.
 - energiearmer Elektronen 944 f.
 - von Röntgenstrahlen 740 f.
 - Beugungsexperimente 272, 740 f.
 - Beugungsgitter 503
 - Beugungsmethoden
 - an Kristallen 735 ff.
 - an Pulvern 741 f.
 - Debye-Scherrer-Verfahren 741 f.
 - Elektronenbeugung 749 f.
 - Indizierung der Reflexe 739, 742
 - Neutronenbeugung 749 f.
 - Phasenproblem 747
 - systematische Auslöschungen 746
- Beugungsmuster 740
- Beweglichkeit
 - eines Ions 807 f.
 - eines Teilchens auf einer Oberfläche 955 f.
- Bewegung
 - eindimensionale ungeordnete 821 f.
 - geordnete 98
 - thermische 47
 - ungeordnete 47
 - zufällige 47, 98
- Bildungsenthalpie 70, 73 ff.
 - anorganischer Verbindungen 73
 - mittlere 74
 - organischer Verbindungen 70
 - und Molecular Modeling 74
 - von Ionen 123, 249 f.
- Bildungsgeschwindigkeit 835 f.
- bimolekulare Reaktion 852 f.
- Binäre Mischung, chemisches Potenzial 163
- Binäres System, Siedediagramm 188 f.
- Bindung
 - σ - 393 f.
 - π - 394 f.
 - Doppel- 397
 - Dreifach- 397
 - ionische 391 ff.
 - kovalente 391 ff.
 - Kraftkonstante 316
 - polare 409
 - Bindungs-Bildungsenthalpie 420
 - Bindungsdissoziationsenergie 392, 407
 - Bindungsenergie, von Butadien 420
 - Bindungsenthalpie 407
 - Bindungslängen 407
 - aus Rotationsspektren 472 ff.
 - Bindungsordnung 407
 - Bindungsstärke, relative 407
 - Bindungswinkel
 - aus Rotationsspektren 472 ff.
 - Einfluss auf die Kopplungskonstante 563
 - Binnendruck 78
 - Biologische Prozesse 223 ff.
 - biologischer Standardzustand 202
 - Biosynthese, energetische Aspekte 223 ff.
 - Birge-Sponer-Extrapolation 489 f.
 - Blase 683
 - Bleiakкумуляtor 922
 - Blitzlichtphotolyse 832
 - bohrsche Frequenzbedingung 269, 329, 342
 - bohrscher Radius 345
 - bohrsches Magneton 548
 - Bolometer 692
 - Boltzmanngleichung 102, 608, 618
 - Boltzmannkonstante 8, 102, 266, 797
 - Boltzmannverteilung 598 f., 616 f.
 - bei Absorption und Emission 530
 - bei chemischen Reaktionen 231
 - bei der Kernresonanz 552, 571
 - für Rotationsniveaus 480
 - für Schwingungszustände 492
 - statistische Herleitung 598 f.
 - Temperatureinfluss 236
 - und Aktivierungsenergie 851 f.
 - und die Gleichgewichtskonstante 231, 647
- Bombenkalorimeter 55

- Born-Haber-Kreisprozess 755
 Born-Mayer-Gleichung 755
 Born-Oppenheimer-Näherung 4392 f.
 bornsche Gleichung, und Freie
 Reaktionsenthalpien 123
 bornsche Interpretation der
 Wellenfunktion 276 f.
 Borsäuremolekül, Symmetrieelemente 444
 Bortrifluoridmolekül,
 Symmetrieelemente 444
 Bosonen 332, 360
 – bei der Raman-Rotationsspektroskopie 483
 Boyle-Temperatur 31
 Boyle, Gesetz von 23 ff.
 Brackett-Serie 342
 braggischer Winkel, *siehe* Glanzwinkel
 braggisches Gesetz 742 ff.
 – Herleitung 742 f.
 Bravais-Gitter 737
 Brechungsindex 770
 Breite 325
 Bremsstrahlung 741
 Brennstoffzellen 922 f.
 Buckminsterfulleren,
 Symmetrieelemente 446
 Butadien, LCAO-Orbitale 419
 Butler-Volmer-Gleichung 919 f., 924 f.
- c**
- β -Carotin 498 f., 874
 Calcit, Umwandlung in Aragonit 59
 Campher, Dipolmoment und
 Polarisierbarkeit 665
 Candela, Einheit 11
 Carbonylgruppe, als Chromophor 523, 525
 Carnot-Prozess 103 ff.
 Carnot-Wirkungsgrad 104 f.
 CARS, *siehe* Anti-Stokes-Raman-Spektroskopie
 Cäsiumchloridstruktur 753
 CD, *siehe* Zirkulardichroismus
 CD-Player 777
 CD-Spektrum 526
 Celsiusskala 6
 Charaktere 449 f.
 – als Summen der Diagonalelemente einer
 Matrix 451
 – zur Beschreibung der Symmetrie 454
 Charaktertafel 449 ff.
 – am Beispiel des Wassermoleküls 476
 – Aufbau 452 f.
 – der Punktgruppe C_{2v} 449 f.
 – der Punktgruppe C_{3v} 452 f.
 – der Punktgruppe T_d 462
 – und Matrizen 449 ff.
 – und Orbitalentartung 453 f.
 Charge-Coupled Device 505
 Charge-Transfer-Übergänge *siehe auch*
 Übergänge 524 f.
 Chemische Bindung, *siehe* Bindung
 Chemische Reaktionen, *siehe* Reaktionen
 chemische Umgebung, bei der
 Kernresonanz 553
 chemische Verschiebung 553 ff.
 – Abhängigkeit vom Spektrometertyp 554
 – Buchstabencodierung 559
 – üblicher Kerne 554
 chemisches Gleichgewicht 221 ff.
 – in der statistischen Thermodynamik 644 ff.
- chemisches Potenzial 143 ff.
 – Abhängigkeit von der Aktivität 200 ff.
 – Ableitung nach dem Ort 814
 – bei Reaktionen 222
 – Druckabhängigkeit 150 f.
 – einer Mischung 166 f., 175 f.
 – einer realen Lösung 200 f.
 – eines reinen Stoffes 166
 – idealer Mischungen 171
 – in Lösungen 181, 204
 – Phasengleichgewicht 171
 – Standardwert 169
 – Temperaturabhängigkeit 150
 – von Lösungen 178 f.
 chemisches Standardpotenzial 178
 Chemisorption 947
 – ausgewählter Teilchen 959
 Chinone 427
 Chinolinmolekül, Symmetrieelemente 442
 Chiralität, eines Moleküls 448 f.
 Chlorophyll, Absorptionsspektrum 514
 Chlorwasserstoff,
 Rotationszustandssumme 628 f.
 cholesterische Phase 197
 Chromophor 523 ff.
 – Carbonylgruppe 523, 525
 – Kohlenstoff-Kohlenstoff-
 Doppelbindung 525
 Clapeyron-Gleichung 153 f.
 Clausius-Clapeyron-Gleichung 155
 Clausius-Mossotti-Gleichung 664
 clausiusche Ungleichung 106, 117, 119, 125
 Clebsch-Gordan-Reihe 377 f.
 CMC, *siehe* kritische Micellenkonzentration
 CNDO (komplette Vernachlässigung
 differenzieller Überlappung) 424
 Computer, Quantenchemie mit 422 ff.
 Corey-Pauling-Regeln 706
 COSY, *siehe* Kernresonanzspektroskopie,
 korrelierte
 Coulomb-Energie 132
 Coulombintegral 411
 Coulomboperator 428
 Coulomb-Potenzial 132
 – abgeschirmtes 208
 – Elektron-Kern-Anziehung 342 ff.
 Cracken 961
 Curiegesetz 772 f.
 Curie-Temperatur 773
- d**
- δ -Skala, in der Kernresonanz 553 f.
 Dalton, Gesetz von 27
 Dampf, übersättigter 690
 Dampfdruck 32, 144
 – Druckabhängigkeit 151
 – Erniedrigung 178
 – Knudsenmethode 801
 – partieller 171 f.
 – Temperaturabhängigkeit 156
 – von Metallen, Bestimmung 801
 Dampfdruckdiagramme 185 f.
 Dampfdruckkurve 156
 Daniell-Element 241, 245
 Darstellung
 – Basis 449 ff.
 – dreidimensionale 450
 – eindimensionale 451
- irreduzible 451 ff.
 – totalsymmetrische 454 f., 456 f., 461
 – von Symmetrieelementen 450 f.
 – zweidimensionale 451
 Davydovaufspaltung 768
 Davisson-Germer-Experiment 272
 d-d-Übergänge, *siehe auch* Übergänge 518,
 523 f.
 de-Broglie-Relation 272 f., 275 f., 322
 de-Broglie-Wellenlänge 272 f.
 – thermische 604
 Debye 741
 Debye, Einheit 658
 Debye-Gleichung 664
 – der Wärmekapazität 268
 Debye-Hückel-Grenzgesetz 205 f., 246
 Debye-Hückel-Onsager-Koeffizienten 811
 Debye-Hückel-Onsager-Theorie 811
 Debye-Hückel-Theorie 205
 – erweiterte 206 f.
 Debyetemperatur 268
 Debye-Länge 208
 debyesches T^3 -Gesetz 112 f.
 Deformation 760
 Deformationsschwingungen, bei
 mehratomigen Molekülen 494 f.
 Dehnung 759
 Dehydratation 812
 Delokalisierungsenergie 420 f.
 Denaturierung 698, 708
 Depolarisationsgrad, von Spektrallinien 498
 Desaktivierung elektronisch angeregter
 Zustände 528 ff., 868
 – Dissoziation 533
 – innere Umwandlung 533
 – Prädissoziation 533
 – strahlende und strahlungslose 528
 – thermische Dissipation 528
 Desorption 942
 – Geschwindigkeit 954 f.
 Desorptionsspektrum 955
 Destillation 188 f.
 – begrenzt mischbarer Flüssigkeiten 193
 – nicht mischbarer Flüssigkeiten 190
 Detektoren, Absorptionsspektrometer 504 f.
 Detergenzien 713
 Determinante 412, 361, 390
 Deuterium, Ionisierungsenergie und
 Emissionsspektrum 349
 Deuteriumlampe 502
 Diagonalmatrix 435
 Diagonalpeak, im NMR-Spektrum 579 f.
 Dialyse, zur Reinigung von Kolloiden 710
 diamagnetischer Beitrag, Abschirmung in der
 NMR-Spektroskopie 555
 Diamagnetismus 771
 Diamantstruktur 756
 Diaphragmamethode 819 f.
 diathermische Wand 21, 46
 diathermisches System 46
trans-(1,2)-Dichlorethenmolekül,
 Symmetrieelemente 444
 Dichte, optische, *siehe* Absorption
 Dichtefunktionaltheorie (DFT) 425
 Diederenebene 440 f.
 Dielektrikum 662

- Dielektrizitätskonstante 208, 664
 – des Vakuums 132
 – relative 123, 132, 664
 – und Brechungsindex 665 f.
 Dieterici-Gleichung 34
 Differenzialgleichungen 339 f.
 Differenzial 76 f., 94 f.
 – nichttotales 76 f.
 – totales oder exaktes 76 f., 94 f.
 Differenzialkalorimeter, dynamisches (DSC) 59, 63 f.
 Differenziation 339
 Differentieller Streuquerschnitt 680
 Diffraktometer 742
 Diffuse Doppelschicht 918
 Diffusion 791, 813 ff.
 – auf Oberflächen 955 f.
 – idealer Gase 802
 – in Flüssigkeiten 814 ff.
 – statistische Betrachtung 821 f.
 – und Konvektion 818 f.
 – und Reaktion 895
 – zurückgelegte Strecke 820
 Diffusionsgeschwindigkeit 823
 Diffusionsgleichung 817 ff.
 – Lösungen 819 f.
 – radiale 895
 – verallgemeinerte 819
 Diffusionskoeffizient 808, 815 ff., 822 ff.
 – Messung 819 f.
 diffusionskontrollierte Reaktionen 893 ff.
 Diffusionspotenzial 241 f.
 Diffusionsspannung, *siehe* Diffusionspotenzial
 Diffusionswahrscheinlichkeiten 820 f.
 N,N-Dimethylnitrosamin, Lebensdauerverbreiterung im NMR-Spektrum 567
 Dipol 668
 – Bedeutung für Auswahlregeln 469 f.
 – elektrischer 658
 – elektrisches Feld 669
 – induzierter 671 f.
 – oszillierender 478
 – schwingender 469
 Dipol-Dipol-Wechselwirkung 667 f., 791
 – im ESR-Spektrum 587
 – potentielle Energie 667
 Dipolmechanismus, bei der Spin-Spin-Kopplung 564
 Dipolmoment 447 f., 657 f.
 – als Vektorsumme 658 f.
 – aus Elektronegativitätsdifferenz 658
 – aus Mikrowellenspektroskopie 505
 – Auswahlregeln für Rotationsübergänge 478
 – Auswahlregeln für Schwingungsübergänge 486 f.
 – bei Ladungsumverteilung 469
 – bei verschiedenen Punktgruppen 448
 – Berechnung aus Partialladungen 659
 – Bestimmung 665
 – elektrisches 657 f.
 – induziertes 481, 658, 660
 – Operator 469
 – permanentes 658
 – permanentes bei Rotationsübergängen 505
 – temporäres 501
 – thermisch gemitteltes 662
 – und C_n -Achse 448
 – und Symmetrie 658
 Dipolmomentdichte, *siehe* Polarisation von Flüssigkeiten
 Dipolübergänge, elektronische 462
 dipolverboten 469
 Direkte Methode, in der Röntgenbeugung 748
 Direkter Reaktionsablauf 911
 Disauerstoff, *siehe* Sauerstoffmolekül
 Dispersionselement, im Spektrometer 503
 Dispersionswechselwirkung 671 f.
 Disproportionierung 864
 Dissipation 98 f.
 Dissoziationsgrad 229
 Dissoziation
 – Einfluss auf Wärmekapazität 638
 – elektronisch angeregter Zustände 533
 – von Molekülen 488 f., 638
 – von Molekülen, statistische Betrachtung 646
 Dissoziationsenergie
 – eines Moleküls 488
 – elektronisch angeregter Moleküle 519
 Dissoziationsgleichgewicht 646
 Dissoziationsgrad 229 f., 234
 Dissoziationsgrenze 485, 489, 533
 Disulfidbrücken 708
 DLVO-Theorie 712
 DNA 757 f.
 d-Orbitale 355 f.
 – Beitrag zu Molekülorbitalen 398
 – Beitrag zur Bindung 459
 – Einhüllende 356
 – Elektronenübergänge 523
 Donor-Akzeptor-Paare 872
 Doppelbindung 397
 – Kohlenstoff-Kohlenstoff-Doppelbindung als Chromophor 524 f.
 Doppelschicht
 – diffuse 918
 – elektrische 711 ff., 917
 Dopplereffekt
 – bei Spektrallinien 369
 – in Gasen 370
 Dopplerverbreiterung 369 f.
 Dotieratome 765
 Dotierung 765
 Drehachse, *siehe* Rotationsachse
 Drehimpuls 321 f., 328 f.
 – des Elektrons 347, 374
 – Quantelung 324, 229 f.
 – Quantenzahlen 332
 – Vektormodell 230 f., 549
 Drehimpulserhaltung, Einfluss auf Auswahlregeln für Rotationsübergänge 479
 Drehmoment 295
 Drehspiegelachse 441
 Drehspiegelung 441
 Dreidimensionale Rotationsgruppe, *siehe* Punktgruppen
 Dreifachbindung 397
 Dreikörperwechselwirkungen 675
 Dreiniveaulaser 534
 Driftgeschwindigkeit 807 f.
 – bei der Sedimentation 723
 – von Ionen 807 f.
 Dritter Hauptsatz 113 f.
 Druck 20 f.
 – Beobachtung der Reaktionskinetik 832
 – Berechnung aus der Zustandssumme 626
 – einer Flüssigkeitssäule 21
 – Einheiten 20
 – kinetische Gastheorie 792 f.
 – kinetischer 643
 – kritischer 32, 144
 – -messung 20 f.
 – osmotischer 182
 – Standard- 20
 Druck, effektiver, *siehe* Fugazität
 Druckabhängigkeit, Gaselektrode 241
 Druckmessung, Manometer 21
 Drucksprungmethoden 847
 Dublett, Kernresonanzspektrum 560 ff.
 Dubletterm 378
 Dulong-Petit-Regel 267
 Durchdringung 362 f.
 Durchlässigkeit, *siehe* Transmission
 Durchtrittsfaktor 919
 Dynamik 697 ff.
 – zustandsaufgelöste 906
 dynamische Lichtstreuung 720
- e**
 ebullioskopische Konstante 180
 Echtzeitanalyse 833
 Ecken 942
 EELS, *siehe* Elektronen-Energieverlustspektroskopie
 Effekt
 – elektrophoretischer 811
 – nichtlinearer optischer 769 f.
 – optischer 767 f.
 – photoelektrischer 271
 effektive Kernladung 362 f.
 effektive transversale Relaxationszeit 573
 effektiver Druck, *siehe* Fugazität
 Effizienz, katalytische 937 f.
 Effusion 791
 Effusionsgeschwindigkeit 801
 e_g -Orbitale 523
 Eigenfunktion 281 ff.
 Eigenschaften
 – elektrische 657
 – molekulare 425
 Eigenvektor 436
 Eigenwert 281 ff., 436
 Eigenwertgleichung 282, 436
 Einfangen, optisches 610
 Einheiten 11 ff.
 Einheitsmatrix 435
 Einheitsvektor 389
 Einhüllende 351
 Einkomponentensystem, Phasendiagramm 146 f.
 Einkristalle, Röntgenbeugung 741 ff.
 Einsalzeffekt 219
 Einsteingleichung 815 f.
 Einsteingleichung der Wärmekapazität 268
 Einsteinkoeffizient 528 ff.
 Einstein-Smoluchowski-Gleichung 821 f.
 Einstein-Temperatur 268

- Eis
 – Phasendiagramm des Wassers 147 f.
 – Struktur 644
- Elastomer 703
 – ideales 701
- elektrische Arbeit 121, 123, 166, 241 ff.
 elektrische Dipolübergänge 462
 elektrische Doppelschicht 711 ff., 917
 elektrische Leitfähigkeit
 – von Festkörpern 762 ff.
 – von Gasen 791 f.
- Elektrischer Dipol, *siehe* Dipol, elektrischer
 elektrisches Dipolmoment, *siehe*
 Dipolmoment, elektrisches
 elektrisches Feld 10 f., 264
 elektrisches Übergangsdipolmoment, *siehe*
 Übergangsdipolmoment
- Elektrochemie
 – dynamische 918
 – im Gleichgewicht 239
 elektrochemische Spannungsreihe 248 ff.
 elektrochemische Zellen 239 ff.
 Elektroden 239 ff.
 – Aktivitätskoeffizient 246, 249
 – gaselektive 251 f.
 – Glas- 251
 – ionenselektive 251 f.
 – selektive 251
 – Standard-Wasserstoff- 246 f.
 – Überspannung 919
 – zur pH-Wert-Bestimmung 251
 Elektroden-Konzentrationszelle 241
 Elektrodenprozesse 917 ff.
 Elektrodenreaktionen 240 f.
 Elektrodialyse 710
 elektrokinetisches Potenzial 711
 Elektrolyse 920 f.
 Elektrolyte 239
 elektrolytische Zelle 239
 Elektrolytlösungen 205 f.
 – Leitfähigkeit 806 f.
 Elektrolyt-Konzentrationszelle 241
 elektromagnetische Strahlung 10, 502
 elektromagnetisches Spektrum, *siehe* auch
 Spektrum 264
 elektromotorische Kraft (EMK), *siehe*
 Gleichgewichtszellspannung
 Elektronegativität, nach Pauling und
 Mulliken 410
 Elektron-Elektron-
 Wechselwirkungsterme 368
- Elektronen
 – beschleunigte 750
 – Beschleunigung auf einer Kreisbahn 503
 – Drehimpuls 347
 – Energie im Magnetfeld 548 f.
 – g-Faktor 548
 – gyromagnetisches Verhältnis 548
 – magnetisches Moment 548
 – Tunneleffekt 312
 – ungepaarte, ESR-Spektroskopie 583, 586 ff.
 – wahrscheinlichste Abstände zum Kern 353
 Elektronen-Donor-Akzeptor-Komplex 916
 Elektronenaffinität 367
 Elektronenakzeptor 240
 Elektronenanlagerung,
 Standardenthalpie 367
 Elektronenbeugung 749 f.
 Elektronendichte 425 f.
 – aus Beugungsdaten 747
 – Einfluss auf Streufaktor 744
 – in einer Elementarzelle 744 ff.
 – Lamb-Formel 556
 – Patterson-Synthese 748
 Elektronendonator 240
 Elektronenkonfiguration, Promotion 395
 Elektronenmikroskopie 273 f.
 – Raster- (SEM) 274
 – Transmissions- (TEM) 273
 Elektronenpaar, Bindung 391 ff.
 Elektronenspektren *siehe* auch Spektrum,
 elektronisches 515 f.
 Elektronenspektroskopie
 – Auger- 944
 – Auswahlregeln 518
 – Rotationsstruktur 522
 – Schwingungsstruktur 519
 Elektronenspin 331, 374 f.
 – Energie im Magnetfeld 563
 Elektronenspinresonanzspektrometer 583
 Elektronenspinresonanzspektroskopie 551,
 583 ff.
 – am Benzol-Radikalanion 583
 – Dipol-Dipol-Wechselwirkung 587
 – Einfluss des Kernspins 585
 – g-Faktor 584
 – Hyperfeinkopplungskonstante 585 ff.
 – Hyperfeinstruktur 585 ff.
 – McConnell-Gleichung 586
 – Polarisationsmechanismus 587
 – Spindichte 586
 Elektronenspinresonanzspektrum 583 ff.
 Elektronentransferreaktion 912 ff., 924
 – Geschwindigkeit 912 f.
 – theoretische Beschreibung 914 f.
 Elektronenübergänge 380, 513 ff.
 Elektronenvolt 12 f.
 Elektronisch angeregte Zustände 633 f.
 elektronische Polarisierbarkeit, *siehe*
 Polarisierbarkeit, elektronische
 elektronische Übergänge, *siehe* Übergänge,
 elektronische
 elektronische Zustandssumme, *siehe*
 Zustandssumme, elektronische
 elektronischer Energietransfer
 – Singulett-Singulett 867
 – Triplett-Triplett 867
 Elektrophoretischer Effekt 811
 Elementarreaktionen 852 ff.
 – aufeinanderfolgende 854 f.
 – bimolekulare 852
 – unimolekulare 852
 Elementarteilchen 332
 Elementarzellen 735 ff.
 – Berechnung der Elektronendichte 747
 – flächenzentrierte 737 f.
 – kubische 736 f.
 – monokline 736 f.
 – trikline 736 f.
 – nichtprimitive 737
 – primitive 736 f.
 – raumzentrierte 737 f.
 – seitenzentrierte 737 f.
 – von dichten Kugelpackungen 750
 Eley-Rideal-Mechanismus 958
 Emission 467 ff.
 – Boltzman-Verteilung der Zustände 530
 – induzierte 529, 867
 – induzierte, bei Lasern 533 f.
 – Einsteinkoeffizienten 529
 – spontane 529
 – thermisches Gleichgewicht 529
 Emission, stimulierte, *siehe* Emission,
 induzierte
 Emissionskoeffizienten, nach Einstein 529
 – Gleichheit bei Absorption und
 Emission 529
 Emissionsspektroskopie 468 ff.
 Emulgator 710
 Emulsion 710
 Enantiomere 448
 endergonische Reaktionen 222 f.
 endotherme Prozesse 46
 Endpunkt, *siehe* Äquivalenzpunkt
 Energie 6 f., 46
 – der Rotation, mittlere 635
 – der Schwingung, mittlere 636
 – der Translation, mittlere 635
 – der Wechselwirkung zwischen
 Multipolen 668
 – Dissipation der 98 f.
 – effektive potenzielle 344
 – eines magnetischen Moments 548
 – Einheiten 12
 – Gleichverteilungssatz 9 f.
 – innere 48 ff., 77 ff., 605 ff.
 – kinetische 6, 271, 350
 – kinetische, Bezug zur
 Wellenfunktion 271 ff.
 – mittlere, eines Freiheitsgrads 635 f.
 – potenzielle 6, 350
 – potenzielle, harmonischer Oszillator 315 f.
 – potenzielle, Teilchen im Kasten 304 ff.
 – potenzielle, Wasserstoffatom 344
 – und Frequenz elektromagnetischer
 Strahlung 513
 – Virialtheorem 321
 – von Photoelektronen 271
 – wahrscheinliche des Systems 612
 Energiepooling 867
 Energieeinheiten 12
 Energieerhaltung 45 ff.
 Energiefluss 802
 Energieniveaus 316 f.
 – Atomorbitale 348
 – bei der Rotation 327 ff., 474 ff.
 – bei Schwingungen 316 f., 488
 – bei elektronischen Übergängen 532
 – des Kernspins 559 f.
 – des Wasserstoffatoms 348 f.
 – Entartung 310
 – Teilchen im Kasten 305
 Energiespeicher im Körper 71 f.
 Energieübertragung
 – durch Wärme 46
 – zwischen zwei Pendeln 547
 Energieumwandlung in lebenden Zellen 223
 Ensemble, kanonisches 610 ff.
 Entartung 310
 – Rotationszustände 477 ff.
 – Rotationszustände polarer Moleküle,
 Aufhebung 477

- Starkeffekt 477
- von Orbitalen, Bestimmung aus Charaktertafeln 453 f.
- Entartungsgrad, des elektronischen Grundzustands 633, 646
- Enthalpie 57 f.
- Aktivierungs- 903
- Berechnung aus der Zustandssumme 626 f.
- chemischer Reaktionen 69 f.
- der Chemisorption 947
- der Physisorption 947
- Druckabhängigkeit 81
- Formel Schreibweisen nach IUPAC 68
- ideales Gas 60, 627
- Temperaturabhängigkeit 62, 75, 81
- Entkopplung, in der NMR-Spektroskopie 577
- Entmagnetisierung, adiabatische 610
- Entmischung 190 f.
- Entmischungstemperatur, *siehe* Mischungstemperatur, kritische
- Entropie 99 ff.
- Aktivierungs- 903
- als Zustandsfunktion 103
- am absoluten Nullpunkt 112
- bei Phasenübergängen 153 ff.
- bei tiefen Temperaturen 112 f.
- Berechnung 112
- Berechnung aus der Zustandssumme 613
- Boltzmann-Gleichung 608
- eines einatomigen Gases 614
- eines Zweiniveausystems 609
- Messung 111 f.
- mikroskopische Interpretation 102
- nach dem dritten Hauptsatz 114
- statistische Definition 102, 607 f.
- statistisches Knäuel 701
- Temperaturabhängigkeit 110
- thermodynamische Definition 100
- von Ionen in Lösung 115
- Entropieänderung 107 ff.
- beim Phasenübergang 108, 153 ff.
- Berechnung 101 f.
- der Umgebung 101
- Erhitzen 110
- Expansion 100, 108
- Kompression 103
- Entschirmung 554
- durch Ringströme 558
- Enzyme 933, 935 ff.
- katalytische Effizienz 938
- Enzymhemmung 939
- Erdbeschleunigung 20
- Erde, Oberflächentemperatur 496 f.
- Erdöl 960 f.
- Erstarrungstemperatur 144
- Erster Hauptsatz 45 ff.
- Verbindung mit Zweitem Hauptsatz 124
- erstes Ficksches Gesetz, *siehe* Ficksches Gesetz der Diffusion
- Erwärmung, globale 496 f.
- Erwartungswert 287 f.
- Berechnung 298
- ESCA, *siehe* Photoelektronenspektroskopie für die chemische Analyse
- ESR, *siehe* Elektronenspinresonanz
- essentielle Symmetrieelemente, *siehe* Symmetrieelemente, essentielle
- Ethanmolekül, Symmetrieelemente 445
- Ethanol, ¹H-NMR-Spektrum 555
- Ethen
 - Hückelnäherung und LCAO-Orbitale 416 f.
 - Symmetrieelemente 444
- Ethin
 - Symmetrieelemente 444
 - VB-Beschreibung 397
- eulersche Kettenregel 94
- Eutektikum 194 f.
- eutektische Mischung 194
- Exciplexlaser 539
- Exciton 767
- Excitonabsorption 767 f.
- Excitonbanden 768
- exergonische Reaktionen 222 f.
- exotherme Prozesse 46
- Expansion
 - adiabatische 65 f., 103 f.
 - freie 52
 - gegen konstanten Außendruck 52
 - ideales Gas 80, 108
 - im Carnot-Prozess 103
 - ins Vakuum 79
 - isenthalpische 82 f.
 - isotherme, Entropieänderung 100, 108
 - isotherme, reversible 53
 - reversible 52, 104
- Expansionskoeffizient, *siehe* thermischer Ausdehnungskoeffizient
- Experimente, kinetische 833
- Extinktion, *siehe* Absorption
- Extinktionskoeffizient, *siehe* Absorptionskoeffizient
- Exzess
 - -enthalpie 176
 - -entropie 176
 - -funktionen 176
 - -volumen 176
- Eyring-Gleichung 898 ff., 900
- f**
 - f*-Funktion, *siehe* Mayersche *f*-Funktion
 - ¹⁹F-Kerne, Kernresonanzspektroskopie 551, 565
 - Faktorisierung 603
 - Fakultät 279
 - Faltblattstruktur 707
 - Faraday-Konstante 201, 243, 809, 919, 925
 - Farbe
 - durch Chromophore 522 f.
 - elektromagnetischer Strahlung 10, 264 ff., 356, 525
 - Farbstofflaser 539, 834
 - Faser 532, 757 ff., 923
 - Fehlerfunktion 298, 336
 - Fehlstellen 946 ff.
 - Feinstruktur
 - im Kernresonanzspektrum 559 ff.
 - von Atomspektren 373 ff.
 - Feld
 - elektrisches 11, 264, 809
 - elektromagnetisches 264 ff., 357
 - Magnet- 264, 273, 330, 375
 - Feldionenmikroskopie (FIM) 956
 - FEMO, *siehe* Molekülorbitale freier Elektronen
 - Femtosekundenspektroskopie 902 f., 931
 - Fermi-Dirac-Verteilung 762 f.
 - Fermienergie 764
 - Fermi-Kante, *siehe* Fermi-Niveau
 - Fermi-Kontaktwechselwirkung, *siehe* Kontaktwechselwirkung
 - Ferminiveau 764
 - Fermionen 332, 360
 - Wasserstoffkerne bei der Raman-Rotationsspektroskopie 484
 - Fernfeld-Konfokalmikroskopie 532
 - Fernordnung 641, 703
 - Ferrocen, Symmetrieelemente 447
 - Ferromagnetismus 771 ff.
 - Festkörper 735
 - Bändermodell 768
 - Eigenschaften 759 ff.
 - ionische 752
 - Kernresonanzspektroskopie 581 f.
 - kovalente 756
 - metallische 750
 - molekulare 756
 - Festkörperlaser 776
 - Ficksches Gesetz der Diffusion
 - erstes 802, 855
 - zweites 817
 - FID, *siehe* Induktion, frei abklingende
 - FIM, *siehe* Feldionenmikroskopie
 - flächenzentrierte Elementarzellen, *siehe* Elementarzellen, flächenzentrierte
 - Flockung 701 f.
 - Flugzeit, eines Ions im Massenspektrometer 719
 - Fluide
 - Supra- 156
 - überkritische 148
 - Fluoreszenz 528 ff., 833 f.
 - Franck-Condon-Prinzip 531
 - laserinduzierte 901
 - Löschen 531
 - Vergleich mit Absorption 530
 - Fluoreszenzlebensdauer 834, 869 ff.
 - Fluoreszenzmikroskopie 532
 - Fluoreszenz-Resonanzenergietransfer (FRET) 873
 - Fluoreszenzspektrum 531
 - Fluormolekül,
 - MO-Energieniveaudiagramm 406
 - Fluss 772
 - Flussdichte, magnetische 548
 - Flüssigkeiten 679 ff.
 - begrenzt mischbare 193
 - Diffusion 715, 813 ff.
 - nicht mischbare 190 ff.
 - Oberflächeneigenschaften 685 ff.
 - thermodynamische Eigenschaften 674
 - Viskosität 803
 - Wechselwirkungen 666 ff.
 - Flüssigkristalle 197
 - flüssigkristalline Phase 197, 714
 - Fock-Operator 428
 - Folgereaktionen 854 ff.
 - Formeleinheit 3
 - Förster-Theorie 872 ff.
 - Fourier-Synthese 740
 - Fouriertransformation 469, 568 ff.
 - Fouriertransformationsspektroskopie 485, 503

- Fouriertransformationstechniken 503
 fraktionierte Destillation, *siehe* Rektifikation
 Franck-Condon-Faktor 521
 – Berechnung 521
 Franck-Condon-Näherung 520
 Franck-Condon-Prinzip 519 f.
 – bei der Fluoreszenz 530
 – quantenmechanische Version 519
 Freeze-Quench-Verfahren 835
 frei abklingende Induktion, *siehe* Induktion,
 frei abklingende
 Freie Aktivierungsenergie bei
 Elektrodenreaktionen 925
 Freie Aktivierungsenthalpie 925 ff.
 Freie Bildungsenthalpie 249
 Freie Energie 116 ff.
 – Berechnung aus der Zustandssumme 625
 Freie Enthalpie 116 ff., 112 ff.
 – Berechnung aus der Zustandssumme 627,
 644 f.
 – chemischer Reaktionen 222 ff.
 – Druckabhängigkeit 130 f.
 – Eigenschaften 127 f.
 – einer Mischung 175
 – eines idealen Gases 131
 – partielle molare 166
 – Temperaturabhängigkeit 128 f.
 Freie Expansion 52
 Freie Grenzflächenenthalpie 687
 Freie Mischungsenthalpie 169 ff.
 Freie Reaktionsenthalpie 222 ff., 243 ff.
 Freie Solvatationsenthalpie 124
 Freie Standardbildungsenthalpie, *siehe* auch
 Freie Bildungsenthalpie
 – und Standardzellpotenzial 242
 Freie Standardreaktionsenthalpie, *siehe* Freie
 Reaktionsenthalpie
 Freiheitsgrade 9
 – bei Mischungen 146
 – mittlere Energie 635
 – Wärmekapazität 638
 – Zustandssumme 599 ff.
 Freiwilligkeit, Kriterien der 117
 Frequenz 10 f., 264 ff.
 Frequenzbedingung, *siehe* Bohr'sche
 Frequenzbedingung
 Frequenzfaktor oder präexponentieller
 Faktor 849
 Frequenzverdopplung 769
 Freundlichisotherme 946
 Fugazität 132 ff.
 – van-der-Waals-Gas 133
 Fugazitätskoeffizient 132 f.
 Fundamentalgleichung 124 f., 166
 Funktional 425
 Funktionen
 – komplexe 324
 – orthogonale 286 ff., 310 f.
- g**
 g-Faktor
 – Elektron 548
 – Kern 550
 – in der ESR-Spektroskopie 584
 Galliumarsenid-Halbleiter 196
 Galvanipotenzialdifferenz 917
 galvanische Zelle 920 ff.
 – unter Belastung 921
 Gammastrahlung 266
 Gase 679 f.
 – Doppler-Verbreiterung 369 f.
 – elektrische Leitfähigkeit 810
 – ideale 30, 63
 – kinetische Gastheorie 791 ff.
 – Molekülgeschwindigkeit, mittlere 797
 – reale 24, 29 ff.
 – Transporteigenschaften 802
 – Viskosität 824
 – Wechselwirkung von Dipolen 666 ff.
 Gaselektrode 241
 Gasgesetze 23 ff.
 – und Wetter 28
 Gaskonstante 23 f.
 Gaslaser 538 f.
 Gasmischungen 26
 Gasphasenreaktionen 231, 644, 859 ff.
 – Arrhenius-Parameter 890
 gaselektive Elektroden 251
 Gassolvatation (des Wasserstoffs) 123
 Gastheorie, kinetische 25, 792 ff.
 – mittlere freie Weglänge 798 f.
 Gauß, Einheit 548
 Gaußfunktion 317 f., 370, 424, 501
 Gefrierpunktserniedrigung 180 f.
 Gegenelektrode 927
 Gele 715
 Gelelektrophorese 835 ff.
 Gesamtbahndrehimpuls
 – bei Atomen 377 f.
 – bei Molekülen 516
 Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl 377
 Gesamtdrehimpuls 377 ff.
 Gesamtdrehimpulsquantenzahl 378 ff.
 Gesamtheit, *siehe* Ensemble
 Gesamtquantenausbeute 866 f.
 Gesamtspindrehimpuls 377
 Gesamtspinquantenzahl 378
 Gesamtübergangswahrscheinlichkeit 529
 Gesamtzustandssumme 631 ff.
 Geschwindigkeit 9 ff.
 – Autoprotolyse von Wasser 848
 – der Elektronenübertragung 915
 – mittlere relative 959
 – mittlere, ideales Gas 9 ff.
 – quadratisch gemittelte 26 f., 792
 – von Schall 794
 Geschwindigkeit von Reaktionen, *siehe*
 Reaktionsgeschwindigkeit
 geschwindigkeitsbestimmender Schritt 857
 Geschwindigkeitsgesetz 836 f.
 – Bestimmung 838
 – dritter Ordnung 839
 – einer heterogenen Reaktion erster
 Ordnung 924
 – Elementarreaktionen 852 ff.
 – erster Ordnung 838
 – heterogen katalysierter Reaktionen 957 f.
 – integriertes 840 ff.
 – Ionenreaktionen 903 f.
 – nullter Ordnung 838
 – photochemischer Reaktionen 966
 – Polymerisation 962 ff.
 – pseudo-erster Ordnung 839
 – zweiter Ordnung 842 ff.
 Geschwindigkeitskonstante 836 ff.
 – aktivierter Komplex 898
 – bei Ionenreaktionen 904 f.
 – der Elektronenübertragung 912 f.
 – diffusionskontrollierter Reaktionen 895 ff.
 – und Gleichgewichtskonstante 847 f.
 – von Elementarreaktionen 852 f.
 – zustandsaufgelöste 906
 Geschwindigkeitsselektor 691
 Geschwindigkeitsverteilung 794 f.
 – Maxwell'sche 794 f.
 Gesetz der unabhängigen
 Ionenwanderung 807
 Gesetz nach Dalton, *siehe* Dalton'sches Gesetz
 Gesetz von Avogadro, *siehe* Avogadro-Gesetz
 Gesetz von Boyle, *siehe* Boyle'sches Gesetz
 Gesetz von Charles 23
 Gewicht, statistisches 597 ff.
 Gibbs-Duhem-Gleichung 167, 688 f.
 Gibbs-Energie, *siehe* Freie Enthalpie
 Gibbs-Gleichung der
 Oberflächenspannung 688 f.
 Gibbs-Helmholtz-Gleichung 129
 Gibbs'sche Isotherme 688
 Gitter 733 f.
 Gitterebenen 738 ff.
 – Abstand 739
 – Identifikation 738
 Gitterenergie 753
 Gitterenthalpie anorganischer
 Verbindungen 754
 Gitterpunkt 736 ff.
 Glanzwinkel 742 f.
 Glaselektrode 251 f.
 Gleichgewicht 224 ff.
 – chemisches, *siehe* auch chemisches
 Gleichgewicht
 – chemisches, Druckabhängigkeit 233
 – chemisches, Temperaturabhängigkeit 234
 – dynamisches 948
 – elektrochemische Zellen 245
 – idealer Gase 225
 – in biologischen Systemen 223
 – mechanisches 52
 – Reaktionen in der Nähe des 845 ff.
 – Relaxation 845 ff.
 – thermisches 22 f.
 – thermisches, bei Absorption und
 Emission 529 f.
 – thermodynamisches 847
 – vorgelagertes 858 f.
 Gleichgewichtsbindungsabstand 392
 Gleichgewichtskonstante 225 ff., 645 ff.
 – aktivierter Komplex 899
 – auf molekularer Ebene 231 f.
 – bei Ionenreaktionen 903 f.
 – Beiträge zur 647
 – Berechnung 228
 – Berechnung aus Zustandssummen 645 ff.
 – Berechnung aus
 Standardzellspannung 249
 – der Dissoziation von Molekülen 646 f.
 – in biologische Systemen 223
 – temperaturabhängig 234 f.
 – thermodynamische 228
 – und Zustandssumme 645 ff.
 Gleichgewichtszellspannung 243
 Gleichverteilungssatz 9, 267

- Global 502
 Glorienstreuung 681
 Glucose 70
 – Freie Verbrennungsenthalpie 224
 Glycin 448
 Glykolyse 224, 874
 Gouy-Chapman-Modell 917 ff.
 Gouywaage 772
 Grahamsches Gesetz 801
 Grahammodell 918
 Graphit-Struktur 756
 Gravimetrie 946
 Grenzdruck 686
 Grenzfall, thermodynamischer 611
 Grenzfläche
 – elektrisches Potenzial 241
 – Flüssigkeit/Gas 682 ff.
 – von Elektrode und Elektrolytlösung 917
 grenzflächenaktive Substanzen, *siehe*
 oberflächenaktive Substanzen
 Grenzleitfähigkeit, molare 807 ff.
 Grenzorbitale 416
 Grenzviskosität 725 f.
 Größen, extensive, intensive, molare und
 physikalische 5, 11
 Grotrianndiagramm 358
 – Heliumatom 373
 Grotthußmechanismus 809
 Grundübergang, bei
 Schwingungsspektren 487, 495
 Grundzustand eines Atoms 364
 Gruppentheorie 440 ff.
 – Infrarot-Aktivität von
 Normalschwingungen 493 ff.
 – spektroskopische Auswahlregeln 505 ff.
 GOT (Gaussian type orbitals) 424
 Gütemodulation bei Lasern 536 f.
 Gunndiode 502
 gyromagnetisches Verhältnis 548 ff.
- h**
 Halbleiter 195 f., 762 ff.
 – III/V- 195
 – Fremd- 765
 – Galliumarsenid-Typ 196
 – p- und n-Typ 765
 – Silicium- 766
 – Verbindungs- 765
 Halbreaktionen 240 f.
 – der Auflösung von AgCl 240
 – Reaktionsquotient 240 ff.
 Halbwertsbreite einer Spektrallinie 369
 Halbwertszeit 842 f.
 Hamiltonoperator 280 ff.
 – Rumpf- 428
 harmonischer Oszillator, *siehe* Oszillator,
 harmonischer
 Harned-Zelle 246
 Harpunenmechanismus 891
 Hartkugelpotenzial 640, 678
 Hartree-Fock-Verfahren (HF-SCF) 368 f.
 Hauptdrehachse 440
 Hauptquantenzahl 1, 347
 Hauptsatz
 – Dritter 913 f.
 – Erster 45 ff.
- Nullter 22
 – Verbindung vom ersten und zweiten 124
 – Zweiter 97 ff.
 HDP, *siehe* hexagonal dichte Packung
 Hebelgesetz, für Phasendiagramme 187
 Heisenbergsche
 Unbestimmtheitsrelation 290 f.
 Heizspirale, Berechnung der
 Wärmemenge 46
 Helium
 – -atom 359 f.
 – Grotrianndiagramm 373
 – λ -Kurve 148
 – -molekül 404
 – ortho- und para- 372
 – Phasendiagramm 148
 – suprafluides 148
 – zu Kühlzwecken 610
 Helium-Neon-Laser 538
 Helix-Knäuel-Übergang 648 f.
 Helixstruktur 707 ff.
 Helmholtz-Energie, *siehe* Freie Energie
 Helmholtzmodell 917
 Helmholtzschicht 917
 Hemmung
 – kompetitive 940
 – unkompetitive 940
 Henry-Konstanten 174 ff.
 Henry-Gesetz 173 ff.
 Hermann-Mauguin-System 442 ff.
 Hermitepolynome 317 f.
 hermitescher Operator 285
 Hertz, Einheit 10
 Hess, Satz von, *siehe* Satz von Hess
 heteroatomares Spinsystem, *siehe* Spinsystem,
 heteroatomares
 heterogene Reaktionen 836, 924
 Heterogenitätsindex 718
 hexagonal dichte Packung 751 ff.
 hexagonales Kristallsystem 737
 Hohlraum 683
 HOMO 417
 homoatomares Spinsystem, *siehe* Spinsystem,
 homoatomares
 homogene Katalyse 933 ff.
 Hookesches Gesetz 315 f, 703 f.
 Hückelnäherung 416 ff.
 – Matrixformulierung 417
 Hundsche Regel 364
 Hybridisierung 392
 – aus ESR-Daten 587
 – Einfluss auf die Kopplungskonstante in der
 NMR-Spektroskopie 563 f.
 Hybridorbitale 395 f.
 Hydratationsenthalpie 123
 Hydrierungen, katalytische 959
 Hydrierungsenthalpie 71 f.
 hydrodynamischer Radius 809
 Hydrophilie 674
 hydrophobe Wechselwirkungen 673 f.
 Hydrophobizität 674
 Hydrophobizitätskonstante 674
 Hyperfeinkopplungskonstante, ESR-
 Spektroskopie 586
 Hyperfeinstruktur, ESR-Spektren 585 f.
 Hyperpolarisierbarkeit 770
- i**
 ideal verdünnte Lösungen, *siehe* Lösungen,
 ideal verdünnte
 ideale Lösung, *siehe* ideale Mischung
 ideale Mischung 171, 175
 ideales Gas 6, 19 ff.
 – Carnot-Prozess 103 ff.
 – Diffusion 813 ff.
 – Enthalpie 57, 626
 – Expansion 50 ff., 79 f.
 – Freie Enthalpie 175, 627
 – Freie Mischungsenthalpie 169
 – Innere Energie 48 f., 635
 – Mischungsenthalpie 171
 – Mischungsentropie 169 f.
 – mittlere freie Weglänge 798
 – Molekülgeschwindigkeit 792 ff.
 – Stoßhäufigkeit 798 f.
 – Transporteigenschaften 802 f., 822
 – Viskosität 803 f.
 – Wärmekapazität 804
 – Wärmeleitfähigkeit 803
 – Zustandsgleichung 19
 Identität, als Symmetrieoperation 440
 Ikosaedergruppe, *siehe* Punktgruppen
 Impuls
 – Operator 283 ff.
 – Relation zur Wellenlänge 272 f.
 – Teilchen im Kasten 304 ff.
 – Wellenfunktion 281 ff.
 Indikatorndiagramm 52
 indirekter Reaktionsablauf 911
 Induced-fit-Modell 935
 Induktion, frei abklingende 570 f.
 Induktionsperiode 855
 induzierte magnetische Momente 774
 induziertes Dipolmoment, *siehe*
 Dipolmoment, induziertes
 inelastische Neutronenstreuung 805
 Infrarot 11
 – -aktiv und -inaktiv 486 f.
 – Aktivität von Normalschwingungen 500
 – Global 502
 – im elektromagnetischen Spektrum 264
 – Nernst-Stift als Strahlungsquelle 502
 Infrarot-Absorptionsspektren 495
 Infrarotchemilumineszenz 906
 Infrarotspektroskopie
 – Auswahlregeln 486
 – Vergleich mit Ramanspektroskopie 493
 Inhomogenitätsverbreiterung 573 f.
 inkongruentes Schmelzen 196
 Innere Energie 48 ff.
 – Abhängigkeit vom Volumen und
 Druck 53 ff., 79
 – Berechnung aus der
 Zustandssumme 605 ff., 612 f.
 – eines ideales Gas 607
 – statistische Ableitung 606 ff.
 – van-der-Waals-Gas 127 f.
 Integrale, verschwindende 455 ff., 461 ff.
 Interferenz
 – elektromagnetischer Wellen 272
 – von Orbitalen 393
 Interferogramm 504
 Internationales System, *siehe*
 Hermann-Mauguin-System

- Interstellarer Raum, Rotations- und Schwingungsspektroskopie 470 f.
 Intersystem Crossing 867
 – Phosphoreszenz 531
 Inversion, als Symmetrieoperation 403
 Inversion-Recovery-Experiment 573
 Inversionstemperatur 84 f.
 Inversionszentrum 441 ff.
 Ionen
 – Aktivität in Lösung 204 ff.
 – Bildungsenthalpie 122 f., 249 f.
 – Solvatationsenthalpie 123
 Ionenbeweglichkeiten 807 ff.
 – Interpretation 816
 – und Leitfähigkeit 806 f.
 Ionenkanäle 811 ff.
 Ionenkristalle 760, 945
 Ionenpumpen 812 ff.
 Ionenradien 753
 Ionenreaktionen 903 f.
 ionenselektive Elektrode 252
 Ionenstärke 205 f.
 Ionenwanderung, unabhängige 807
 Ionenwolke 205
 ionische Bindung, *siehe* Bindung, ionische
 Ionisierung 348, 371
 – und Quantendefekte 371
 Ionisierungsenergie 348 f.
 – erste und zweite 366
 – Londongleichung 672
 – Periodizität 366
 – spektroskopische Bestimmung 348
 Ionisierungsenthalpie 366
 Ionisierungsverfahren 943 f.
 irreduzible Darstellungen *siehe* Darstellungen, irreduzible
 Irreversibilität, mikroskopische Erklärung 99
 ISC, *siehe* Intersystem Crossing
 Isenthalpie 84
 Isobare 23, 235
 Isochore 23
 Isolator 762 ff.
 Isoliermethode 839
 Isoplethe 186
 isostere Adsorptionenthalpie 950 f.
 isotherme Expansion, Entropieänderung 77
 Isotherme 23
 – Adsorptions- 948 ff.
 – Gibbssche 688 f.
 isotherme Kompressibilität 80
j
 Jablonskidiagramm 532
 jj-Kopplung 380
 Joule 6, 63, 1067
 Joule-Thomson-Effekt 81 ff.
 Joule-Thomson-Koeffizient 81
 – isothermer 83
k
 K-Strahlung 741
 Käfigeffekt 893
 Kalomelelektrode 251
 Kalorimeterkonstante 55
 Kalorimetrie 55 ff.
 – adiabatisches Bombenkalorimeter 55
 – adiabatisches Verbrennungskalorimeter 59
 – dynamische Differenzial- (DSC) 63
 Kälteerzeugung 106
 kanonische Gesamtheit, *siehe* kanonisches Ensemble
 kanonische Verteilung 612
 kanonische Zustandssumme *siehe* Zustandssumme, kanonische
 kanonisches Ensemble 610 ff.
 Kapillarmethode 819 f.
 Kapillarwirkung 684 f.
 Karplusgleichung 563
 Katalysatoren 933 ff.
 – formselektive 957
 – in der chemischen Industrie 959 ff.
 Katalyse 933 ff.
 – heterogene 942 ff.
 – homogene 933 ff.
 – enzymkatalysierte Reaktionen 935 ff.
 – Mechanismus der heterogenen 956 f.
 – Merkmale der homogenen 933 f.
 katalytische Effizienz 934 f.
 Kathode 241
 KDP, *siehe* kubisch dichte Packung
 Keesomwechselwirkungen 669
 Keimbildung
 – Kondensations- 690
 – spontane 690
 Kelvin, Einheit 5
 Kelvingleichung 689
 Kelvinskala 5
 Kern-g-Faktor 550 f.
 Kern-Overhauser-Effekt 577 f.
 Kernaufbau 549
 Kerne, äquivalente im NMR-Spektrum 565 f.
 Kernfusion 381
 Kernladung, effektive 362 f.
 Kernmagneton 550 f.
 Kernresonanzspektrometer
 – Aufbau 552
 – Inhomogenitäten des Magnetfelds 552
 Kernresonanzspektroskopie 551 ff.
 – Abschirmung 555 ff.
 – Abschirmungskonstante 553
 – äquivalente Kerne 565 f.
 – Austauschprozesse 568 f.
 – Boltzman-Verteilung der Besetzungszahlen 552
 – chemische Umgebung 553
 – chemische Verschiebung 553 ff.
 – δ -Skala 553 f.
 – Diagonalpeak 579
 – Einfluss der Feldstärke 569 f.
 – Entkopplung 577 f.
 – ^{19}F -Kernen 551, 565
 – Fourier-Transformation 568
 – Frequenzbereich 571
 – homogenes Magnetfeld 551
 – in Festkörpern 581 f.
 – Intensitäten 552 f.
 – Inversion-Recovery-Experiment 573
 – Karplusgleichung 563
 – Kern-Overhauser-Effekt (NOE) 577 f.
 – Kopplungskonstante 559
 – Kopplungsmuster 561
 – Korrelations- (COSY) 579 ff.
 – Lamb-Formel 556
 – Lebensdauer verbreiterung 568
 – Linienverbreiterung im Festkörper 581 f.
 – Nachbargruppeneffekte 557 f.
 – Protonenentkopplung 577
 – Protonenresonanz ($^1\text{H-NMR}$) 554
 – Pulstechniken 568 ff.
 – Referenzsubstanzen 553 f.
 – Refokussierung 574
 – Relaxationszeiten 571 ff.
 – Resonanzbedingung 551 f.
 – Ringströme 558
 – Spinrelaxation 571 ff.
 – Spin-Spin-Kopplung 559 f.
 – stark gekoppelte Kerne 566
 – Zeitbereich 571
 – zweidimensionale 579 ff.
 Kernresonanzspektrum
 – Dublett 560 ff.
 – erster Ordnung 566
 – Feinstruktur 559 ff.
 – Integration der Signale 555
 – Linienbreiten bei Festkörpern 581 f.
 – Linienverbreiterung durch Konformationsänderungen 567 f.
 – Quartett 561 f.
 – Quintett 562
 – skalare Kopplungskonstante 562
 – Triplett 561 ff.
 – von Ethanol 555
 – zweiter Ordnung 566 f.
 Kernspin 549 ff.
 – Einfluss auf die Hyperfeinstruktur im ESR-Spektrum 585
 – Entkopplung 577 f.
 Kernspinquantenzahl 549
 Kernspinresonanz, *siehe* Kernresonanz
 Kernstatistik, in der Raman-Rotationsspektroskopie 483
 Kerr
 – -Effekt, optischer 770
 – -Linse 770
 – -Medium 770
 Kette
 – frei bewegliche 699 ff.
 – mit starren Bindungswinkeln 702 f.
 Kettenlänge, kinetische 865
 Kettenpolymerisation 863
 Kettenreaktionen 863 ff.
 – Geschwindigkeitsgesetz 864 f.
 – Mechanismen 863 f.
 – radikalische 863
 Kettenträger 863
 Kettenübertragung 864
 Kilogramm 5
 Kinetik von Reaktionen, *siehe* Reaktionskinetik
 kinetische Energie 321 ff.
 kinetische Gastheorie 25 f., 792 ff.
 – Druck 792
 – Stoßzahl 800
 – Transporteigenschaften 802
 – Wärmeleitfähigkeit 803
 kinetischer Salzeffekt 904
 Kirchhoffsches Gesetz 75
 Klassen von Symmetrieoperationen 452 f.
 Klassifikation nach Ehrenfest 156 f.
 Klassifikation von Linearkombinationen von Orbitalen 449 ff.
 klassische Mechanik 294 ff.
 Klystron 502, 583
 Knäuel, statistisches 699 ff.
 – Ausdehnung 699

- Knoten 281
 Knotenebene 354
 Knudsenmethode 801
 Koadsorption 956
 Koagulation 712
 Kohärenz, räumliche und zeitliche 535
 Kohärenzlänge 535
 Kohlendioxid
 – Isothermen 30 f.
 – Phasendiagramm 147
 – überkritisches 148
 Kohlendioxidlaser 539
 Kohlrauschs Quadratwurzelgesetz 807
 Kohn-Sham-Gleichungen 429
 kolligative Eigenschaften 177 ff.
 Kolloide 709 ff.
 – lyophile, lyophobe, hydrophile und hydrophobe 710
 – Struktur und Stabilität 711 ff.
 Kombinationsdifferenzen 491 f.
 Kommutator 292
 komplementäre Observablen 292
 Komplex, oktaedrischer
 – Elektronenübergänge und Orbitalsymmetrien 523
 Komplex, aktivierter, *siehe* aktivierter Komplex
 komplexe Zahlen 301 ff.
 Kompressibilität 80
 – isotherme 760
 Kompression
 – bei Gasreaktionen 29
 – im Carnot-Prozess 103 ff.
 Kompressionsfaktor 30 ff.
 – kritischer 36
 – realer Gase 30 ff.
 Kondensation 31, 862
 Konfiguration 596 ff.
 – Niveaus 359
 – statistisches Gewicht 597
 Konfigurationsintegral 638
 Konformation 648, 697
 Konformationsumwandlung, Einfluss auf NMR-Spektren 567 f.
 Konformationsentropie 701 f.
 Konode 185
 pn-Kontakte 776
 Kontaktwechselwirkung, Fermi- 563
 Kontaktwinkel 685
 Kontinuumszustände 348
 Konturlänge 700
 Konturliniendiagramm 707
 Konvektionsfluss 818
 Konzentrationsgradient und thermodynamische Kraft 814
 Konzentrationsprofil, eines diffundierenden reagierenden Systems 819
 Konzentrationszellen 241
 Koopmans' Theorem 408
 Koordinationszahl 752
 Koordination, (n+, n-) 753
 Kopplung
 – *cis*- und *trans*- in der Kernresonanzspektroskopie 565 ff.
 – Spinkopplung in der NMR-Spektroskopie 559 ff.
 Kopplungskonstante 559 ff.
 Kopplungsmuster 561 f.
 Korrelationsanalyse 903
 Korrelationsdiagramm, für Zustände eines Zweielektronensystems 380
 Korrelationsenergie, Austausch- 425
 Korrelationspotenzial, Austausch- 425
 Korrespondenzprinzip 307
 kovalente Bindung, *siehe* Bindung, kovalente
 Kraffttemperatur 713
 Kraft, thermodynamische 813 ff.
 Kraftfeld, eines Moleküls 495
 Kraftkonstante 295
 – bei Schwingungen 315
 Kreisel
 – asymmetrischer 472 ff.
 – Energieniveaus 474 ff.
 – linearer 472 ff.
 – sphärischer 472 ff.
 – symmetrischer 472 ff.
 – Trägheitsmomente 471
 Kreisprozess, thermodynamischer 103
 Kristalldioden 504
 Kristallstruktur 753 ff.
 Kristallgitter 736 ff.
 Kristallinität 704
 Kristallite, Mikro- 195
 Kristallsysteme 737 f.
 kritische Entmischungstemperatur, *siehe* kritische Mischungstemperatur
 kritische Größen 32
 – und van-der Waals-Gleichung 32 f.
 kritische Micellenkonzentration (CMC) 713
 kritische Mischungstemperatur 191
 kritische Temperatur 32, 144
 kritischer Druck 32, 144
 kritischer Kompressionsfaktor 30
 kritischer Punkt 144 f.
 kritisches Volumen 32
 Kronecker-Delta 435
 Krümmung einer Kurve 35, 284
 Kryohydrate 206
 Kryoskopie 180
 kryoskopische Konstante 180
 Krypton-Ionenlaser 539
 kubisch dichte Packung 751
 kubische Gruppen, *siehe* Punktgruppen
 kubisches Kristallsystem 737 f.
 Kugelflächenfunktionen 327 f.
 Kugelkoordinaten 278
 Kugelpackungen 750 f.
- I**
 Ladungsdichte 208
 Ladungsübertragung
 – Aktivierungsenthalpie, freie 924 f.
 – Butler-Volmer-Gleichung 924 f.
 Lagrange-Multiplikatoren 616
 Lamb-Formel 556
 Lambert-Beer-Gesetz 514 ff.
 Längenausdehnung 51
 Langevinfunktion 662
 Langmuir-Blodgett-Schichten, *siehe* Monolagen
 Langmuir-Hinshelwood-Mechanismus 956
 Langmuirisotheorie 948 f.
 Langmuirwaage 686
 Laplace
 – -Gleichung 683 f.
 – -Operator 325 ff.
 Laporte-Auswahlregel 518 f.
- Larmor-Frequenz 549
 Laser 533 ff.
 – Anwendungen 534 ff.
 – Argonionenlaser 538
 – Bauarten 538 ff.
 – Besetzungsinversion 534 f.
 – Dreiniveaulaser 534
 – Exciplexlaser 539
 – Farbstofflaser 539
 – Festkörperlaser 776
 – Gaslaser 538
 – Gütemodulation 536
 – Helium-Neon-Laser 538
 – induzierte Emission 533 f.
 – Kohlendioxidlaser 539
 – Kontinuumszerzeugung 834
 – Krypton-Ionenlaser 539
 – Leistung und Energie 536 f.
 – Moden 535
 – Neodymlaser 769, 776
 – phasengekoppelte 537 f.
 – Pockels-Zelle 536
 – Pumpen 534
 – Resonator 535
 – Stickstofflaser 539
 – superradianter 539
 – Titan-Saphir- 776
 – Vierniveau- 534
 – YAG-Laser 769, 776
 Laser-Lichtstreuung 720 f.
 Laser-Raman-Spektroskopie, *siehe* Raman-Spektroskopie
 laserinduzierte Fluoreszenz 906
 Laserlicht
 – Kohärenz 535
 Laserprinzip 535 f.
 Laserspektroskopie 898 f.
 LCAO, *siehe* Linearkombination von Atomorbitalen
 Lebensdauerverbreiterung 370
 – bei Molekülspektren mehratomiger Moleküle 495
 – im NMR-Spektrum 568
 LED, *siehe* Licht emittierende Dioden
 LEED, *siehe* Beugung energiearmer Elektronen
 LEED-Apparatur 944
 Legierung 142 f., 196
 Legendre
 – -Polynom, assoziiertes 326 f.
 – -Operator 326 f.
 Leistung 12
 – bei Lasern 536 f.
 – elektrische 63
 – von Elektrolysezellen unter Belastung 921
 Leistungskoeffizient, von Kältemaschinen 107
 Leiter, metallischer 157, 762
 Leitfähigkeit
 – einer Lösung 806
 – molare 806 ff.
 – spezifische 806
 – und Beweglichkeit 809
 – von Elektrolytlösungen 806 ff.
 Leitungsband 764 ff.
 Lennard-Jones-Parameter 760
 Lennard-Jones-Potenzial 678, 760
 LFER, *siehe* lineare Freie-Enthalpie-Beziehung

- Licht, *siehe* auch Strahlung, elektromagnetische 264
 Lichtbrechung, *siehe* Brechung
 Licht emittierende Dioden 776 f.
 Lichtabsorption 767
 Lichtemission 776
 Lichtgeschwindigkeit 10, 263
 Lichtsammelkomplexe 873
 Lichtstärke 11
 Lichtstreuung
 – dynamische 820
 – Laser- 720 ff.
 Ligandenfeldaufspaltung 523 ff.
 Ligand-zu-Metall-Charge-Transfer-Übergang (LMCT) 524
 Linde-Verfahren 84
 Lindemann-Hinshelwood-Mechanismus 860
 lineare Freie-Enthalpie-Beziehung 903
 lineare Superposition 287 f.
 linearer Kreisel, *siehe* Kreisel
 Linearkombination 287 ff.
 – Bildung der p_x - und p_y -Orbitale 354 f.
 – von Atomorbitalen (LCAO) 399 ff.
 – von Orbitalen, symmetrieadaptierte (SALK) 460
 – von Wellenfunktionen 287, 393
 Linienbreite
 – im NMR-Spektrum 567, 581 f.
 – natürliche 371
 Linienverbreiterung, Festkörper-NMR 581 f.
 Logarithmus, natürlicher und dekadischer 246
 Londongleichung 672
 Londonwechselwirkung, *siehe* Dispersionswechselwirkung
 longitudinale Relaxationszeit 571 f.
 Lorentz-Absorptionslinie 573
 Löschkonstante 871
 Löschung angeregter Zustände 870
 Löslichkeit 181 f.
 – von Gasen und die Atmung 174
 Lösungen
 – Eigenschaften 175 ff.
 – ideal verdünnte 173
 – ideale 172
 – Leitfähigkeit 806
 – reale 157
 – reguläre 176
 Lösungsmittel, Aktivität 199
 LUMO 407
 Lyman-Serie 341 f.
 lyophile und lyophobe Wechselwirkungen 710
- m**
- Madelung-Konstante 755
 Magic-Angle-Spinning (MAS) 582
 Magnetfeld 10, 264, 375, 547 f.
 – bei der Resonanzspektroskopie 547 ff.
 – Energie von Atomkernen 549 ff.
 – Energie von Elektronen 547 f.
 – Feldstärke bei der ESR-Spektroskopie 583 f.
 – Flussdichte 771
 – homogenes bei der NMR-Spektroskopie 551
 magnetische Flussdichte 548, 771
 magnetische Quantenzahl 327
- Magnetresonanzspektroskopie, *siehe* Spektroskopie, Kernresonanzspektroskopie, Elektronenspinresonanzspektroskopie
 magnetische Suszeptibilität 557, 771 f.
 – Berechnung 773
 – Messung 772
 magnetische Volumenssuszeptibilität 771
 magnetisches Moment 373 f., 547 f., 773
 – des Atomkerns 549
 – des Elektrons 373, 548
 – induziertes 774
 Magnetisierbarkeit 772(D)772
 Magnetisierung 568, 771
 – 90° -Puls 570
 Magnetisierungsvektor 568 ff.
 Makromoleküle 697 ff.
 – Lichtstreuung 720 ff.
 – mittlere Molmassen 717 ff.
 – statistisches Knäuel 699 ff.
 – Strukturen 697 ff.
 Manometer 21
 Marcus-Theorie 872
 Margules-Gleichungen 203
 Mark-Kuhn-Houwink-Sakurada-Gleichung 726
 Mars-van-Krevelen-Mechanismus 960
 MAS, *siehe* Magic-Angle-Spinning
 Masse
 – effektive 486
 – reduzierte 343, 797
 Massenspektrometrie 719 f.
 – Elektrospray-Ionisation (EI) 719
 – MALDI-TOF- 719
 – matrixunterstützte Laserdesorption und -ionisation (MALDI) 719
 Materiefluss 802
 Matrixdarstellung, einer Punktgruppe 450 ff.
 Matrixdiagonalisierung 419
 Matrixelement 423, 435
 Matrizen 435 ff.
 – beim Aufbau der Charaktertafeln 450 ff.
 – Darstellung 450
 maximale Wechselzahl 937
 Maxwell Beziehungen 125 f.
 Maxwell-Konstruktion 35
 Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung 794 f.
 Mayer'sche f -Funktion 639
 McConnell-Gleichung 586
 Mechanik, klassische 294 ff.
 mechanisches Gleichgewicht 20
 Mehrelektronenatome 358 ff.
 – Aufbauprinzip 363
 – Ionisierungsenthalpie und Elektronenaffinität 366
 – Spektroskopie 369 ff.
 – Spinkorrelation 364
 – Termsymbole und Auswahlregeln 376 ff.
 Mehrphotonenionisation (MPI) 906
 – resonante (REMPI) 906
 Mehrschichtadsorption 951
 Meissner-Effekt 774
 Membranen 718 ff.
 – biologische 718 ff. 811 f., 819 f.
 meso-Weinsäure, Symmetrieelemente 442
 Mesomorphe, lyotope 714
 Messing, Phasenübergang 158
 Metabolismus, aerober und anaerober 224
- Metall-zu-Ligand-Charge-Transfer-Übergang (MLCT) 524
 Metalle 750 ff.
 – Ablösearbeit 271
 – Koordinationszahl 750, 752 f.
 – photoelektrischer Effekt 270 f.
 – Röntgenemission 741
 – Struktur 750 f.
 metallische Leiter 762
 metastabile Phasen 143
 Meter 11
 Methanmolekül
 – Orbitalüberlappung 459
 – Symmetrieelemente 441
 – Symmetriezahl 631
 – VB-Beschreibung 396
 Methode der Anfangsgeschwindigkeiten 839
 Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren, *siehe* Methode der unbestimmten Multiplikatoren
 Methode der unbestimmten Multiplikatoren 616
 Michaelis-Menten-Gleichung 936
 Michaelis-Menten-Konstante 936
 Michaelis-Menten-Mechanismus 936 f.
 Michelson-Interferometer 469, 503
 Miepotenzial 678
 mikroporöse Materialien 161 f.
 Mikrowellen, im elektromagnetischen Spektrum 11, 264
 Mikrowellenspektroskopie 329, 505
 Mikrowellenstrahlung, bei der ESR-Spektroskopie 583
 Miller'sche Indizes 738 f.
 Millimeter Quecksilbersäule, *siehe* Torr
 Mischbarkeit, begrenzte 176
 Mischkammer 833
 Mischphasenthermodynamik 169 f.
 Mischungen 163 ff.
 – binäre 164
 – chemisches Potenzial 171 f., 178 f., 207
 – Dampfdruckdiagramm 185 ff.
 – Dampfdrücke 172 f.
 – Destillation 188
 – eutektische 194
 – flüssige 175 f.
 – Freien Enthalpie 116, 164 ff., 625
 – ideale 171 f, 175
 – Phasendiagramme 185 ff.
 – Zusammensetzung 164 ff.
 Mischungsenthalpie, idealer Gase 169 ff.
 Mischungsentropie
 – Flüssigkeiten 175 ff.
 – idealer Gase 170 f.
 Mischungstemperatur, kritische 190 ff.
 Mittelwerttheorem 43
 mittlere freie Weglänge, ideales Gas 792 f, 798 f.
 mittlere Geschwindigkeit, ideales Gas 796 f.
 mittlere Molmassen, von Makromolekülen 716 ff.
 Mizellen 713 ff.
 MO-Energieniveaudiagramm 403 ff.
 – Butadien 420
 – Ethen 417
 – Fluormolekül 406
 – Fluorwasserstoff 410
 – Sauerstoffmolekül 406

- Stickstoffmolekül 406
- Stickstoffmonoxid 415
- Überlappung zweier Is-Orbitale 403
- Moden, resonante beim Laser 535
- Mol 5 f.
- Molalität 168, 174 ff.
- molare Leitfähigkeit 806 ff.
- molare magnetische Suszeptibilität 771 f.
- molare Polarisation 664
- Molarität 168, 209
- Molecular Modeling 74
- molekulare Erkennung 675 ff.
- molekularer Beitrag zur Abschirmung in der NMR-Spektroskopie 553 f.
- Molekulargewicht, *siehe* Molmasse
- Molekularität 852 f.
- Molekularstrahlen 680 f., 692
- gekreuzte 692
- Raumwinkel 680, 691
- Stoßparameter 680 f.
- Molekularstrahltechnik 680, 691
- Moleküldynamik 640, 642
- Moleküle
- abgeplattete 474
- Chiralität 448 f.
- Dissoziation 488 ff., 638, 644
- Eigenschaften, molekulare 425 ff.
- elektrische Eigenschaften 657 ff.
- elektronische Zustände 519 ff.
- gestreckte 474
- konjugierte 416 ff.
- Kraftfelder 495 f.
- magnetische Eigenschaften 771 ff.
- mittlere Energien 635 f.
- mittlere Relativgeschwindigkeit 797
- Polarisierbarkeit 660 f.
- Rotations- und Schwingungsspektren 467 ff.
- Struktur 391 ff.
- Trägheitsmomente 471 ff.
- Wechselwirkungen zwischen 657 ff., 666 ff.
- zustandsselektierte 905
- Zustandssumme 599 ff., 610 ff.
- Moleküldynamik-Methoden 642
- Molekülgeschwindigkeiten
- ideales Gas 792 f.
- Maxwell-Verteilung 794 f.
- Molekülgestalt und Reibungskoeffizient 723
- Molekülkristalle, Untersuchung durch Röntgenbeugung 756 f.
- Molekülorbitale 398 ff.
- Bestimmung durch Matrixdiagonalisierung 418 f.
- HOMO 417
- homoatomare zweiatomige Moleküle 403 ff.
- heteroatomare zweiatomige Moleküle 409 ff.
- freier Elektronen (FEMO) 431
- Linearkombination von Atomorbitalen (LCAO) 399 ff.
- LUMO 417
- mehratomiger Moleküle 416 ff.
- Normierung 399
- Parität 403 ff.
- Symmetrien 449 ff.
- von HF 410
- Wasserstoff-Molekülon 399 ff.
- Molekülorbitaltheorie 398 ff.
- Molekülschwerpunkt, Auswahlregeln bei Rotations- und Schwingungsspektren 505 f.
- Molekülschwingungen
- Potenzialkurve 485 f.
- mehratomige Moleküle 493 ff.
- zweiatomige Moleküle 485 ff.
- Molekülspektren 269
- Molekülspektroskopie 467 ff.
- Molekülsymmetrie 439 ff.
- Konsequenzen der 447
- Molekülzustände, Verteilung 596 ff.
- Molenbruch 26
- Molmasse 5
- massengewichtete mittlere 716 ff., 721 ff.
- viskositätsgewichtete mittlere 716 f., 725 ff.
- von Makromolekülen 716 ff.
- Z-gewichtete mittlere 716 ff.
- zahlengewichtete mittlere 716 ff.
- Molmassenbestimmung
- aus der Grenzviskosität 725 ff.
- durch Laser-Lichtstreuung 720
- osmometrische 182 f.
- von Polymeren 183, 719
- Molmassenverteilung, monodisperse und polydisperse 718
- Molvolumen 30
- monochromatische Strahlung, *siehe* Strahlung, monochromatische
- Monochromator 469, 503
- monoklines Kristallsystem 736 f.
- Monolagen 713 ff.
- selbstorganisierte (SAM) 715 f.
- Monomere 697 f.
- monomolekulare Schichten, *siehe* Monolagen
- Monopol 668
- Monte-Carlo-Verfahren 640, 642
- Morse-Potenzial 488, 502
- Multinomialkoeffizient 597
- Multiplikatoren, unbestimmte 616, 618
- Multiplizität 376 ff.
- Multipole 668
- n**
- n-Halbleiter 765
- Nachbargruppenbeitrag, *siehe* Abschirmung in der NMR-Spektroskopie
- Nahfeldmikroskopie, optische (NSOM) 532 f.
- NADH, *siehe* Nicotin-Adenin-Dinucleotid
- Nahordnung 641
- Nanodrähte 766
- Nanoröhrchen 756 f.
- Nanotechnologie 310
- Nanowissenschaften 310
- natürliche Linienbreite 469
- Nebenquantenzahl, *siehe* Drehimpulsquantenzahl
- Néel-Temperatur 773
- nematische Phase 197 f.
- Neodymlaser 769, 776
- Nernst-Stift, als Strahlungsquelle im nahen Infrarot 502
- Nernst'sche Gleichung 242 ff., 252 f.
- Nernst'sches Wärmetheorem 113
- Nettoabsorption, in der Absorptionsspektroskopie 468, 478
- Nettofluss 818
- Netzebenen 738 f.
- und Miller'sche Indizes 738 f.
- Neutronen, thermische 749 f.
- Wellenlänge 749
- Neutronenbeugung 749
- Neutronenstreuung, inelastische 805
- Newton'sches Gesetz, zweites 295
- Newton'sche Strömung 803
- nichtprimitive Elementarzellen, *siehe* Elementarzellen, nichtprimitive
- Nicotin-Adenin-Dinucleotid 224, 232, 874 ff.
- NMR-Spektrometer, *siehe* Kernresonanzspektrometer
- NMR-Spektroskopie *siehe* Kernresonanzspektroskopie
- NMR-Spektrum, *siehe* Kernresonanzspektrum
- Normalschmelzpunkt 144
- Normalschwingungen 493 ff.
- Infrarot-Aktivität von 495
- Symmetrie 499
- Symmetrie bei mehratomigen Molekülen 499 f.
- Symmetrierassen 499 f.
- Normalsiedepunkt 144
- Normierung
- Molekülorbitale 399
- Teilchen im Kasten 305 f.
- Wellenfunktion 277 ff.
- Normierungskonstante
- harmonischer Oszillator 317
- Schrödinger-Gleichung 274
- Nullpunktenergie 304, 306, 316 f.
- Schwingung 392
- Nullpunksentropie 114, 643 ff.
- Berechnung 643
- Nullter Hauptsatz 19, 22
- Nukleinsäuren
- Stabilität 707
- Struktur 706
- o**
- Oberflächen
- feste 942 ff.
- gekrümmte 683
- Zusammensetzung 943 ff.
- oberflächenaktive Substanzen 686
- Oberflächenarbeit 51
- Oberflächendruck 685 ff.
- Oberflächenfilmwaage, *siehe* Langmuir-Waage
- Oberflächenprozesse 946 ff.
- Geschwindigkeit 953 ff.
- Oberflächenschichten 685 ff.
- Thermodynamik von 687 ff.
- Oberflächenspannung 682 f.
- Berechnung 684
- Gibbs-Gleichung 687 ff.
- Gibbs'sche Isotherme 687 f.
- Oberflächenüberschuss 689
- Oberflächenwachstum 942 ff.
- Oberschwingungen, durch Anharmonizitäten 489
- Oberwellenerzeugung (SHG) 953
- Observablen 280, 283
- komplementäre 292
- Ohm 806
- oktaedrische Gruppen, *siehe* Punktgruppen
- oktaedrische Komplexe 524

- Oktupol 668 f.
 Operator 281 ff.
 – Austausch- 428
 – Coulomb- 428
 – Fock- 428
 – Hamilton- 302
 – hermitescher 285 ff.
 – Rumpf-Hamilton- 428
 optisch aktive Moleküle, *siehe* Chiralität eines Moleküls
 optische Aktivität 448
 optische Dichte *siehe* Absorption
 Orbitale
 – σ - 399 ff.
 – π - 405 f.
 – antibindende 402 f.
 – Aufbauprinzip 363 f.
 – bindende 400 f.
 – Einhüllende 351 f.
 – Hybrid- 395 ff.
 – mittlere Radien 351
 – Organisation 350
 – orthogonale 419
 – Parität 403 ff.
 – selbstkonsistente 368 f.
 – sp-Hybrid- 397
 – sp²-Hybrid- 397
 – sp³-Hybrid- 395 f.
 – Symmetrie 449 ff.
 – Überlappung 455
 – wasserstoffähnlicher Atome 341 ff.
 Orbitalenergien
 – der Elemente 406
 – durch Photoelektronenspektroskopie 408 f.
 Orbitalentartung, *siehe* Entartung von Orbitalen
 Orbitalnäherung 358
 Orbitalüberlappung 394 ff.
 – aufgrund von Symmetriebetrachtungen 458 ff.
 – beim Methanmolekül 459
 – und Symmetrie 457 f.
 Ordnung
 – bei Punktgruppen 453
 – von NMR-Spektren 566
 – einer Reaktion, *siehe* Reaktionsordnung
 Orientierungspolarisation 663
 orthogonale Funktionen 280, 286 ff., 325
 orthogonale Orbitale 419
 orthogonale Polynome 317
 Orthogonalität 286 f.
 Orthonormalität 280, 287
 orthorhombisches Kristallsystem 737 f.
 Osmometrie 182 f.
 – Membran 182
 – von Lösungen eines Polymers 716, 719
 Osmose 182
 – in der Physiologie und Biochemie 184
 osmotischer Druck, *siehe* Druck, osmotischer
 osmotischer Virialkoeffizient 183
 Ostwaldviskosimeter 725 f.
 Oszillator, harmonischer 295 f., 316 f.
 – Besetzungszahlen 602
 – Eigenschaften 319 f.
 – Energieniveaus 316
 – klassische verbotene Bereiche 321 f.
 – mittlere Energien 320 f.
 – Quantisierung 316
 – Tunneleffekt 321
 – Wahrscheinlichkeitsverteilung 318 f.
 – Wellenfunktion 317 f.
 – Zustandssumme 601
 Oxidation 240
 – katalytische 958, 960
 Oxidationsmittel, in elektrochemischen Zellen 240
p
 90°-Puls, in der NMR 570
 π -Bindungen 394 f.
 π -Elektronen-Radikale, ESR-Spektrum 587
 Packungen
 – hexagol dichte (HDP) 751, 761
 – kubisch dichte (KDP) 751, 761
 Parallelepiped 736
 paramagnetischer Beitrag, *siehe* Kernresonanzspektroskopie, Abschirmung
 Paramagnetismus 407, 771, 774
 – Sauerstoffmolekül 407
 – temperaturunabhängiger 771
 – van Vleck'scher 774
 Parität, von Molekülorbitalen 403 ff.
 Partialbruchzerlegung 43, 844
 Partialdruck 26 f., 151 f.
 – Berechnung 26
 Partialladungen 409 f.
 – in Polypeptiden 659
 partielle Ableitungen 94
 partielle molare Größen 164 f.
 Pascal 5
 Pascal'sches Dreieck 561
 Paschen-Serie 341
 Patch-Clamp-Technik 812
 Patch-Elektrode 812
 Patterson-Synthese 786
 Pauli-Prinzip 360 ff., 666
 – Besetzung von Rotationszuständen 483 f.
 Pauli'sches Ausschlußprinzip 360
 Pendel, Energieübertragung bei der Kopplung 547
 Peptidbindung 706
 Peptide 698 f.
 – Struktur 698 f.
 Periodensystem 365
 peritektische Linie 196
 Permittivität *siehe* Dielektrizitätskonstante
 Perpetuum Mobile 49
 PES, *siehe* Photoelektronenspektroskopie
 PESM, *siehe* Photoelektronen-Spektromikroskopie
 p-Halbleiter 765
 phänomenologische Gleichungen 802 f.
 Phase 141 ff.
 – einer Welle 10
 – flüssigkristalline 197, 714
 – metastabile 143
 – nematische 197
 – smektische 197
 – Stabilität 141 ff.
 Phasendiagramm 141 ff., 185 ff.
 – begrenzt mischbarer Flüssigkeiten 192 f.
 – chemischer Reaktionen 195
 – Einkomponentensystem 145 f., 149
 – flüssig/fest 194 ff.
 – flüssig/flüssig 190 ff.
 – flüssigkristalliner Materialien 198 f.
 – Hebelgesetz 185
 – Helium 148
 – Kohlendioxid 147
 – Natrium/Kalium 196
 – Palladium/Palladiumhydrid 191
 – Wasser 147
 – Zweikomponentensystem 185 ff.
 Phasengleichgewicht 142 f., 149, 185, 194
 – chemisches Potenzial 143
 Phasengrenzlinien 144 ff., 153 ff.
 – fest/flüssig 154
 – fest/gasförmig 156
 – flüssig/gasförmig 154 f.
 – Steigung 153
 Phasenkopplung 536 f.
 Phasenproblem 747 f.
 Phasenregel 145 f.
 Phasenübergänge 142 ff.
 – Enthalpieänderungen 59
 – Entropieänderung 107 f., 153 ff.
 – erster Ordnung 157 f.
 – Klassifikation nach Ehrenfest 156 f.
 – Kristallstrukturen 158
 – zweiter Ordnung 157 f.
 Phasenübergangsentropie 154
 Phasenübergangstemperatur 108, 142
 Phasenverschiebung, bei Kristallen mit zwei Atomarten 745 f.
 Phosphoreszenz 528 ff.
 – Innere Umwandlung 532 f.
 – Intersystem Crossing 531 f.
 – Jablonski-Diagramm 532
 Phosphorpentachloridmolekül, Symmetrieelemente 444
 Phosphorylierung
 – oxidative 224 f., 811 f.
 – Photo- 875
 photochemische Reaktionen 866 ff.
 Photodioden 505
 Photoeffekt, *siehe* Effekt, photoelektrischer
 photoelektrischer Effekt 270 f.
 Photoelektronen 408
 Photoelektronenspektroskopie (PES) 408 f., 943
 – Grundlagen 408
 – Röntgen- (XPS) 408 f., 943
 – Ultraviolett- (UPS) 409, 943
 – zur Bestimmung von Orbitalenergien 408 f.
 Photoelektronenspektrum, Interpretation 408
 Photoelement 504
 Photoemissionsspektroskopie, *siehe* auch Photoelektronenspektroskopie 408, 943
 Photoisomerisierung 527 f.
 Photolyse 833
 Photometrie, in der Reaktionskinetik 833
 Photomultiplier, *siehe* Photovervielfacher
 Photonen 270
 photophysikalische Prozesse 867 ff.
 Photosynthese 274, 427, 866 f., 873 ff.
 Photovervielfacher 505
 pH-Messung 251
 Physisorption 947, 953 f.
 Pictet-Trouton'sche Regel 109 f.
 Planck-Verteilung 266 f., 381
 Plancksches Wirkungsquantum 266, 271
 Plasma 799

- Plastochinon 875 f.
 Pockels-Zelle 536
 Poisson Gleichung 208
 Polarisation 661 f.
 – bei hohen Frequenzen 663
 – erlaubter Übergänge 462
 – molare 664
 – Orientierungs- 663
 – Verschiebungs- 663
 – von Flüssigkeiten 662 f.
 – von Strahlung 498
 – zirkulare 525
 Polarisationsfilter, bei Lasern 535
 Polarisierbarkeit 660 ff.
 – Bestimmung 665
 – Campher 665
 – eines Moleküls 660
 – Einfluss auf
 Rotationsschwingungsspektren 481
 – elektronische 663
 – Frequenzabhängigkeit 663 f.
 – isotrope und anisotrope 481
 – und Dipolmoment 660 ff.
 – und Molekülstruktur 661
 Polarisierbarkeitsvolumen 658, 660 ff.
 Polarität, eines Moleküls 448 f.
 Polarkoordinaten, *siehe* Kugelkoordinaten
 Polaron 705
 Polychromator 503
 Polyelektrolyte 708
 Polyene, HOMO-LUMO-Abstand 427
 Polymere 697 ff., 703 ff.
 – leitfähige 705
 – Massenspektren 719
 Polymerisation 862 ff.
 – Ketten- 863 f.
 – schrittweise 862 f.
 Polymerisationsgrad 863
 Polymorphe 142
 Polypeptide 648 ff., 698, 706 ff.
 – Partialladung 659
 Polytypen 750
 Population, *siehe* Besetzungszahl
 p-Orbitale 354
 – Abschirmung durch s-Orbitale 362
 – Einhüllende 354
 π -Orbitale 405 f.
 Porphin 337
 potenzielle Energie 6, 342 ff.
 – effektive 344
 Potenzial
 – elektrisches 917 f.
 – elektrokinetisches oder ζ - 709
 – Hartkugel- 678
 – Lennard-Jones- 678
 – Mie- 678
 – parabolisches 316
 – Rechteck- 314
 Potenzial, chemisches, *siehe* chemisches
 Potential
 Potenzialbarriere 914 ff.
 Potenzialhyperflächen 907 ff.
 – attraktive und repulsive 910
 – elektrostatische 425 f.
 Potenzialkurve
 – bei Molekülschwingungen 485 f.
 – des anharmonischen Oszillators 488
 – eines Moleküls 392
 – Wasserstoffmolekül-Ion 401
 Potenzialtopf 304, 314
 Potenzreihen 301
 Prädissoziation 533
 präexponentieller Faktor *siehe* Frequenzfaktor
 Präzession 549 f.
 – des Drehimpulsvektors im magnetischen
 Feld 549 f.
 – des Magnetisierungsvektors 568 ff.
 Primärstruktur, von Makromolekülen 698
 Prinzip der gleichen
 a-priori-Wahrscheinlichkeiten 596
 Prinzip der übereinstimmenden
 Zustände 36
 Prinzip des kleinsten Zwangs, *siehe* Prinzip
 von Le Chatelier
 Prinzip von Le Chatelier 233 f.
 Prisma 537
 Probefunktion 441
 Produkt, direktes 457
 Progression, *siehe* Schwingungsstruktur
 Promotion 395
 Proteine 698
 – Stabilität 708
 – Struktur 697 ff.
 – Proteinfaltung 706
 Protonen, *siehe* Kernresonanzspektroskopie
 Protonenentkopplung 577
 Protonenresonanz *siehe*
 Kernresonanzspektroskopie
 Prozess
 – adiabatischer 86
 – freiwilliger 98 ff.
 – irreversibler 100
 – kooperativer 708
 – photochemischer 866 ff.
 – reversibler 100 f.
 – spontaner 98
 Pulstechniken, in der
 Kernresonanzspektroskopie 568 ff.
 Pulverbeugungsdiagramm 742 f.
 – von KCl 742
 – von NaCl 742
 Pumpen, von Lasern 533 ff., 776 f.
 Punktdipol 666 f.
 Punktgruppen 440 ff.
 – Bestimmung anhand eines
 Flussdiagramms 443
 – C_1, C_i, C_s 442
 – C_{2v} 444
 – C_{3v} 444
 – C_n, C_{nv}, C_{nh} 444
 – D_{2h} 444
 – D_n, D_{nh}, D_{nd} 444
 – dreidimensionale Rotationsgruppe
 (R_3) 447
 – Einfluss auf das Dipolmoment 448
 – Iksaedergruppe 446
 – kubische 446
 – Matrixdarstellung 450 f.
 – oktaedrische 446
 – Ordnung 453
 – S_n 446 f.
 – tetraedrische (T, T_d, T_h) 446
 Punktspiegelung, *siehe* Inversion
 pyroelektrisches Element 504
- q**
 quadratisch gemittelte Geschwindigkeit 26
 Quadratwurzelgesetz, *siehe* Kohlrauschs
 Quadratwurzelgesetz
 Quadrupol 668
 Quantelung, *siehe* Quantisierung
 Quantenausbeute 867 ff.
 Quantenchemie, mit dem Computer 422 ff.
 Quantendefekt 371
 Quantenmechanik 263 ff.
 – ab-initio-Verfahren 423 f.
 – Franck-Condon-Prinzip 519
 – Korrespondenzprinzip 307
 – Prinzipien 280 ff.
 – Postulate 293
 – semiempirische Verfahren 423 f.
 – Unbestimmtheitsrelation 290 f.
 Quantenpunkte 310 f.
 Quantenzahlen 306 ff., 332
 – Drehimpuls- 328 ff., 347
 – Haupt- 347 f.
 – magnetische 327
 – Spin- 331, 378
 Quantisierung 265 f., 269
 – als Folge der Schrödinger-Gleichung 279
 – Drehimpuls- 321 f., 324
 – Energieniveaus des Wasserstoffatoms 348
 – Oszillator 265
 – räumliche 330
 – Rotation 321 ff.
 – Teilchen im Kasten 305 f.
 Quartärstruktur
 – von Makromolekülen 698
 – von Peptiden 706
 Quartett, Kernresonanzspektrum 561 f.
 Quarz-Wolfram-Halogenlampe für sichtbares
 Licht 502
 Quasistationarität 855 f.
 quasistationäre Zustände 855 f.
 Quecksilberlichtbogen 502
 Quench-Flow-Verfahren 834 f.
 Quenching 834 f., 870
 Quintett, Kernresonanzspektrum 562
- r**
 radiale Verteilungsfunktion 352 f.
 radiale Wellenfunktion 344 f.
 Radienverhältnisregel 752
 Radikale, ESR-Spektroskopie 583 f.
 Radiofrequenzen 551, 568 f.
 Radius, hydrodynamischer 809
 Ramachandran-Diagramm 707
 Raman-aktive und -inaktive
 Schwingungen 481 f., 492 f., 497 f., 501
 Ramanspektroskopie 468 f.
 – Anti-Stokes-Streuung 468
 – Anti-Stokes- 482
 – Eigenschaften zweiatomiger Moleküle 493
 – experimentelle Anordnung 468 f.
 – induzierte 534
 – Laser 534
 – Stokes-Streuung 468
 – Vergleich mit IR-Spektroskopie 493
 Randbedingungen
 – zyklische 323
 – Teilchen im Kasten 304
 Raoult'sches Gesetz 172 f.
 – mikroskopische Erklärung 172 f.

- Rassen, *siehe* Symmetrierassen
- Rasterkraftmikroskopie (AFM, STM) 314, 678
- Rastersondenmikroskopie (SPM) 314, 942
- Rastertunnelmikroskopie 314 f.
- Raumerfüllung, von Kugelpackungen 752
- Raumgitter 735 f.
- Raumgruppe 440 ff.
- Rayleigh-Jeans-Gesetz 266 f.
- Rayleighlinien 482 f.
- Rayleighstrahlung 468
- Rayleighstreuung 481, 720
- Rayleighverhältnis 720
- Reaktionen
- aktivierungskontrollierte 895
 - autokatalytische 967
 - Besetzungszahlen im Verlauf von 231 f.
 - bimolekulare 852 f.
 - diffusionskontrollierte 893 ff.
 - dritter Ordnung 845
 - enzymkatalysiert 935
 - erster Ordnung 838 ff., 853 ff., 859 ff.
 - exergonisch und endergone 223 f.
 - Freie Enthalpie 221 f.
 - gekoppelte 854 f.
 - heterogen-katalytische 942
 - homogen-katalytische 933
 - kinetisch und thermodynamisch kontrollierte 859
 - maximale Arbeit 118 f.
 - nullter Ordnung 838, 845
 - in der Nähe des Gleichgewichts 845 f.
 - photochemische 966 ff.
 - pseudo-erster Ordnung 839
 - Triebkraft 223
 - unimolekulare 896, 907, 912
 - zusammengesetzte 861
 - zweiter Ordnung 838 ff., 842 ff., 853
 - zwischen Ionen 903 f.
- Reaktionsablauf, direkter und indirekter 911
- Reaktionsdynamik 885 ff.
- zustandsselektive 534,
- Reaktionsenthalpie 69 f., 222 f.
- aus Bildungsenthalpien 73
 - Messung 236
 - Temperaturabhängigkeit 75
- Reaktionsentropie 114
- Reaktionsgeschwindigkeit 835 ff.
- Bildungsgeschwindigkeit 835 f.
 - Geschwindigkeitsgesetz 836 ff.
 - Geschwindigkeitskonstante 837
 - Isoliermethode 838 f.
 - Methode der
 - Anfangsgeschwindigkeiten 839 f.
 - Stoßtheorie 886 f.
 - Temperaturabhängigkeit 849 ff.
 - Verbrauchsgeschwindigkeit 835 f.
 - von Elektrodenreaktionen 924 f.
- Reaktionsisobare, nach van't Hoff 235 f.
- Reaktionskinetik
- Blitzlichtphotolyse 833
 - Echtzeitanalyse 833
 - empirische 831 ff.
 - geschwindigkeitsbestimmender Schritt 857
 - Michaelis-Menten-Mechanismus 935 ff.
 - Photometrie 833
 - quasistationäre Zustände 855 f.
 - Quenching Methode 834
 - stopped-flow-Methode 833
 - Strömungsmethode 833
 - Untersuchung mit Hilfe der Druckänderungen 832
 - Reaktionskoordinate 851 ff.
 - Reaktionslaufzahl 222
 - Reaktionsordnung 838 f.
 - Reaktionsquerschnitt *siehe auch* Stoßquerschnitt, reaktiver
 - zustandsaufgelöster 906
 - Reaktionsquotient
 - allgemeiner 224 ff.
 - von Halbreaktionen 240 f.
 - Reaktionsverlauf, Beobachtung 832 f.
 - Reaktionswahrscheinlichkeit 911
 - reaktiver Stoßquerschnitt 888
 - Real(gas)faktor *siehe* Kompressionsfaktor
 - reale Gase *siehe auch* Gase, reale 24, 29 ff.
 - chemisches Potenzial 132
 - Fugazität 132 f.
 - Innere Energie 79
 - Inversionstemperatur 84 f.
 - kanonische Zustandssumme 612
 - Kompressionsfaktor 30
 - kritische Größen 31
 - reduzierte Variablen 36
 - Virialkoeffizienten 30
 - Zustandsgleichung 638 f.
 - Zwischenmolekulare Wechselwirkungen 29 ff.
 - Rechte-Hand-Regel 322
 - Redoxpaar 239 f.
 - Redoxreaktion, in elektrochemischen Zellen 240
 - Reduktion 240
 - einer Matrix 451
 - Reduktionsmittel, in elektrochemischen Zellen 240
 - reduzierte Masse 343
 - reduzierte Variablen 36
 - Referenzsubstanzen, Kernresonanzspektroskopie 554
 - Referenzzustand, eines Elementes 73
 - Reflexe 742
 - Indizierung 738, 742
 - Ordnung 743
 - Refokussierung 574
 - Reformingprozess 923
 - Regenbogenstreuung 681
 - Region, invertierte 917
 - reguläre Lösung, *siehe* Lösung, reguläre
 - Reibungskoeffizient
 - bei der Sedimentation 723
 - und Molekülgestalt 723
 - Rekombination 864
 - Rekonstruktion 945
 - Rektifikation 188
 - relative Dielektrizitätskonstante, *siehe* Dielektrizitätskonstante, relative
 - Relativgeschwindigkeit, mittlere 797
 - Relaxationseffekt, Ion-Ion-Wechselwirkungen 811
 - Relaxationsmethoden 847
 - Relaxationszeit 572 ff.
 - effektive transversale 573
 - longitudinale (Spin-Gitter) 572 ff.
 - transversale (Spin-Spin) 572 f.
 - Reorganisationsenergie 915
 - repulsive Hyperfläche 910
 - Resonanz 547
 - magnetische 547 ff.
 - Resonanz-Ramanspektroskopie 498 f.
 - Resonanzbedingung, Kernresonanzspektroskopie 551 f.
 - Resonanzenergieübertragung 866 f., 872 f.
 - Resonanzintegral 411
 - Resonator, bei Lasern 535
 - Retinal 527 f., 866 f., 873
 - reversible Prozesse 53 f.
 - Rhodopsin 526
 - rhomboedrisches Kristallsystem 737
 - Ribozyme 935
 - Rice-Ramsperger-Kassel-Modell (RRK-Modell) 892
 - Richtungsquantelung 329 f.
 - Ringintegral 103
 - Ringstrom, bei der NMR-Spektroskopie 553
 - Ritzsches Kombinationsprinzip 342
 - Röntgen-Photoelektronenspektroskopie 408 f., 943
 - Röntgen-Photoemissionspektroskopie 408 f., 943
 - Röntgenbeugung 740 f.
 - an Einkristallen 741 ff.
 - direkte Methode 748
 - Indizierung der Reflexe 738, 742
 - Patterson-Synthese 748
 - Phasenproblem 747 f.
 - systematische Auslöschungen 746
 - Untersuchung von Molekülkristallen 756
 - von Makromolekülen 757 ff.
 - Röntgenemission, eines Metalls 741
 - Röntgenfluoreszenz 944
 - Röntgenkristallographie, biologischer Makromoleküle 757 ff.
 - Röntgenstrahlung 741
 - Beugung 741 f.
 - Erzeugung von 741
 - im elektromagnetischen Spektrum 264
 - Roothaangleichung 423
 - Rotation 7 f., 321 ff.
 - als Symmetrieoperation 440 ff.
 - Energieniveaus 474 ff.
 - in drei Dimensionen 325 ff.
 - in zwei Dimensionen 321 ff.
 - mittlere Energie 635
 - Quantelung 321 f.
 - Schrödinger-Gleichung 322 f.
 - Zentrifugaldehnung 478
 - Zustandssumme 600 f.
 - Rotationsachsen 440 ff.
 - Rotationsenergie
 - mittlere 635
 - unsymmetrischer linearer Kreisel 635
 - Rotationskonstanten 474
 - Rotationsniveaus 474 ff.
 - Boltzmann-Verteilung 480
 - Entartung 477 ff.
 - im linearen Kreisel 475, 477, 480
 - im sphärischen Kreisel 475 ff.
 - im symmetrischen Kreisel 475 ff.

- Rotations-Ramanspektroskopie 481 f.
 – Anti-Stokes-Linien 482
 – Auswahlregeln 481, 506 f.
 – Einfluss der Kernstatistik 483
 – Rayleigh-Streuung 481 f.
 – Stokes-Linien 482
 – Vorhersage eines Spektrums 482
 Rotations-schwingungsspektren 490 ff.
 – Anharmonizitäten 491
 – hochaufgelöste 490
 – Kombinationsdifferenzen 491 f.
 – P-Zweig 491
 – Q-Zweig 491
 – R-Zweig 491
 – Zentrifugaldehnung 491
 – Zweigstruktur 490 f.
 Rotationspektren 471 ff.
 – Auswahlregeln 478 ff.
 – Bindungslängen und Bindungswinkel 472 f.
 – Einfluss der Kernstatistik 483
 – reine 472 ff.
 Rotationspektroskopie des interstellaren Raumes 470
 Rotationsstruktur in Elektronenspektren 522 f.
 Rotationstemperatur 630 f.
 Rotationsterm 475 ff.
 Rotationsübergänge 478 ff.
 – Aussehen 479 f.
 – Auswahlregeln 478 f.
 Rotationsuntergruppe 654
 Rotationszustände 483
 Rotationszustandssumme 600, 628 ff.
 – Berechnung 628
 Rotatoren *siehe auch* Kreisell
 – lineare, sphärische, symmetrische, asymmetrische 475 ff.
 – Klassifizierung 475 ff.
 RRK-Theorie, *siehe*
 Rice-Ramsperger-Kassel-Theorie
 Rumpfelektronen 363, 367, 408, 556, 741
 Rumpforbitale 413
 Russel-Saunders-Kopplungsschema 378 ff.
 Ruthenocenmolekül, Symmetrieelemente 447
 Rydbergkonstante 341 f., 348
 Rydberg-Zustände 372
- S**
 Sackur-Tetrode-Gleichung 613 ff.
 Säkulardeterminante 412
 – des Bändermodells 763
 – nach Hückel 417
 Säkulargleichung 411 f., 417 f.
 SALK *siehe* Linearkombination, symmetrieadaptierte
 Salzbrücke 241 f.
 Salzeffekt, kinetischer 904
 Sattelpunkt 908
 Satz von Hess 71 f.
 Sauerstoff
 – MO-Energieniveaudiagramm 406 f.
 Säurekatalyse 934
 σ -Bindung 393 f.
 SCF-Rechnung 368 f., 423
 Schalen 349, 362
 Scherung 759
 Scherradius 711
 Scherrer 741
 Schichtmicellen 713
 Schmelzen, inkongruentes und kongruentes 196
 Schmelzenthalpie 67 f.
 Schmelzentropie 154
 Schmelzpunkt 144
 – Druckabhängigkeit 150
 – Normal- 144
 – Standard- 144
 Schmelztemperatur 144, 705, 708
 Schockdesorption 946
 Schönflies-System 442 ff.
 Schrödingergleichung 274 ff.
 – bei der Rotation 321 f.
 – Entartung 310
 – für das Wasserstoff-Molekülion 399
 – für Molekülschwingungen 316, 486
 – harmonischer Oszillator 316
 – Mehrelektronenatome 358 ff.
 – Normierungskonstante 277 f.
 – Separation der Variablen 308
 – Teilchen auf dem Ring 321 f.
 – Teilchen auf einer Kugel 325 f.
 – Teilchen im dreidimensionalen Kasten 325 f.
 – Teilchen im Kasten 304 f.
 – Teilchen im zweidimensionalen Kasten 308 f.
 – wasserstoffähnlicher Atome 343
 – zeitabhängiger Prozesse 275
 – zeitunabhängige 274
 – zyklische Randbedingung 323
 Schulze-Hardy-Regel 712
 schwarzer Strahler 265 f.
 – Energieverteilung 265
 Schwingquarzwage 946
 Schwingungen 315 ff.
 – Beitrag zur Wärmekapazität 637
 – Deformations- 494 f.
 – eines Dipols 469
 – Energieniveaus 316 f.
 – Freiheitsgrade 494 f.
 – harmonische 315 f.
 – Infrarot-Aktivität 500
 – Kraftkonstante 315
 – Linearkombinationen von 493
 – mittlere Energie 635 f.
 – Normalschwingungen 494 ff.
 – Nullpunktenergie 316, 392
 – Raman-Aktivität 492, 497 f., 501
 – Valenz- 494 f.
 – vielatomiger Moleküle 494 ff.
 – zweiatomiger Moleküle 485 f.
 Schwingungsenergie, mittlere 636
 Schwingungsfreiheitsgrade 494 f.
 Schwingungsniveaus 315 f.
 Schwingungs-Ramanspektren 592 f.
 – Ausschlussregeln 498 f.
 – Auswahlregeln 507
 – Ergänzung zu IR-Spektren 493
 – mehratomiger Moleküle 497 ff.
 – O-, Q-, S-Zweig 492
 Schwingungsprogression 519
 Schwingungsspektren
 – Auswahlregeln 529 ff.
 – Grundübergang 509, 517
 – Zweige 512 f.
- Schwingungsspektroskopie des interstellaren Raumes 470
 Schwingungsstruktur, im elektronischen Spektrum 513 f., 519
 Schwingungstemperatur 630, 633
 Schwingungsterm 486
 Schwingungsübergänge
 – Auswahlregeln 486 f.
 – infrarot-aktive 486 f.
 – infrarot-inaktive 487
 Schwingungswellenzahl 486, 496, 633
 Schwingungszustandssumme 632
 – Berechnung 632
 – harmonische Näherung 632
 Sedimentation 722 f.
 Sedimentationsgeschwindigkeit 724
 Sedimentationsgleichgewicht 725
 Sedimentationskonstante 723 f.
 Sehvorgang 526 ff.
 seitenzentrierte Elementarzellen *siehe* Elementarzellen, seitenzentrierte
 Sekundärelektronen, *siehe* Auger-Elektronen
 Sekundärstruktur, von Makromolekülen 698
 Sekunde 11
 Selbstorganisation 709 ff.
 selbstorganisierende Monolagen (SAMs) 715 f.
 selbstkonsistente Orbitale 368 f.
 Selektivitätsfilter 812
 Selektivitätskoeffizient, einer Elektrode 252
 self-consistent-field-Rechnung, *siehe* SCF-Rechnung
 semiempirische Verfahren 423 f.
 semipermeable Membran 182
 Separation der Variablen 308, 326, 343
 Separation von Bewegungen 382
 Sequenzierung, von Polypeptiden 698
 SI-Einheiten 11 f.
 sichtbares Licht, *siehe* Licht, sichtbares
 Siedediagramm 188
 – binäres System 196
 – Hexan/Nitrobenzol 190
 – Wasser/Nicotin 193
 – Wasser/Triethylamin 193
 Sieden 144
 Siedepunkt 144
 – Druckabhängigkeit 155
 – Normal- 144
 – Standard- 144
 Siedepunktserhöhung 179 f.
 Siedetemperatur 144
 Siemens 806
 Singulett, Kernresonanzspektrum 561 f.
 Singulett-Singulett-Energietransfer 867
 Singulettzustände 372 f., 868
 Singulettterm 378
 Skalarprodukt 383, 390
 smektische Phase 197
 Soliton 705
 Solvation 68
 Solvationsenthalpie 68
 – Freie 123
 Solvensbeitrag, *siehe* Kernresonanzspektroskopie, Abschirmung
 Sonne, als Ball aus idealem Gas 799
 s-Orbitale 349 f.
 Spaltenvektoren 418
 Spannungsreihe, elektrochemische 248 ff.

- Speicherzellen, elektrische 922
 Spektrallinien 341 ff.
 – Breite 369 ff., 573
 – Depolarisationsgrad 520
 – Dopplereffekt 369
 – Intensitäten 514
 – und Übergangsdipolmoment 469 f.
 Spektrometer 502 ff.
 – Aufbau des NMR-Spektrometers 551 f.
 Spektroskopie
 – Auger-Elektronen- 944
 – Auswahlregeln 356 f.
 – Blitzlichtphotolyse 833
 – CD-Spektren 526
 – Einzelmolekül- 532
 – Elektronenspinresonanz- 551, 583 f.
 – Grundlagen 468 ff.
 – im Femtosekundenbereich 901 f.
 – Kernresonanz- 551 ff.
 – Korrelationsdiagramm für Zweielektronensystem 380
 – Magnetresonanzspektroskopie 550
 – Photoelektronen- 408 f.
 – Raman- 481 f.
 – Röntgen-Photoemissions-spektroskopie 943
 – Röntgenfluoreszenzmethoden 944
 – Rotations- 471 ff.
 – Schwingungs- 485 ff.
 – Symmetrien 449 ff.
 – Terme 342
 – Ultraviolett-Photoemissions-spektroskopie 943
 – von komplexen Atomen 369 f.
 – von Sternen 381
 – zeitaufgelöste 834
 Spektrum
 – allgemeine Merkmale 468 ff.
 – Atom- 269, 341 ff.
 – elektromagnetisches, Übersicht 264
 – Elektronen- 515 ff.
 – im Frequenzbereich 589
 – im Zeitbereich 589
 – Molekül- 269
 spezifische Leitfähigkeit 806
 sphärischer Kreisel *siehe* Kreisel
 Spiegelebene, *siehe* Symmetrieebene
 Spiegelung, als Symmetrieebene 440
 Spin 331 f.
 Spin-Bahn-Kopplung 373 ff., 531
 Spin-Bahn-Kopplungskonstante 375
 Spin-Bahn-Wechselwirkung 375
 Spin-Echo 574 ff.
 Spin-Spin-Kopplung 559 ff.
 Spindichte, bei der Elektronenspinresonanzspektroskopie 586
 Spindrehimpuls 331 f.
 Spinkorrelation 364
 Spinpaarung, in der VB-Theorie 393 f.
 Spinrelaxation 571 ff.
 Spinsonden 588
 Spinsystem, heteroatomares und homoatomares 567
 spontane Emission, *siehe* Emission, spontane
 spontane Keimbildung 690
 Spontanität, von Prozessen 98
 Sprungmethoden *siehe* Relaxationsmethoden
 SQUID 772
- Stabilität
 – von Phasen 141 f.
 – von Polymeren 703 f.
 Standard-Elektrodenpotenzial *siehe auch* Potenzial 245 ff.
 Standard-Wasserstoffelektrode 246
 Standardbedingungen
 – SATP (Standard-Umgebungsbedingungen) 25
 – STP (Standardbedingungen) 25
 Standarddruck 5
 Standardenthalpie 67 ff.
 Standardentropie 114
 Standardschmelzpunkt 144
 Standardsiedepunkt 144
 Standardzellspannung *siehe auch* Potenzial 244, 247
 – und Freie Standardenthalpie 244
 Standardzustände 67, 199
 – biologische 202
 – einer Substanz 67
 Standardzustandssumme, molare 644 f.
 Starkeffekt 477
 Starkmodulation 478
 starrer Rotator, *siehe* Kreisel
 statistisches Gewicht 596 f.
 statistisches Knäuel 699 ff.
 Steinsalzstruktur 573
 sterischer Faktor
 – Abschätzung mit Hilfe der Eyring-Gleichung 890 ff.
 Stern-Gerlach-Versuch 330
 Stern-Modell 918
 Stern-Volmer-Diagramm 870
 Stern-Volmer-Gleichung 870 f.
 Sterne, Spektroskopie von 381
 Stickstoff
 – biochemische Reaktivität 415 f.
 – MO-Energieniveaudiagramm 406
 – Stoßdichte 887
 – VB-Theorie 394
 Stickstoffmonoxid, MO-Energieniveaudiagramm 415
 Stickstoff(V)oxid, Zersetzungsreaktion 832
 Stickstoffflaser 539
 stimulierte Emission, *siehe* Emission, induzierte
 Stirling-Formel 598
 Stirling'sche Näherung 598
 STM *siehe* Rastertunnelmikroskopie
 stöchiometrischer Koeffizient 226
 Stoffbilanzgleichung 897 f.
 Stoffmenge 5
 Stokes-Einstein-Gleichung 816 f.
 Stokes-Linien 482 f.
 Stokes-Streuung 448
 Stokessche Gleichung 723
 Stopped-Flow-Methode 833
 Stoßdesaktivierung 371
 Stoßdichte 886 f.
 Stoßdurchmesser 798
 Stöße, elastische 792
 – harter Kugeln 681
 – ideales Gas 792
 – Mindestenergie 887 f.
 – molekulare, Dynamik von 905 ff.
 – reaktive 885 ff., 905 f.
 – strukturloser Teilchen 900
- Stoßfrequenz 800
 Stoßhäufigkeit 798 f.
 Stoßlebensdauer 371
 Stoßparameter, bei Molekularstrahlexperimenten 680
 Stoßquerschnitt 886 f.
 – ideales Gas 798 f.
 – reaktiver 888
 Stoßrichtung 909
 Stoßtheorie 886 f.
 – Reaktionsgeschwindigkeit 838 f.
 Stoßzahl 886
 Stoßzylinder 798
 Strahlung
 – eines schwarzen Körpers 265 f.
 – elektromagnetische 11
 – K- 741
 – Kohärenz elektromagnetischer 535
 – monochromatische und polychromatische 502
 – Monochromator 469, 503
 – Teilchencharakter 270 f.
 – Zusammenhang zwischen Farbe, Frequenz und Energie 513
 strahlungslose Desaktivierung, *siehe* Desaktivierung, elektronisch angeregter Zustände
 Strahlungsquellen
 – Absorptionsspektrometer 486 f., 502
 – Deuteriumlampe 502
 – Glibar 502
 – monochromatische 502
 – Nernst-Stift für Infrarotlicht 502
 – Quecksilberlichtbogen für Infrarotlicht 502
 – Quarz-Wolfram-Halogenlampe für sichtbares Licht 502
 – Xenonlampe 502
 Streufaktoren 744
 Streuintensität 681 f.
 – Laser-Lichtstreuung 720 f.
 Streuquerschnitt, differentieller 680
 Streutheorie, quantenmechanische 911 f.
 Streuung
 – Glorienstreuung 681
 – Regenbogenstreuung 681
 – von Molekularstrahlen 680
 Streuwinkel, Einfluss auf Streufaktor 744
 Strom, elektrischer 11, 47
 Stromdichte
 – anodische und kathodische 925
 Stromschlüssel, *siehe* Salzbrücke
 Strömung, molekulare 691
 Strömungsmethode 833
 Struktur
 – allgemein 697 ff., 750 ff.
 – Cäsiumchlorid- 753
 – Hierarchie 698 f.
 – ionische 753
 – Metalle 750 f.
 – Steinsalz- 753
 – von Makromolekülen 698 f.
 Struktur-Wirkungs-Beziehungen, quantitative (QSAR) 676
 Struktureinheit 736
 Strukturfaktor 744 ff.
 Strukturverfeinerung 749

- Stufen 942
 Sublimationsdruck 144
 Sublimationsdruckkurve 156
 Sublimationsenthalpie 68
 Substanz
 – grenzflächenaktive 687
 – oberflächenaktive 687
 Substrate 935, 942
 Superposition 287 f., 394 ff.
 – lineare, von Wellenfunktionen 287 f.
 Suprafluide 148
 Supraleiter 762(D), 774 f.
 Suszeptibilität, magnetische 558, 771 ff.
 Symmetrie
 – Bedeutung bei der
 Orbitalüberlappung 449 ff., 475 ff.
 – der Normalschwingungen 493 f., 499 f.
 – einer Kugel 439
 – Spektroskopie 449 ff.
 – und Dipolmoment 658
 – von Molekülen 439 ff.
 Symmetrieachse, *siehe* Rotationsachse
 Symmetriezeichnungen 449 ff.
 Symmetrieebene *auch* Spiegelebenen 457
 Symmetrieelemente 439 ff.
 – der meso-Weinsäure 442
 – des Allen 445
 – des B(OH)₃-Moleküls 444
 – des Benzolmoleküls 440
 – des BF₃-Moleküls 444
 – des Buckminsterfullerenmoleküls 446
 – des Chinolinmoleküls 442
 – des Ethanmoleküls 445
 – des Ethenmoleküls 444
 – des Ferrocen 447
 – des H₂O-Moleküls 440 f.
 – des H₂O₂-Moleküls 444
 – des Kohlendioxidmoleküls 444
 – des Methanmoleküls 441
 – des NH₃-Moleküls 440
 – des Phosphorpentachlorids 444
 – des Ruthenocenmoleküls 447
 – des Tetrachloroaurations 445
 – des Tetraphenylmethans 446
 – des *trans*-(1,2)-Dichloethenmoleküls 444
 – eines Atoms 447
 – eines Würfels 439
 – essentielle 737
 Symmetriegruppen, *siehe* Punktgruppen
 Symmetrieoperationen 439 ff., 454 f., 737
 – Darstellung 449 f.
 – Einfluss auf das Überlappungsintegral 455
 – Einteilung in Klassen 452
 – in den Charaktertafeln 451 f.
 Symmetrierassen 453
 – von Normalschwingungen 500
 – von Orbitalen 455
 Symmetriezahl 630 f.
 symmetrischer Kreisel *siehe* Kreisel
 Synchrotronstreuung 502
 Synchrotronstrahlung 502, 741
 System 45
 – abgeschlossenes 45
 – adiabatisches 47
 – diathermisches 47
 – geschlossenes 45
 – offenes 45

t
 t_{2g}-Orbitale 523
 Taumeln 495
 Taylor-Reihe 485, 691
 Teilchen im Kasten 304 ff.
 Temkin-Isotherme 952
 Temperatur 21 f.
 – kritische 32, 144 f.
 – kritische Mischung- 191 f.
 – thermodynamische 5, 105 f., 599
 Temperaturskala
 – absolute 5
 – Celsius- 6
 – nach Kelvin 5
 – thermodynamische 5, 105
 Temperatursprung, Auswirkung auf
 Gleichgewicht 847 f.
 Temperatursprungexperimente 848
 temporäres Dipolmoment, *siehe*
 Dipolmoment, temporäres
 Terme 342
 – Niveaus 374 ff.
 Termsymbole
 – Atomspektroskopie 376 ff.
 – Elektronenspektren 516 ff.
 Tertiärstruktur
 – von Makromolekülen 699
 – von Peptiden 707
 Tesla, Einheit 548
 Tetrachloroaurat-Ion,
 Symmetrieelemente 445
 Tetraeder, Symmetrie 441, 446
 tetraedrische Gruppen, *siehe* Punktgruppen
 tetragonales Kristallsystem 737
 Tetramethylsilan, als Referenz Substanz 554
 T³-Gesetz 112 ff.
 theoretische Bodenzahl 188
 thermischer Ausdehnungskoeffizient 79 f.
 Thermochemie 66 ff.
 thermochemische Gleichung 69
 Thermodynamik 45
 – Fundamentalgleichung 124 f., 166
 – statistische 595 ff., 625 ff.
 – Zustandssumme 599 ff., 635 ff.
 thermodynamische Kraft 814 ff.
 thermodynamische Zustandsgleichung 126
 thermodynamischer Kreisprozess 103 ff.
 Thermometer, Funktionsweise 22
 Thermoplast 703
 TMS, *siehe* Tetramethylsilan
 Torr 20
 Torsionswinkel, zwischen
 Peptideinheiten 706
 totales Differential 76 f.
 Trägheitsmoment 295, 321 f., 471 ff.
 – bei H₂O 472
 – Einfluss der Zentrifugaldehnung 478
 – eines Moleküls 471 ff.
 Trägheitsradius 700 ff., 721
 Trajektorie 274, 294, 908 ff.
 – klassische 911
 – von molekularen Stößen 908 ff.
 Translation 303 f.
 – Beitrag zur Wärmekapazität 638
 – mittlere Energie 635
 Translationsenergie, mittlere 635
 Transmission 515
 Transmissionskoeffizient 899

 Transporteigenschaften 791 ff.
 – idealer Gase 804, 822 f.
 – von Gasen 803
 Transporte
 – aktive und passive 812
 – durch eine biologische Membran 811 f.
 transversale Relaxationszeit *siehe auch*
 Relaxationszeit, transversale 572 f.
 Treibhausgase 496 f.
 Triebkraft von Reaktionen 223
 triklines Kristallsystem 736 f.
 Tripelpunkt 145 f.
 – von Wasser 147
 Triplett, im Kernresonanzspektrum 561 f.
 Triplett-Triplett-Energietransfer 867
 Triplettterm 378
 Triplettzustände 372 f.
 Trockeneis 147
 Tropfen 683
 Troposphäre 28
 Tunneleffekt 312 f.
 Tunnelprozess 914 f.
 Tunnelstrom 314 f.
 Tunnelwahrscheinlichkeit 312 f.

u
 Übergänge 356 ff.
 – Auswahlregeln 356
 – Charge-Transfer- 524
 – d-d-Übergänge 518, 523 f.
 – elektronische 356, 513 ff.
 – erlaubte 356, 462
 – Franck-Condon-Prinzip 519 ff., 530 f.
 – λ- 157 f.
 – NMR- 551 f.
 – π* ← π- und π* ← n- 524 f., 527
 – spektroskopische 269
 – verbotene 356
 – vertikale 519
 – vibronische 518
 – von Elektronen 380, 513 ff.
 Übergangsdipolmoment 462, 469
 – bei Molekülschwingungen 505 f.
 – bei Rotationszuständen 479 f.
 – Einfluss auf Franck-Condon-Faktoren 521
 – Einfluss auf Spektren 469
 – Symmetrie 462
 Übergangsenthalpien 68
 Übergangsintensitäten 77 ff., 561 ff.
 Übergangswahrscheinlichkeit *auch*
 Gesamtübergangswahrscheinlichkeit
 Übergangszustand 851, 898 ff.
 Überhitzung 690
 überkritisches Fluid 32, 148 f.
 überkritisches Kohlendioxid 148 f.
 Überlagerung von Wellenfunktionen, *siehe*
 Superposition
 Überlappung, komplette Vernachlässigung
 differenzieller, *siehe* CNDO 424
 Überlappungsdichte 400
 Überlappungsintegral 405 f.
 – Einfluss von Symmetrieoperationen 456
 Übersättigung 690
 Überschalldüse und -strahl 691 f.
 Überspannung 919 ff.
 Ultrahochvakuumapparaturen 943 f.
 Ultraviolettbereich *auch* UV-Bereich 264

- Ultraviolett-
 Photoemissionsspektroskopie 408, 943
 Ultraviolettkatastrophe 266
 Ultrazentrifugation 723 f.
 Umgebung 45
 Umwandlung, innere 533
 unimolekulare Reaktion 852, 859 ff., 892
 Unbestimmtheitsrelation, *siehe*
 Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation
 Unterkühlung 690
 Unterschalen 349
 UPS, *siehe* Ultraviolett-
 Photoelektronenspektroskopie
 UVPES, *siehe* Ultraviolett-
 Photoelektronenspektroskopie
- V**
 Vakuumpermeabilität 556, 771
 Valenzband 764
 Valenzbindungstheorie 392 ff.
 – homoatomare zweiatomige Moleküle 393 f.
 – vielatomige Moleküle 394 f.
 Valenzelektronen 363
 Valenzorbitale 416
 Valenzschwingungen 494 f.
 – antisymmetrische 494
 – bei mehratomigen Molekülen 494
 – symmetrische 494
 van't-Hoff-Gleichung 182, 235
 van't-Hoff'sche Reaktionsisobare 235
 van-der-Waals'sche Gleichung 32 ff.
 – reduzierte Form 34
 van-der-Waals-Koeffizienten 33
 van-der-Waals-Kräfte 666 ff.
 van-der-Waals-Moleküle 682
 van-der-Waals-Schleifen 35
 Variationsprinzip 411 ff.
 VB-Theorie, *siehe* Valenzbindungstheorie
 Vektoren 389 f.
 – der Magnetisierung 569 f.
 Vektormodell 324, 330 f.
 Vektorprodukt oder Kreuzprodukt 390
 Verbrauchsgeschwindigkeit 835 f.
 Verbreiterung von Spektrallinien *siehe*
 Doppler-Verbreiterung
 Verbrennungsenthalpie 70
 Verbrennungskalorimeter, adiabatisches 59
 Verdampfungsenthalpie 67 f., 109
 Verdampfungsentropie 109, 154
 Verschiebungspolarisation 663
 Verteilungen 596 ff.
 – kanonische 612
 Verteilungsfunktion, radiale 352 f., 640 ff.
 vertikaler Übergang, *siehe* Übergang, vertikaler
 vibronische Übergänge, *siehe* Übergänge,
 vibronische
 Vierkreisdiffraktometer 742
 Virial 643
 Virialgleichung 30 f., 34
 Virialkoeffizienten
 – osmotischer 30, 183
 – zweiter und dritter 31
 – zweiter und dritter, statistische
 Herleitung 638
 Virialtheorem 321
 Viskosität 725 f., 802 ff.
 – idealer Gase 804, 824
 – von Flüssigkeiten 805 f.
- Viskositätskoeffizient 803
 Volumen
 – kritisches 32
 – molares und van-der-Waals-Gleichung 32
 – partielles molares 164 f.
 – partielles molares, Bestimmung 165
 Volumenänderung, beim
 Phasenübergang 153
 Volumenarbeit 50 ff.
 Vulkankurve 959
- W**
 Wachstum, von festen Oberflächen 942 ff.
 Wahrscheinlichkeitsamplitude 276
 Wahrscheinlichkeitsbeziehung von
 Sayre 748
 Wahrscheinlichkeitsdichte 276, 281 f., 347
 Wärme 46, 77
 – als termische Bewegung 46 f.
 Wärmekapazität 56 f., 636 f.
 – bei konstantem Druck 61
 – bei konstantem Volumen 56, 267
 – bei tiefen Temperaturen 268
 – Beitrag der Rotation 637
 – Beitrag der Schwingung 637
 – Beitrag der Translation 637
 – Differenz von C_p und C_V 86
 – eines Festkörpers 267
 – Freiheitsgrade 637 ff.
 – gesamte 638
 – ideales Gas 637
 – molare 56, 61
 – molare eines Gases 638
 – nach Debye 268
 – nach Einstein 268
 – spezifische 56
 – statistische Betrachtung 636 f.
 – Temperaturabhängigkeit 80
 – von zweiatomigen Molekülen 637
 Wärmekraftmaschine 97, 104
 Wärmeleitfähigkeit, idealer Gase 791 ff., 804
 Wärmeleitfähigkeitskoeffizient 803
 Wärmethorem, *siehe* Nernst'sches
 Wärmethorem
 Wärmeübergänge 55 ff.
 Wasser
 – Dampfdruck 147
 – kritischer Punkt 144
 – Phasendiagramm 147
 – Protolysegleichgewicht 848
 – Tripelpunkt 147
 – VB-Beschreibung 394 f.
 Wasserdampfdestillation 190
 Wassermolekül, Symmetrieelemente 440 f.
 Wasserstoff
 – Atomspektrum 366
 – *ortho*- und *para*- 506
 wasserstoffähnliche Atome 365 ff.
 Wasserstoffatom
 – Energieniveaus 342
 – Rydbergkonstante 341
 Wasserstoffbrückenbindung 672 f.
 Wasserstoffelektrode, Standard- 246
 Wasserstoffmolekül 393 f.
 Wasserstoff-Molekülion 399 ff.
 Wasserstoffperoxidmolekül,
 Symmetrieelemente 444
 Watt, Einheit 12
- Wechselwirkungen
 – abstoßende 678 f.
 – anziehende, Zusammenfassung 674 f.
 – Coulomb- 6
 – Dipol-Dipol 666 ff., 691
 – Dipol-induzierter Dipol 671 f.
 – Dipol-Punktladung 667
 – Dispersions- 671 f.
 – hydrophile und hydrophobe 673 f.
 – in Flüssigkeiten 640 ff.
 – Ionen 811
 – Keesom- 669
 – London'sche 671
 – lyophile und lyophobe 710
 – zwischen Multipolen 668
 – zwischenmolekulare 29 ff., 666 ff.
 Wechselwirkungsenergie
 – bei Elektronen 383
 – Dipol-Dipol- 668 f.
 – Dipol-induzierter Dipol 671
 – induzierter Dipol-induzierter Dipol 671 f.
 – zwischen Multipolen 668 f.
 Wechselzahl 937
 Wegfunktionen 76
 Weglänge, mittlere freie 798 f.
 Welle-Teilchen-Dualismus 270 ff.
 Welle 263 f.
 – harmonische 263 f.
 – Interferenz 272, 740 f.
 Wellencharakter von Teilchen 272 f.
 Wellenfunktion 274 ff.
 – Bedingungen 280
 – Betragquadrat 276
 – Bornsche Interpretation 276 f.
 – des Wasserstoffmoleküls 393 f.
 – Entartung 310
 – harmonischer Oszillator 316 f.
 – Impuls 287
 – Interpretation 277
 – Linearkombinationen 377
 – Normierung 277 ff.
 – orthogonale 286
 – Quantisierung 279 f.
 – radiale 343 f.
 – Real- und Imaginärteil 285
 – Separation der Variablen 308 f., 326
 – Superposition 287 f.
 – Teilchen auf einem Ring 321 f.
 – Teilchen auf einer Kugel 325 f.
 – Teilchen im dreidimensionalen Kasten 310
 – Teilchen im Kasten 304 f.
 – Teilchen im zweidimensionalen
 Kasten 308 f.
 – Unbestimmtheitsrelation 290 ff
 – Wasserstoff-ähnliche Atome 345
 – zyklische Randbedingung 323
 Wellenlänge 10, 264
 – thermische 604
 Wellenpaket 290
 Wellenzahl 10, 264
 Wetter 28 f.
 Widerstand, elektrischer 762, 806
 Winkelgeschwindigkeit 295
 Wirkstoffdesign 675 ff.
 Wirkungsgrad 104 f.
 – nach Carnot 104 ff.
 – von Wärmekraftmaschinen 106
 Würfel, Symmetrie 439 ff.

- x**
 Xenonlampe, als Strahlungsquelle 502
 XPES, *siehe* Röntgen-
 Photoelektronenspektroskopie
 XPS *siehe* Röntgen-
 Photoelektronenspektroskopie
- y**
 YAG-Laser 776 f.
 Yttrium-Aluminium-Granat-Laser, *siehe* YAG-
 Laser
- z**
 Zeemaneffekt 386
 Zeitkonstante 842
 Zelle
 – biologische 184 f.
 – elektrochemische 239 ff.
 – elektrolytische 239
 – galvanische 239 ff., 921 f.
 – Schreibweise 242
 Zellpotenzial 242 ff.
 – Konzentrationszelle 241
 – Temperaturabhängigkeit 250 f.
 – und Reaktionsquotient 240
 – unter Belastung 921 f.
 Zellreaktion 242
 Zellspannung, *siehe* Zellpotenzial
 Zelltypen 241 f.
 Zellüberspannung 920
 Zentrifugaldehnung, bei der Rotation 478
 Zentrifugaldehnungskonstante 478
 Zentrifugalkraft, Wirkung auf ein
 Molekül 478
 Zentrum, aktives 935
 Zeolithe 957, 961
 Zerlegung eines direkten Produkts 457
 Zersetzungsreaktion, von
 Stickstoff(V)oxid 832
 Zimm–Bragg-Modell 649
 Zirkulardichroismus (CD) 525 f.
 Zustände
 – angeregter 528 ff.
 – angeregter, metastabil 534
 – Desaktivierung 528
 – elektronisch angeregter 633, 872
 – gebundene 348
 – Kontinuums- 348
 – Rydberg- 372
 – Singulett- 372 f.
 – Triplett- 372 f.
 – ungebundene 348
 zustandsaufgelöste
 Geschwindigkeitskonstante 906
 zustandsaufgelöster
 Reaktionsquerschnitt 906
 Zustandsdichte 265 f.
 Zustandsfunktionen 48, 76 ff.
 Zustandsgleichungen 34, 638 f.
 – Herleitung aus der Zustandssumme 626,
 638 f.
 – idealer Gase 19, 23 ff.
 – thermodynamische 126 f.
 – von realen Gasen 638 ff.
 Zustandssumme 599 ff.
 – Beitrag der Rotation 628 f.
 – Beitrag der Schwingung 632 f.
 – Beitrag der Translation 628
 – Berechnung aus spektroskopischen
 Daten 634
 – Berechnung der Besetzungszahlen 644 ff.
 – Berechnung von
 Gleichgewichtskonstanten 644 ff.
 – der Translation 605
 – einer äquidistanten Leiter von
 Energieniveaus 601
 – eines Teilchens im Kasten 603 f.
 – eines Zweiniveausystems 606
 – elektronischer Beitrag 633 f.
 – Freiheitsgrade 604, 627 ff.
 – für unabhängige Moleküle 613
 – für ununterscheidbare und unterscheidbare
 Moleküle 614
 – harmonischer Oszillator 601, 609
 – Interpretation 600
 – kanonische 610 f.
 – molare 627, 644
 – molekulare 599 ff., 627 ff.
 – Näherungen und Faktorisierungen 603
 Zweigstruktur 490 f.
 Zweikomponentensysteme 185 ff.
 Zweiter Hauptsatz 97 ff.
 – Verbindung mit Erstem Hauptsatz 124
 Zwischenprodukte 854 f.
 zyklische Randbedingung 323
 Zylinderkoordinaten 323