1159

# Stichwortverzeichnis

### Α

A<sub>2</sub>-System 654–656 abgeleitete Einheiten 5, 1123 abgeleitete Funktionen 695, 696, 736 abgeplattet 558, 559, 563 abgeschirmte Kernladung 418 abgeschirmtes Coulomb-Potenzial 241 abgeschlossene Schale 417 abgeschlossenes System 44 *Ab-initio*-Verfahren 488, 489

- erste 27, 28

Ableitung

- gewöhnliche 27, 28

Abkühlungskurve 159, 225

- partielle 56, 57
- zweite 27, 28

Ableitungsregeln 27, 28, 56, 57 Abschirmung 241, 417–419, 643, 645–648

Abschirmungskonstante 417, 418, 643, 645–648

- diamagnetischer Beitrag 645, 646
- lokaler Beitrag 643, 645, 646
- molekularer Beitrag 645, 647, 648
- Nachbargruppenbeitrag 645, 647, 648
- paramagnetischer Beitrag 645, 646
- Solvensbeitrag (Lösungsmittel)645, 648

Absorbanz 319, 320 Absorbanz 545, 592 Absorption 541–543, 548, 549, 592,

605–607, 887–889, 989, 990 – elektronische 592, 605–607

- im angeregten Zustand 989, 990
- induzierte 542, 543
- Intensität (NMR) 639, 640
- Netto- 541

Absorptionsintensität (NMR) 639, 640

Absorptionskoeffizient 544–546, 601

- integraler 545, 546

548, 549, 947

- molarer 544, 545, 601

Absorptionslinie, LorentzAbsorptionsspektrometer 548, 549
Absorptionsspektroskopie 541,

Absorptionsspektrum 592, 994, 995

abstoßende Wechselwirkung 780, 781, 868

Abstraktionsreaktion 988 achirales Molekül 514 Actinoide (Actinide) 421 Additionsreaktion 980–982, 988 Adenosindiphosphat (ADP) 152, 153, 272–274, 302, 303

Adenosintriphosphat (ATP) 152, 153, 272–274, 302, 303 Adiabate 87, 107, 148 adiabatische Expansion 81–87,

106–109 adiabatische Wand 45

adiabatischer Prozess 85–87 adiabatisches Bombenkalorimeter 54, 55

adiabatisches

Verbrennungskalorimeter 60 ADP 152, 153, 272–274, 302, 303 Adsorbat 1068–1070 Adsorbens 1068–1070 Adsorption

- dissoziative 1080, 1085, 1088
- Geschwindigkeit 1076–1080, 1085–1088, 1090–1092
- Grundlagen 1067–1069
   Adsorptionsenthalpie, isostere 1080–1082

Adsorptionsisotherme 1078–1085

Adsorptionswahrscheinlichkeit 1086, 1087

AEDANS 994, 995 Ähnlichkeitstransformation 485 Änderungen

- adiabatische 85-87
- der Enthalpie 81
- der Entropie 103, 104
- der Freien Enthalpie 137, 138der Inneren Energie 49, 50, 57,
- der Standardenthalpie 65–68
- reversible 52

Äquipartitionstheorem 48, 791 äquivalente Kerne 654, 655 Äquivalenz von Wärme und Arbeit

Aerosol 815, 816 AES 1073, 1074

äußere Helmholtz-Schicht (AHS) 1097

AFM 781, 782, 881, 1073 Aggregation 762, 815 Aggregationsgleichgewicht 821

AHS 1097 Akkomodation 1069 Akkumulator, Blei- 1107 aktives Zentrum (Enzym) 984 aktivierter Komplex 967, 968, 1013, 1027–1029, 1031–1033, 1100

- Aktivierungsparameter 1031–1033
- Konzentration 1029
- Theorie des 1013, 1027, 1028, 1099
- Zerfallsgeschwindigkeit 1028, 1029

Aktivierungsenergie 965–969, 976, 977, 984, 1014, 1027, 1028, 1031, 1032

- Innere 1031, 1032
- negative 967, 976, 977

*Physikalische Chemie*, 6. Auflage. Peter W. Atkins, Julio de Paula und James J. Keeler. © 2022 WILEY-VCH GmbH. Published 2022 by WILEY-VCH GmbH.



# **1160** *Stichwortverzeichnis*

Aktivierungsenthalpie 1031, 1032 - Freie 1031-1033, 1050, 1052, 1053, 1099, 1100

Aktivierungsentropie 1031, 1032 aktivierungskontrollierte Reaktion 1013, 1023

- Geschwindigkeitskonstante 1023 Aktivität
- als Funktion der Molalität 235
- Definition 233
- des gelösten Stoffs 233-235
- des Lösungsmittels 233
- ideal verdünnte Lösungen 234
- Ionen in Lösung 237
- katalytische 1092, 1093
- Messung 234, 235
- Näherungen 268, 269
- reale Lösungen 234, 235
- reguläre Lösungen 236, 237
- und Standardzustände 240
- Aktivitätskoeffizient
- Davies-Gleichung 239, 240
- Debye-Hückel-Grenzgesetz 238
- Definition 233-235
- Messung 291
- mittlerer 237–239
- akzeptable Wellenfunktion 322, 323, 335, 340, 341

Akzeptorband 878

Akzeptorniveau 878

Alanin, Symmetrie 514

Allotrop 158

Alpert, D. 5 α-Helix 783

Amidgruppe

- Dipolmoment 764, 765
- MO-Beschreibung 502
- Ammoniak
- SALK 523, 531, 532
- Symmetrie 506, 507
- Symmetriezahl 711 Ampere (Einheit) 55, 1123

amphipathisch 819

Amplitude 308

- Wahrscheinlichkeits- 319

Ampère, A.-M. 55, 1123

anaerobe Glykolyse 93

Analyse, thermische 159 Anfangsgeschwindigkeiten,

Methode der 951-953 angeregter Zustand 605, 606, 609

- Absorption 989, 990
- Desaktivierung 605, 606, 991-994

- metastabiler 609
- Molekül 605, 606

Ångström (Einheit) 1122

Ångström, A.J. 1122

anharmonisch 571

anharmonische Schwingung 572,

anharmonischer (Morse-)Oszillator 571-573, 750, 756

Anharmonizität 571–573

Anharmonizitätskonstante 572. 573

anisotrope Polarisierbarkeit 564, 766

Anisotropie 228, 658

Annäherung an das Gleichgewicht 961-964

Anode 281

anodische Stromdichte 1098, 1099, 1102

antibindendes Orbital 460, 461, 464

- Energie 461, 476

antiferromagnetisch 884

Antiferromagnetismus 884

antiparallele Spins 428

Anti-Stokes-Linien 541, 552, 565, 577, 578

Anti-Stokes-Streuung 541

antisymmetrische Streckschwingung

antisymmetrische Wellenfunktion 417

Anzahl der Freiheitsgrade 162 Anzahl der Komponenten 162 Anzahl der Mikrozustände 104

Anzahl der Phasen 158, 162 Anzahl der Schwingungsmoden

anziehende Wechselwirkung 868

aperiodischer Kristall 841 Arbeit

- adiabatische Expansions- 85

- als Form der Energieübertragung 46, 47
- Austritts- 314, 315
- Definition 44, 45
- elektrische 51, 241
- Expansions- 50-52
- freie Expansion 52
- isotherme, reversible Expansion 53. 54
- Längenausdehnung 51
- maximale 54, 126, 127

- maximale Nichtvolumen- 129, 130
- maximale Volumen- 54
- mechanische 50
- molekulare Interpretation 47
- Nichtvolumen- 51
- Oberflächen- 51, 793, 794
- reversible Expansion 53
- Volumen- 50-52
- Vorzeichenkonvention 50
- zusätzliche 51

Argument (komplexe Zahlen) 330

aromatische Verbindungen,

Stabilität 486–488

Arraydetektor 549, 551

Arrhenius, S. 943, 965-969, 1014,

1019, 1023, 1032

Arrhenius-Auftragung 965, 966

Arrhenius-Gleichung 943,

965-969, 1014

Arrhenius-Parameter 965-969, 1014, 1019, 1023, 1032

- bimolekulare Reaktionen in der Gasphase 1019, 1032
- bimolekulare Reaktionen in Lösung 1023, 1032

Astrophysik, Spektroskopie 437,

Asymmetriespannung 293 Atmosphäre (atm, Einheit) 4, 6,

Atmosphäre, Zusammensetzung 11

atomare Masse 6

atomare Masseneinheit 6, 556

Atomisierungsenthalpie 67

Atommodell, Bohr'sches 440, 441

- Atomorbitale 404, 406-408
- Energien 404, 476 - Linearkombination (LCAO) 411,
- 456, 457
- Symmetriebezeichnungen 522-524
- wasserstoffähnliche Atome 406-408

Atomradius 422

Atomspektren 399, 426

Atomspektroskopie 312, 313, 426

Atomstruktur 399

ATP 152, 153, 272-274, 302, 303

attraktive Hyperfläche 1046

Aufbauprinzip 417–422, 462 Aufspaltung

- Davydov- 888

曲

 $-\mathbf{H}$ H

 $-\Box$ 

- ESR-Spektrum (Hyperfein-) 677-680
- NMR-Spektrum 648-651 aufspannen 519, 523 Auftragung
- Arrhenius- 965, 966
- Birge-Sponer- 574
- Eadie-Hofstee- 1009
- Grotrian- 427, 428
- Hanes- 1009
- Jablonski- 607
- Lineweaver-Burk- 985, 986
- Ramachandran- 783, 784
- Scratchard- 260
- Stern-Volmer- 992, 993
- Tafel- 1102, 1103

Auger, P. 1073, 1074

Auger-Effekt 1074

Auger-Elektronenspektroskopie (AES) 1073, 1074

Auger-Elektronenspektroskopie (SAM)

- Raster- 1074

Ausdehnungskoeffizient, thermischer 79, 80

Auslöschungen, systematische 854 Aussalzeffekt 260

Ausschlussprinzip, Pauli- 399, 414-417, 462

Ausschlussregel 584, 591 Ausschlussvolumen 826, 827 Austauschstromdichte 1098.

1100-1102, 1106 Austrittsarbeit 314, 315

Auswahlregeln 532, 543

- allgemeine 543
- elektronische Übergänge 543, 595, 596
- Infrarotaktivität 570, 582, 590
- Laporte- 596, 602, 603
- Mehrelektronenatome 436, 437
- Molekülsymmetrie 510, 513, 514
- Raman-Aktivität 564, 565, 577, 590
- Raman-Rotationsspektroskopie 564, 565, 611, 612
- Raman-Schwingungsspektroskopie 577, 613, 614
- Rotationsspektroskopie 561, 562,
- Schwingungsspektroskopie 571, 612, 613
- spektroskopische Übergänge 426, 427, 543

- spezielle 543
- Symmetrie 510, 513, 514, 595, 596
- wasserstoffähnliche Atome 426, 427

Autokatalyse 1011 Avogadro, A. 6, 7

Avogadro-Konstante 6

Avogadro-Prinzip 7 AX<sub>2</sub>-System 650, 651

AX<sub>3</sub>-System 651

Axilrod, B.M. 780

Axilrod-Teller-Gleichung 780

AX-System 649, 650, 656

Azeotrop 216-218

Azimutalwinkel 368, 594

### В

Bändertheorie 839, 863-866, 875-878

Bahndrehimpuls 365, 415, 595

- Gesamt- 432-434

Bahndrehimpulsquantenzahl 369, 370, 404

- Gesamt- 432, 433

Ball, springender 100, 101

Balmer, J. 400

Balmer-Serie 400

Band (Festkörper) 863–866

Banden (Schwingungsübergänge) 582

Bandenkopf 601

Bandenspektren 574, 583

Bandlücke 865, 877, 878, 889

Bar (Einheit) 4, 6, 1122

Barometer 5

barometrische Höhenformel 11.

36, 181, 748

Basiseinheiten 4–6, 1123 Basissatz 473, 518

Bayard, R.T. 5

Bayard-Alpert-Ionisationsmanometer

5

bcc 842, 843

Bedeckungsgrad 1070, 1071, 1078, 1090-1092, 1109-1111

Beer, A. 544

begrenzte Mischbarkeit 199, 221,

Beiträge zur Zustandssumme 705, 706

Belastung

- einachsige 872, 873

- hydrostatische 872
- mechanische 872, 873

Benzol

- Atmungsbewegung 624
- MO-Beschreibung 486, 487
- Resonanzstabilisierung (VB-Theorie) 451
- Ringstrom 648
- Stabilität (MO-Theorie) 486, 487
- Symmetrie 507
- Symmetriezahl 711, 712
- Van-der-Waals-Koeffizienten 29

- VB-Beschreibung 451

beobachtete Lebensdauer 547, 548

Berthelot, D. 31

Berthelot-Zustandsgleichung 31

Beschleunigung 14

Beschleunigung des freien Falls 46

Besetzung von Orbitalen 417-422

Besetzungsinversion 609, 610 Besetzungsunterschied

- ESR 642
- NMR 639

Besetzungszahl 1, 700-702, 704, 705

- Temperaturabhängigkeit 700,
- und Gleichgewichtskonstante 741-743

Bessel, F.W. 753

Bessel-Funktion 753

bestimmtes Integral 18, 1121, 1122

 $\beta$ -Faltblatt 783, 784

BET-Isotherme 1082–1085,

1109-1111

Betrag 319, 320

Betragsquadrat 319, 320 Beugung 308, 847-850, 856-858

- Elektronen- 856-858 – Intensität 856, 858

- Neutronen- 856, 857

 niederenergetischer Elektronen (LEED) 1070, 1074-1076

- Röntgen- 839, 847-850, 858, 859 Beugungsgitter 549, 550

Beugungsintensität 856, 858

Beugungsmuster 847 Beweglichkeit

- von Ionen 917-921
- von Protonen 919

- von Teilchen an Oberflächen 1088

Bewegung

- Brown'sche Molekular- 100, 101

曲

 $-\Box$ 

# **1162** Stichwortverzeichnis

- dreidimensionale ungeordnete 805

- eindimensionale freie 338, 339

- eindimensionale ungeordnete 931-935

- freie 338, 339

- geordnete 47

- in einer Dimension 338-340

- in zwei Dimensionen 344

- Rotation 306, 362

- Schwingung 306, 353

- thermische 47

- Translation 305, 338

- ungeordnete 834, 931-935

- Vibration (Schwingung) 306

- zweidimensionale ungeordnete 834

Bewegungsarten, grundlegende 305, 306, 338, 353, 362

Bezugssystem 662 Bildungsenthalpie

- Ionen (Konvention) 69

- Standard- 69, 70

Bildungsgeschwindigkeit 948

bimolekulare Reaktion 971, 1019, 1023, 1032, 1043

binäre Lösung, Dampfdruck 211, 212

binäre Mischung 184, 198, 211, 212, 255

- chemisches Potenzial 198

Phasendiagramm 255

binäres System 184, 198, 211, 212, 255

bindendes Orbital 458, 459, 461, 464

- Energie 459, 476

Bindung

- chemische 458

- ionische 866-870

metallische 861

- Peptid- 502, 782-784, 804

 $-\pi$ - 449–451

- polare 471

 $-\sigma$ - 449

- tetraedrische 452, 453, 809

Bindungsdissoziationsenergie 447,

Bindungsenergie der  $\pi$ -Elektronen 486

Bindungslänge 467, 468 Bindungsordnung 467, 468 Binnendruck 78, 136, 792 biologische Membran 822, 823 biologischer Standardzustand 272,

biologisches Standardpotenzial 273 Birge, R.T. 573, 574 Birge-Sponer-Auftragung 574

Birge-Sponer-Extrapolation 573, 574

Blase 794

Bleiakkumulator 1107 Blitzlichtphotolyse 947 Block (des Periodensystems) 421

Blockdiagonalform 519, 520

Blodgett, K. 797

Bohr, N. 312, 313, 334, 402, 440, 441, 638, 640, 883, 884

Bohr'sche Frequenzbedingung 312, 313, 638

Bohr'scher Radius 334, 402

Bohr'sches Atommodell 440, 441 Bohr'sches Magneton 640, 883, 884

Bolometer 1039

Boltzmann, L. 2, 7, 16, 104, 271, 278, 309, 553, 695, 696, 700, 701, 715, 729, 730, 734, 775, 949, 968,

1014, 1038, 1039

Boltzmann-Ausdruck für die Entropie 105, 729, 730, 734 Boltzmann-Faktor 775, 1014

Boltzmann-Gleichung 105, 729, 730, 734

Boltzmann-Konstante 2, 7, 104, 700, 949

Boltzmann-Verteilung 1, 16, 17, 271, 272, 278, 553, 695, 696, 700, 701, 715, 730, 968

- Ursprünge der 696–700 Bombenkalorimeter, adiabatisches

Born, M. 131, 132, 305, 319, 320,

335, 445, 447, 868-870

Born-Haber-Kreisprozess 869, 870 Born-Mayer-Gleichung 868

Born-Oppenheimer-Näherung 445, 447

Born'sche Gleichung 131, 132 Born'sche Interpretation 305, 319, 320, 335

Bortrifluorid

- Normalschwingungen 588, 589

- Symmetrie 510, 511 Bosonen 415, 416

Boyle, R. 7, 28 Boyle'sches Gesetz 7

Boyle-Temperatur 28

Brackett, F.S. 400 Brackett-Serie 400

Bragg, J.K. 744

Bragg, L. 849, 850 Bragg, W.H. 849, 850, 858, 859

Bragg'scher Winkel 849, 850

Bragg'sches Gesetz 849, 850, 858, 859

Bravais, A. 842, 843

Bravais-Gitter 842, 843

Brechung 770

Brechungsindex 770, 889, 890,

1077

Bremsstrahlung 847, 848

Brennstoffzelle 298, 1107, 1108

Brønsted, J.N. 1094, 1095

Brønsted-Säure 1095

Brønsted-Zentrum 1094

Brown, R. 100, 101

Brown'sche Molekularbewegung

100, 101

Bruchpunkt 873

Brunauer, S. 1082–1085, 1109–1111

Brunauer-Emmett-Teller-Isotherme (BET) 1082–1085, 1109–1111

BSA 818

Buckminster Fuller, R. 513, 755 Buckminsterfulleren

- Schwingungswellenzahlen 755

- Symmetrie 513

Burk, D. 985, 986 Butadien, MO-Beschreibung 483,

484 Butler, J. 1098–1102

Butler-Volmer-Gleichung 1098-1102

# C

Cäsiumchloridstruktur 866 Campher, Dipolmoment 769, 770

Candela (Einheit) 1123 Carbonylgruppe 601, 603, 604

Carnot, S. 106, 108

Carnot-Kreisprozess 106 Carnot-Wirkungsgrad 108

Carotin 343, 344, 387, 491, 492

CARS 1041 Casein 816

CCD 552

сср 861-863, 874

Celsius (Einheit) 5 Celsius, A. 5

Celsius-Temperaturskala 5 Chapman, D.L. 1097



 $-\Pi$ 

H

Dalton'sches Gesetz 10

Charakter 520, 521 charakteristische Rotationstemperatur 710, 728, 729 charakteristische Schwingungstemperatur 713, 728, 729 Charaktertafeln 505, 521-525, 1155-1158 - Orbitalentartung 524, 525 Charge-Coupled Device (CCD) 552 Charge-Transfer-Übergang 603 - Ligand-zu-Metall- (LMCT) 603 - Metall-zu-Ligand- (MLCT) 603, 992 Charles, J. 7 Charles'sches Gesetz 7 Chemilumineszenz, Infrarot- 1041, 1042 chemisch äquivalente Kerne 654, chemische Bindung 458 chemische Kinetik 943-945, 954 chemische Verschiebung 643-645, 656-658 - Anisotropie 658 und Elektronegativität 646 chemischer Austausch 657, 658 chemisches Gleichgewicht 263, 266 chemisches Potenzial - allgemeine Form 187, 188 - Definition 157, 160 - des gelösten Stoffs 233, 924 - des Lösungsmittels 233 - Druckabhängigkeit 169, 170 - Fermi-Dirac-Verteilung 876 - flüssige Mischungen 193, 194, 198, 202 - idealer Lösungen 194 - im Gleichgewicht 160 - Standardwert 190 - Temperaturabhängigkeit 168, 169 chemisches Standardpotenzial 1099 Chemisorption 1069, 1070, 1085, 1086, 1092, 1093 Chinhydronelektrode 300 Chinolin, Symmetrie 510 chirales Molekül 514

Chiralität 514

649,651

Chlorethan, NMR-Spektrum 648,

Cholesterin 619 cholesterische Phase 227 Chromophor 601, 603, 604 Citratzyklus 273 Clapevron, É. 172, 174 Clapeyron-Gleichung 172 Clausius, R. 102, 110, 174, 769, 770 Clausius-Clapeyron-Gleichung 174 – Druckabhängigkeit 170 Clausius-Mossotti-Gleichung 769, 770 Clausius'sche Formulierung des Zweiten Hauptsatzes 102 Clausius'sche Ungleichung 110 Clebsch, A. 433, 434 Clebsch-Gordan-Reihe 433, 434 CMC 820-822 CNDO 488, 489 Compton, A.H. 386 Compton-Wellenlänge 386 Condon, E. 596–600, 605, 1051 Cooper, L.N. 879, 880 Cooper-Paar 879, 880 Copolymer 802, 804 Corey, R. 782, 783 Corey-Pauling-Regeln 782, 783 Coronen 367, 537, 554 Coulomb (Einheit) 55, 918 Coulomb, C.A. de 46, 55, 132, 241, 401, 772, 866-868, 887, 918, 1020 Coulomb-Energie 46, 132, 241, 400, 401, 772 - des Elektrons im Wasserstoffatom 400 Coulomb-Gesetz 46, 132 Coulomb-Integral 474–476 Coulomb-Potenzial 132, 824, 825, 918 - abgeschirmtes 241 - des Elektrons im Wasserstoffatom Coulomb'sche potenzielle Energie 46, 132, 241, 400, 401, 772 Coulomb-Wechselwirkung 46, 241, 772, 866–868, 887, 1020 Cracken 1094 Crick, F. 858 Curie, P. 885 Curie-Gesetz 884 Curie-Temperatur 885 Cyclooctatetraen 500 Dalton (Einheit) 804 Dalton, J. 10, 804

Dampf, übersättigter - übersättigter 801 Dampfdruck 25, 161, 170, 211, 212, 236, 237 an gekrümmten Oberflächen 794, 795 - einer binären Lösung 211, 212 - Gesamt- 211-213 - Kelvin-Gleichung 791, 801 - Knudsen-Methode 912, 913 - partieller 10, 170, 211, 212 - Sublimations- 161, 175 - Temperaturabhängigkeit 161, 162, 164 - von Mischungen 211, 236, 237 Dampfdruckdiagramm 211, 212 Daniell, J.F. 281, 285 Daniell-Element 281, 285 Darstellung 517, 518 - irreduzible 519-521 - Matrix- 517-520 - totalsymmetrische irreduzible 521, 526-529 Dauerstrichlaser 631 Davies, C.W. 239, 240 Davies-Gleichung 239, 240 Davisson, C. 316 Davisson-Germer-Experiment 316 Davydov, A.S. 888 Davydov-Aufspaltung 888 d-Block 421 d-d-Übergang 596, 602, 603 de Broglie, L. 316-318, 706, 707, 731, 732, 737, 856, 857, 1071, 1119, 1120 de Moivre, A. 665 De-Broglie-Relation 316, 318, 856, 857 - relativistische 1119, 1120 De-Broglie-Wellenlänge (thermische) 316, 317, 706, 707, 725, 731, 732, 737, 857, 1071 Debve (Einheit) 763 Debye, P. 120, 151, 238-240, 312, 763, 769, 817, 848, 1033, 1034 Debye-Gleichung 769 Debye-Hückel-Grenzgesetz 238, 239, 243, 1033, 1034 erweitertes 239, 240 Debye-Hückel-Theorie 238-243, 817 - erweiterte 239, 240





**1164** Stichwortverzeichnis

Debye-Länge 241-243 Debye'sches T<sup>3</sup>-Gesetz 120 Debye-Temperatur 312 Debye-Term 151 Debye-Theorie (Wärmekapazität)

312

Deformation 872, 873 - elastische 872 - plastische 872

Deformationsschwingung 581

Degradation 757, 804 Dehnung 872, 873

- mechanische 872, 873

- Normal- 873 - Scher- 872, 873

Delokalisierungsenergie 486

 $\delta$ -Skala 643, 644 De-Moivre-Theorem 665 Denaturierung 757, 804

Depolarisationsgrad 584 depolarisierte Linie 584

Derjaguin, B. 817 Desaktivierung

- Stoß- 993

- strahlende 605

- strahlungslose 605, 606

Desorption 1067, 1068, 1076-1078

- Geschwindigkeit 1080, 1085-1088, 1090-1092

- Halbwertszeit 1087

- Schock- 1078

- temperaturgesteuerte (TPD) 1087, 1088

Desorptionsspektroskopie, thermische (TDS) 1087, 1088 Desoxyribonucleinsäure (DNA) 782, 785, 786, 858, 859

Destillation

- Azeotrop 216-218

- einfache 216

- fraktionierte (Rektifikation) 213, 216, 217

- teilweise mischbarer Flüssigkeiten 221, 222

- theoretische Böden 216, 217

- Wasserdampf- 218

destruktive Interferenz 308, 463, 849

Detektor 551, 552

– Array- 551

- phasenempfindlicher 641, 642

Determinante 475

- Säkular- 474, 475, 479, 864

- tridiagonale 897

- zyklische 897

Deuterierung 1035-1037

Deuteriumlampe 549 DFT 489, 490

Diagonalmatrix 483

Diagramm

- Arrhenius- 965, 966

- Birge-Sponer- 574

- Dampfdruck- 211, 212

- Eadie-Hofstee- 1009

- Energieniveau- 462, 463, 466,

- Grotrian- 427, 428

- Hanes- 1009

- Indikator- 51, 52

- Jablonski- 607

- Konturlinien- 783, 784

- Korrelations- 436

- Lineweaver-Burk- 985, 986

– Ramachandran- 783, 784

- Scratchard- 260

- Stern-Volmer- 992, 993

- Tafel- 1102, 1103 Dialyse 209, 816

diamagnetische Substanz 883, 885 diamagnetischer Beitrag zur

Abschirmungskonstante 645, 646

Diamant 159, 182, 870

- Struktur 870

Diaphragmamethode 930 diathermische Wand 45 Dichlorbenzol, Dipolmoment 763 dicht gepackte Schicht 861 Dichte

- Austauschstrom- 1098. 1100-1102, 1106

- Dipolmoment- 767

- Elektronen- 471, 490, 854, 855

- Energie- 308

- Enthalpie- 73, 74

- Ladungs- 242

- Massen- 7

- spektrale Energie- 308

- Spin- 679

- Stoß- 1015, 1016

- Strom- 1098-1102, 1106

– Überlappungs- 458

- Wahrscheinlichkeits- 319, 342

- Zustands- 309, 722, 723, 876

dichte Kugelpackungen 861–864 Dichtefunktionaltheorie (DFT)

489, 490

Diederebene 507 Dielektrikum 767

dielektrische Leitfähigkeit 46 Dielektrizitätskonstante 46, 166,

Dieterici, C. 31

Dieterici-Zustandsgleichung 31

Differenzial

769

- gewöhnliches 56, 57

- nicht totales 76, 77

- partielles 56, 57

- totales 76, 77, 135

Differenzialgleichung 27, 28, 56, 57 - partielle 344, 345

Differenzialkalorimeter,

dynamisches (DSC) 60, 61, 71,

Differenzialrechnung 27, 28, 56, 57 differenzielle Überlappung 488,

489

differenzieller Streuquerschnitt 1039, 1040

Diffraktometer 848, 849

- Pulver- 848

- Vierkreis- 849 diffuse Doppelschicht 1097

Diffusion 905, 908, 909, 924

– an Oberflächen 1072, 1073

aus statistischer Sicht 931–933

 aus thermodynamischer Sicht 924-927

Erstes Fick'sches Gesetz 905, 924-927

- Geschwindigkeit 908, 909

- quadratisch gemittelte Auslenkung 931

- Selbst- 117

- ungeordnete Bewegung 834, 931-935

- zurückgelegte Wegstrecke 930, 931

- Zweites Fick'sches Gesetz 927, 928

Diffusionsgleichung 903, 927-931, 1023, 1024

- radiale 1023, 1024

- verallgemeinerte 929-931

Diffusionskoeffizient 905, 908-910, 920, 921, 926, 1024, 1072

Temperaturabhängigkeit 926, 1024





diffusionskontrollierte Reaktion

Geschwindigkeitskonstante 1023–1025

1013, 1022-1025

Diffusionspotenzial 282 Diffusionsrate 908, 909 Diodenlaser 889, 890 Dipol

- elektrischer 762, 763, 765, 772–774
- im Magnetfeld 647, 648
  Dipol-Dipol-Wechselwirkung 653, 670, 671, 679, 680, 772–778, 824, 825

Dipol-induzierter
Dipol-Wechselwirkung 776, 777
Dipolmoment

- der Amidgruppe 764, 765
- Dichte 767
- elektrisches 513, 514, 761–765, 767, 768
- induziertes 564, 565, 611-613, 763, 765, 766
- magnetisches 882, 883
- mittleres 767, 768
- mittleres elektrisches 767, 768
- Operator 598
- permanentes elektrisches 763
- resultierendes 763, 764
- Übergangs- 426, 427, 532, 543, 595, 596, 598, 766, 887, 888
- Vektoraddition 763, 764
- von Campher 769, 770
- von Dichlorbenzol 763
- von Kohlendioxid 763
- von Methan 765
- von Ozon 763
- von Wasser 763

Dipol-Punktladungs-Wechselwirkung 772, 773 Dirac P 876, 877

Dirac, P. 876, 877 direkte Methoden 856 direkte Summe 519 direktes Produkt 527–530 disperse Phase 762, 815–817 Dispersion 158, 159, 815

Dispersionswechselwirkung 777, 778, 816, 817, 1069
Disproportionierung

(Polymerisation) 982 Disproportionierung (Reaktion) 292

Dissoziation 608, 988

Dissoziationsenergie

- Bindungs- 447, 468
- Schwingung 572-574

Dissoziationsenthalpie 869 Dissoziationsgleichgewicht 740, 741

Dissoziationsgrad 270, 276 Dissoziationsgrenze 573, 608

Disulfidbrücken 784

Divergenz (Reihenentwicklung) 204

D-Linien 431, 432

DLVO-Theorie 817 d-Metalle 421, 602, 603, 1092, 1093

d-Metall-Komplex 603 - g-Faktor 676, 677

DNA 782, 785, 786, 858, 859

Dobson, G. 36

Dobson-Einheiten 36

Dogonadze, R.R. 1050

dominierende Konfiguration 722

Donorband 878 Donorniveau 878

Doppelbindung

- als Chromophor 603
- VB-Beschreibung 451

Doppelschicht

- diffuse 1097
- elektrische 817-819, 1096-1098
- Gouy-Chapman-Modell 1097
- Grahame-Modell 1097
- Helmholtz-Modell 1097
- Lipid- 227, 822, 823, 921
- planare 822, 823
- Stern-Modell 1097Doppler, C.A. 546, 547

Doppler, C.A. 540, 547

Doppler-Effekt 546

Doppler-Verbreiterung 546, 547

d-Orbital 411, 602

Dotieratome 117, 118

Drehachse 506, 507, 555, 842, 843 Drehimpuls 364, 365, 371, 372,

555, 556, 636

- Bahn- 365, 415, 595
- des Teilchens auf einer Kreisbahn 365
- des Teilchens auf einer Kugeloberfläche 371
- Cocomt 420 422 505
- Gesamt- 429, 433, 595
- Gesamtbahn- 432-434
- Gesamtspin- 433
- Kommutatoren 372
- Komponenten 364
- Operatoren 372

- Quantelung 365, 366, 371
- Spin- 415, 416, 428, 595
- Vektormodell 371, 372, 415, 416, 428

Drehimpulsquantenzahl 369, 370, 404

- Gesamt- 432, 434

Drehmoment 364

Drehspiegelachse 508, 514

Drehspiegelung 508

dreidimensionale Rotationsgruppe 513

Driftgeschwindigkeit 917-919

Dritter Hauptsatz der

Thermodynamik 99, 121

Druck

- Binnen- 78, 136, 792
- Dampf- 25, 161, 170, 211, 212, 236, 237, 912, 913
- Definition und Einheiten 4, 6, 1122, 1123
- Einfluss auf das Gleichgewicht 275
- Flüssigkeiten 792
- Gas- 15
- Grenz- 492
- hydrostatischer 792, 793
- kinetischer 792
- kritischer 28, 161
- Oberflächen- 797, 798
- osmotischer 206-208
- Partial- 10, 170, 211, 212
- Standard- 4, 6
- statistischer 736, 737, 745
- Sublimations- 161, 175
- Zustandssumme 736, 737, 745Druckeinheiten 4, 1122, 1123

Druckverbreiterung 548 DSC 60, 61, 71, 72

Dualismus von Welle und Teilchen

305, 313, 316 Dublett-Term 434, 435, 491

Duhem, P. 188, 189

Dulong, P.L. 311, 865, 866

Dulong-Petit-Regel 311, 865, 866 Durchdringung 417–419

Durchlässigkeit 545 Durchlassspannung 879

Durchtrittsfaktor 1100–1103

dynamisches

Differenzialkalorimeter (DSC) 60, 61, 71, 72

dynamisches Gleichgewicht 264

Ħ

 $-\Box$ 

# **1166** *Stichwortverzeichnis*

Eadie, G.S. 1009 Eadie-Hofstee-Diagramm 1009 ebullioskopische Konstante 204 Echtzeitanalyse 946 Ecke (Fehlstelle) 1068, 1069 Effekt

- Auger- 1073, 1074

- Aussalz- 260

- Doppler- 546

- Joule-Thomson-81-84

- Käfig- 1022

- Kern-Overhauser- 635, 670-673

- Kern-Overhauser- (NOE) 635, 670-673

- kinetischer Isotopen- 1035-1037

- kinetischer Salz- 1033–1035

- Meißner- 885

- Meißner-Ochsenfeld- 885

- nichtlinearer optischer 890, 947

- photoelektrischer 314, 315

- Stark- 562

- Treibhaus- 585

- Tunnel- 347-350

- Zeeman- 444

effektive Geschwindigkeitskonstante 951

effektive Kernladung 418, 419 effektive Masse 355, 569, 570 effektive potenzielle Energie 401 effektive transversale Relaxationszeit 668

Effizienz, katalytische 1008 Effusion 906, 912, 913

- Geschwindigkeit 912, 913 Effusionsgesetz, Graham'sches

Effusionsrate 912, 913

906, 912

Eigenfunktion 325, 328, 329

Eigenschaften, kolligative 201, 202

Eigenvektor 484, 485

Eigenwert 325, 328, 484, 485

Eigenwertgleichung 324, 325

- Matrixform 484, 485

einachsige Belastung 872, 873 eindimensionale Bewegung 338,

eindimensionale ungeordnete Bewegung 931–935

einfache Destillation 216

Einheiten

- abgeleitete 5, 1123

- atomare 441

- Basis- 4-6, 1123

- Dobson- 36

- Druck- 4, 1122, 1123

- SI- 4-6, 1123

Einheitsmatrix 482 Einheitsvektor 431

Einhüllende 407, 408, 411

- d-Orbital 411

- p-Orbital 411

- s-Orbital 407, 408

- Wasserstoffmolekül-Ion 457, 458

Einkristall 848, 849

Einstein, A. 311, 312, 542, 543, 726,

920, 921, 926, 933, 1024 Einstein-Gleichung

(Ionenbeweglichkeit) 920, 921

Einstein-Gleichung

(Wärmekapazität) 311, 312, 728 Einstein-Koeffizienten 542, 543

Einstein-Smoluchowski-Gleichung

Einstein-Temperatur 311, 312, 726

- Nullpunktsentropie 121

- Polymorphismus 164, 165

- Struktur 871

elastische Deformation 872, 873 elastischer Stoß 14

Elastizitätsmodul 873, 874

Elastomer 89, 811, 812

Electron Paramagnetic Resonance (EPR) 635, 636, 640, 641,

676-679 elektrische Arbeit 51, 241

- Freie Enthalpie 283-285

elektrische Doppelschicht 817-819, 1096-1098

- diffuse 1097

- Gouy-Chapman-Modell 1097

- Grahame-Modell 1097

- Helmholtz-Modell 1097

- Stern-Modell 1097

elektrische Energie 55

elektrische Feldkonstante 46, 132, 400, 765, 766

elektrische Feldstärke 767, 768,

824, 825, 918

elektrische Fluktuationen 776–778 elektrische Ladung 55

elektrische Leitfähigkeit 875, 876, 899, 915

elektrische Spannung 55 elektrische Stromstärke 55, 1123

elektrischer Dipol 762, 763, 765 elektrischer Leiter 875, 876

elektrischer Leitwert 899, 915 elektrischer Punktdipol 762, 763, 765, 772–774, 778 elektrischer Strom 55, 1123 elektrischer Widerstand 915

elektrisches Dipolmoment 513, 514, 761–765, 767, 768

- mittleres 767, 768

- resultierendes 763, 764

- Vektoraddition 763, 764

elektrisches Feld 824, 825 elektrisches Heizen 54, 55, 90

elektrisches Potenzial 132, 824, 825, 918, 1096, 1097

elektrochemische Spannungsreihe 290, 291

elektrochemische Zelle 280–282, 1098, 1100-1103

symbolische Schreibweise 282

- Überspannung 1098, 1100–1103 elektrochemisches Potenzial 1099 Elektrode

- Arten von 280

- Asymmetriespannung 293

- Chinhydron- 300

- Gas- 280

- gasselektive 293

- Glas- 292, 293

- ionenselektive 292, 293

- irreversible 1102

- Kalomel- 292

Metall/Metallion-

- Metall/Salz- 280

- Potenzial 288-290, 1098

- Redox- 280

- reversible 1102

- Selektivitätskoeffizient 293

- Standard-Wasserstoff- (SHE) 288

- teilchenselektive 292, 293

Elektrodenarten 280

Elektrodenkammer 280

Elektroden-Konzentrationszelle 281, 282

Elektrodenpotenzial 288–290, 1098

- Kombination 290

Elektrodenraum 280 Elektrodialyse 816

elektrokinetisches Potenzial 817

Elektrolyse 1106 Elektrolyt 280

elektrolytische Zelle 280 Elektrolyt-Konzentrationszelle

281, 282

elektromagnetische Strahlung 307

 $\mathbf{H}$ 曲

 $-\Pi$ H

elektromagnetische Welle 307 elektromagnetisches Spektrum 308, 592

elektromotorische Kraft (EMK) 283

Elektronegativität

- nach Mulliken 472
- nach Pauling 471, 472
- und chemische Verschiebung 646

Elektronen, Tunneleffekt 347-350 Elektronenaffinität 423, 424 Elektronenanlagerung 475, 476 Elektronenanlagerungsenthalpie 67

Elektronenbeugung 856-858 Elektronendichte 471

- grafische Darstellungen 490
- Röntgenbeugung 854, 855 Elektronenenergietransfer 989 Elektronenkonfiguration 462-464, 467, 592-594

Elektronenmikroskopie 1071, 1072

- Auger- (SAM) 1074
- Raster- (SEM) 1072
- Transmissions- (TEM) 1072 Elektronenpaar
- in der MO-Theorie 462-464
- in der VB-Theorie 449, 454 Elektronenspektren 540, 592, 601 Elektronenspektroskopie 540, 592, 601
- Auger- (AES) 1073, 1074
- Photo-(PES) 468, 469, 678, 1073
- Röntgen-Photo-(XPS) 469, 1073
- UV-Photo-(UPS) 469, 1073
- Elektronenspin 415, 416

Elektronenspinresonanz (ESR) 635, 636, 640, 641, 676-679

Elektronenübertragung 988, 1014. 1049-1054, 1067, 1096

- an Elektroden 1067, 1096
- Geschwindigkeitskonstante 1049, 1050, 1052–1054

Elektronenvolt (Einheit) 315, 1122 elektronische Absorption 592, 605-607

elektronische Energie, mittlere 718, 719

elektronische Konfiguration 462, 467, 592-594

elektronische Polarisierbarkeit 768 elektronische Übergänge,

Auswahlregeln 543, 595, 596

elektronische Zustandssumme 713, 714

elektronischer Streufaktor 858 Elektrostatik 918

elektrostatische Potenzialfläche

elektrostatische Wechselwirkung 46, 241, 772, 866-868, 887, 1020 Elementarreaktionen 970, 971

- Elementarzelle 841–845 - flächenzentrierte 842, 843
- innenzentrierte 842
- kubische 842
- monokline 842
- nichtprimitive 841, 843
- primitive 841-843
- raumzentrierte 842, 843
- seitenzentrierte 842, 843
- trikline 842

- von Natriumchlorid 852 Elev. D.D. 1091, 1092

Eley-Rideal-Mechanismus 1091, 1092

Emission

- induzierte 542, 543
- spontane 542, 543
- stoßinduzierte 989

Emissionsspektroskopie 540, 541 Emissionsspektrum 406, 432, 994, 995, 1041

EMK 283

Emmett, P. 1082–1085, 1109–1111 Emulgator 815, 816

Emulsion 815, 816

Enantiomere 514

endenthalpischer Prozess 65 endergone Reaktion 265, 266

endotherme Reaktion 65 endothermer Prozess 46, 65, 159 Energie

Aktivierungs- 965-969, 976, 977, 984, 1014, 1027, 1028, 1031, 1032

- antibindendes Orbital 460
- bindendes Orbital 459
- Bindungsdissoziations- 447, 468
- Coulomb- 46, 132, 241, 400, 401, 772.
- Definition und Einheiten 1, 45, 1122, 1123
- Delokalisierungs- 486
- des Elektrons im Magnetfeld 640, 641
- des harmonischen Oszillators 353-355, 569, 570, 703, 704, 718

- des Kerns im Magnetfeld 637,
- Dissoziations- (Schwingung) 572-574
- elektrische 55
- Erhaltungssatz 46
- Fermi- 877
- freie 125, 126, 736, 745
- Gesamt- (System) 48
- Gesamt- (Teilchen) 46
- Gibbs- 99, 125, 126
- Gitter- 867-870
- Grundzustand 405
- harmonische potenzielle 353, 354
- harmonischer Oszillator 353, 354
- Helmholtz- 125, 126, 736, 745
- Innere 48
- Ionisierungs- 405, 423
- Kerne in Magnetfeldern 637, 638
- kinetische (Definition) 45
- mittlere (harmonischer Oszillator) 358-360
- mittlere (System) 723
- mittlere (unabhängige Moleküle) 725, 726
- mittlere elektronische 718, 719
- Molekülorbital (MO)-Theorie 476, 477
- Nullpunkts- 343, 346, 354
- parabolische potenzielle 353, 354
- Photonen 313-315
- $-\pi$ -Bindungs-Bildungs- 486
- potenzielle (Definition) 24, 45
- potenzielle parabolische 353, 354, 447, 569
- Quantisierung der 1, 305, 307, 323, 341, 354
- Reorganisations- 1052–1054
- wasserstoffähnlicher Atome 402,
- Wechselwirkungen 777
- Zustandsdichte 309, 722, 723
- zwischen elektrischen Multipolen 775, 776

Energiebarriere 350, 1036, 1037 Energiedichte

- Kohäsions- 832
- spektrale 308

Energieerhaltungssatz 46 Energiefluss 904–906



 $-\Pi$ 

# Ħ

 $-\Box$ 

# **1168** *Stichwortverzeichnis*

Energieniveaudiagramm 462, 463, 466, 467, 478, 480

- Ethen 480
- Stickstoffmonoxid 478
- zweiatomige Moleküle 466, 467 Energieniveaus
- AX-System 649, 650
- Diagramm 462, 463, 466
- Elektronenspin im Magnetfeld
   641
- Entartung 701
- harmonischer Oszillator 354, 355, 570, 703, 704
- Konvergenz 571, 572
- linearer Kreisel 562, 563
- lineares System 863–866
- Schwingung 354, 570
- Spin- $\frac{1}{2}$ -Kern im Magnetfeld 638
- symmetrischer Kreisel 709
- Teilchen auf einer Kreisbahn 363
- Teilchen auf einer Kugelschale 369–371
- Teilchen im dreidimensionalen Kasten 346
- Teilchen im eindimensionalen Kasten 341
- Teilchen im zweidimensionalen Kasten 345, 346
- von Rotationszuständen 369–371
- wasserstoffähnliche Atome 402, 404, 406
- zweiatomiges Molekül 466, 467
   Energieoperator 324, 325
   Energiepooling 989

Energiequantelung 1, 305, 307, 323, 341, 354

Energietransfer

- Elektronen 989
- Resonanz- 994, 995

Energieübertragung

- in Form von Arbeit 45, 47, 49
- in Form von Wärme 45–47, 49, 50
- Resonanz- 994, 995
- Richtung der 49, 50
- Vorzeichenkonvention 49, 50

Ensemble

- großkanonisches 721
- kanonisches 695, 721, 722
- mikrokanonisches 721

Entartung

- elektronischer Zustände 713, 714
- Energieniveaus 701

- Normalschwingungen 587-589
- Orbital- 524, 525, 594
- Rotatoren 559, 560
- wasserstoffähnliche Atome 407, 408
- Wellenfunktionen 346, 347, 594 Enthalpie
- Adsorptions- 1080-1082
- Änderungen der 59-61, 66, 81
- Aktivierungs- 1031, 1032
- Atomisierungs- 67
- Bildungs- 69, 70
- Chemisorption 1070
- Definition 59
- Dissoziations- 869
- Elektronenanlagerungs- 67
- Exzess- 200
- Freie (Definition) 126
- Gitter- 867-870
- Hydratations- 131
- Ionisierungs- 67isostere Adsorptions- 1080–1082
- Lösungs- 820
- Mischungs- 192, 198
- Phasenübergangs- 66, 67
- Physisorption 1070
- Reaktions- 67, 68
- Schmelz- 66, 67, 172, 173
- spezifische 73, 74, 95
- Sublimations- 66, 175
- Temperaturabhängigkeit 62, 63
- Übergangs- 66, 67
- Verbrennungs- 67-69
- Verdampfungs- 65, 66
- Zustandssumme 737

Enthalpieänderungen 59–61, 66, 81

- bei physikalischen
- Zustandsänderungen 66 kalorimetrische Bestimmung 60,
- kalorimetrische Bestimmung 60 61
- und Wärmeübertragung 59, 60
  Enthalpiedichte 73, 74
  Entkopplung 670
  Entmischung 218, 219

Entropie

- Änderungen der 103, 104
- Aktivierungs- 1031, 1032
- Boltzmann-Ausdruck 105, 729, 730, 734
- Definition 100, 102
- Definition, statistische 104
- Definition, thermodynamische
   103

- Exzess- 199-201
- Gesamt- 102, 107, 126, 192
- Ionen in Lösung (Konvention)
   122, 123
- kalorimetrische Messung 119
- kolligative Eigenschaft 202
- Konformations- 810–812
- Lösungs- 820
- Messung 119
- Mischungs- 192, 198, 199, 202
- molekulare Interpretation 104–106
- nach dem Dritten Hauptsatz
   121, 122
- Nullpunkts- 121, 122, 734, 735
- Phasenübergangs- 119
- Reaktions- 122, 123, 285–287
- Rotationsbeitrag 732, 733
- Schmelz- 172, 173
- Schwingungsbeitrag 733, 734
- spontane Prozesse 103, 104
- Standard- 119, 122
- statistische 104, 105, 730
- statistisches Knäuel 810–812
- Temperaturabhängigkeit 115, 116, 123
- thermodynamische Definition
- Translationsbeitrag 731, 732
- Verdampfungs- 173, 174
- Zustandsfunktion 106, 107
- Zustandssumme 695, 727, 729-732
- Zweiniveausystem 731

Entropieänderung

- bei adiabatischen Prozessen 104
- bei einer Expansion 113, 114
- bei einer Temperaturerhöhung
  115, 116, 123
- bei Phasenübergangen 114, 115
- bei speziellen Prozessen 113
- beim Erhitzen 115, 116experimentelle Bestimmung 150
- Gesamt- 107, 126, 192
- in der Umgebung 103, 104isotherme Expansion 103

entschirmt 644 Entschirmung 644

Enzym 944, 984 – katalytische Effizienz 1008

e-Orbital 602

EPR 635, 636, 640, 641, 676-679

- Resonanzbedingung 641, 676

Exctiton 887, 888

- Frenkel- 887

- Wannier- 887

Expansion 51

- freie 52

106-109

- freie 52

- maximale 54

extensive Größe 7

Exzessenthalpie 200

Exzessentropie 199-201

Exzessfunktion 199, 200

Eyring, H. 1027, 1030

Extrema 27

- reversible 52

exenthalpischer Prozess 65

exergone Reaktion 265, 266

exotherme Reaktion 1027, 1028

exothermer Prozess 46, 65, 159

- adiabatische 81-87, 106-109

– adiabatische isenthalpe 81, 82 - Entropieänderung 113, 114

- reversible adiabatische 85-87,

- isotherme reversible 53

– Wärmefluss 78, 79

Expansionsarbeit 50-52

- reversible isotherme 53, 54

Experiment von Joule 78, 79

Exponential funktion 547

Extinktionskoeffizient 544

extrinsischer Halbleiter 878

 $-\Box$ 

Erdatmosphäre, Zusammensetzung der 11 Erdbeschleunigung 46 Erhitzen, Entropieänderung - Entropieänderung 115, 116, 123 erlaubte Wellenfunktion 322, 323, 335, 340, 341 erlaubter Übergang 426 ER-Mechanismus 1091, 1092 Erstarren 114, 115 Erstarrungstemperatur 161 erste Ableitung 27, 28 erste Ionisierungsenergie 423 Erster Hauptsatz der Thermodynamik 43, 49 Erstes Fick'sches Gesetz 905, 924-927 Erwartungswert 329, 331, 332, 335 erweiterte Debye-Hückel-Theorie 239, 240 erweitertes Debye-Hückel-Grenzgesetz 239, 240 erweitertes Oktett 452 ESR 635, 636, 640-642, 676-679 - Besetzungsunterschied 642 - Resonanzbedingung 641, 676 ESR-Spektrometer 641, 642 ESR-Spektroskopie 635, 636 ESR-Spektrum 635, 677–679, 682 - Hyperfeinstruktur 677-680 essenzielle Symmetrieelemente 842 Ethanol

- Elektronendichte 490

- NMR-Spektrum 657

- MO-Beschreibung 480

- VB-Beschreibung 454

Euler'sche Formel 330

Eutektikum 224, 225

eutektischer Halt 225

Excimerbildung 989

Euler'sche Kettenregel 57

eutektische Zusammensetzung

evaneszente Welle 1076, 1077

Euler, L. 57, 330

224, 225

186

Ethen

- elektrostatische Potenzialfläche

- partielles molares Volumen 185,

Ethin, VB-Beschreibung 454, 455

# Faktor

- Boltzmann- 775, 1014

- Durchtritts- 1100-1103

- Franck-Condon- 598-600 - Frequenz- 965-967, 1014, 1019

- g- (des Elektrons) 640, 676, 677

Eyring-Gleichung 1027, 1030, 1031

– g- (des Kerns) 637

- Kompressions- 25, 32

- präexponentieller 965-967, 1014, 1019

- Real- 25, 32

- sterischer 1015, 1019, 1020, 1032

- Stöchiometrie- 70 - Streu- 850, 851, 856

- Struktur- 851–853

- Verstärkungs- (NOE) 672, 673

Faktorisierung der Zustandssumme 705, 706

Fakultät 204 Faltblatt 783, 784 Faraday, M. 242, 284, 919 Faraday-Konstante 242, 284, 919 Farbe - von Licht 307, 308, 592

- von Metallen 601, 602

f-Block 421 fcc 862

Fehlstellen (Kristall) 117, 1067-1069

Feinstruktur

- Atomspektrum 432

- Hyper- (ESR-Spektrum) 677–680

- NMR-Spektrum 648-651

- Rotations- 600, 601

- Schwingungs- 469

- Verlust der 656

Feinstrukturkonstante 378 Feld, selbstkonsistentes (SCF) 424, 425

Feldkonstante, elektrische 46, 132, 400, 765, 766

Feldkonstante, magnetische 645, 648, 884

Feldstärke

- elektrische 767, 768, 824, 825,

- magnetische 882, 883

Fermi, E. 415, 416, 567, 653, 654, 680, 865, 866, 875-877

Fermi-Dirac-Verteilung 876, 877

Fermi-Energie 877

Fermikante 865, 866, 875, 876 Fermi-Kontaktwechselwirkung

653, 654, 680 Ferminiveau 865, 866, 875, 876

Fermionen 415, 416, 567 ferne Infrarotstrahlung (FIR) 308

Fernordnung 789 Ferrocen, Symmetrie 509 ferromagnetisch 840, 884 Ferromagnetismus 840, 884

Fest/Flüssig-Phasengrenzlinie 161, 172, 173

Fest/Gasförmig-Phasengrenzlinie 161, 175

Festkörper 839

- elektrische Eigenschaften 839,

- ionischer 866-870

- kovalenter 870, 871

magnetische Eigenschaften

- mechanische Eigenschaften 839, 872

 $\mathbf{H}$ 曲



### **1170** *Stichwortverzeichnis*

- metallischer 860-866

- molekularer 870, 871

- Netzwerk- 870, 871

- Oberflächeneigenschaften 1067, 1068

- optische Eigenschaften 840, 887

- ternärer 231, 232 Festkörperlaser 610

Festkörper-NMR 658, 659

Fick, A. 905, 924-928

Fick'sches Gesetz

- Erstes 905, 924-927

- Zweites 927, 928

FID 663-667, 688, 689

FIR-Strahlung 308

Flächenelement 775

flächenzentrierte Elementarzelle 842, 843

Flockung 817, 818

Fluchtgeschwindigkeit 38

Flüssig/Fest-Phasendiagramm

Flüssig/Flüssig-Phasendiagramm 211, 218, 219

Flüssig/Gasförmig-Phasengrenzlinie 161, 173, 174

flüssige Mischungen 193, 194, 198, 211, 212

Flüssigkeiten 193, 761, 789

- Dampfdruck 25

- Druck 792

- hydrostatischer Druck 792, 793

- Inkompressibilität 792, 793

- Kondensation 761, 791, 801

- Mischungen 193, 194, 198, 199

- Modell der harten Kugeln 791

- nicht mischbare 218

- radiale Verteilungsfunktion 789-791

- Struktur 789, 790

- teilweise mischbare 199, 221,

- thermodynamische Eigenschaften 792, 793

- Überhitzung 801

- übersättigter Dampf 801

- Unterkühlung 801

- Viskosität 906, 914, 915

Wechselwirkungen in 789

Flüssigkristall 227, 228

Flüssigkristallanzeige (LCD) 227, 228

Fluid, überkritisches 28, 161

Fluktuationen 723

– elektrische 776–778

Fluoreszenz 605-607

- Geschwindigkeitskonstante 992

- laserinduzierte 1041

- Lebensdauer 991-993

Quantenausbeute 630, 989–993

- Röntgen- 1074

Fluoreszenzlebensdauer 991-993 Fluoreszenzlöschung 606, 991–994

- Geschwindigkeitskonstante 992-994

- Mechanismen 993-995 Fluoreszenz-Resonanzenergietransfer (FRET) 995

Fluoreszenzspektrum 606 Fluss

- Definition 904

- des Impulses 906

- Energie- 904-906

- Konvektions- 1025

- Materie- 904, 905

- Stoß- 906-908 - Wärmeleitung 905

Flussdiagramm (Symmetrie) 510 Flussdichte, magnetische 637

f-Metalle 421

Fock, W. 424, 425

Förster, T. 994, 995

Förster-Theorie 994, 995 Folgereaktionen 971-973

f-Orbital 421, 422

Formel

- barometrische Höhen- 11, 36, 181, 748

– Euler'sche 330

- Lamb- 645, 646

- Stirling- 698, 738

formselektiver Katalysator 1089, 1090

Fourier, J. 550, 551, 660, 661,

664-667, 854, 855

Fourier-Synthese 854, 855 Fourier-Transformation (FT) 550,

551, 664-667 - inverse 664-666

Fourier-Transformationsmethoden

Fourier-Transformations-NMR (FT-NMR) 660, 661

Fourier-Transformationsspektro-

meter 550 Fourier-Transformationsspektro-

skopie 550

fraktionierte Destillation 213, 216, 217

Franck, J. 596-600, 605, 1051

Franck-Condon-Faktor 598–600 Franck-Condon-Prinzip 596-600,

605, 1051

Franklin, R. 858 frei abklingende Induktion (FID) 663-667, 688, 689

- Frequenzbereich 663, 664, 666

Zeitbereich 663, 664, 666

frei bewegliche Kette 805

Freie Aktivierungsenthalpie 1031-1033, 1099, 1100

- Marcus-Theorie 1050, 1052, 1053 freie Bewegung, eindimensionale 338, 339

Freie Bildungsenthalpie 130, 131, 266, 285, 286

Standard- 130, 131, 738, 739

- Wasserstoffion (Konvention) 131

freie Energie 125, 126

- Definition 126

- Oberflächenspannung 793

- Zustandssumme 736, 745

Freie Enthalpie

– Änderungen der 137, 138

- Aktivierungs- 1031-1033, 1050, 1052, 1053, 1099, 1100

– Bildungs- 131, 266, 285, 286

– Definition 99, 125, 126

– Druckabhängigkeit 138–141

- Eigenschaften 137, 138

- elektrische Arbeit 283-285

- freiwillige Prozesse 125, 126

- Grenzflächen- 799

– ideale Lösung 237

- ionische Lösung 237

- Lösungs- 820

Minimum der 264

- Mischungs- 190-192

- Mischungs- (ideale Lösung) 198,

- Mischungs- (reguläre Lösung) 200, 201

– Nichtvolumenarbeit 128

partielle molare 187 - Reaktions- 264-266

- reale Lösung 237

- reguläre Lösung 200, 201

statistische Interpretation 737, 738



 $-\Box$ 

Stichwortverzeichnis 1171

- Temperaturabhängigkeit 138, 139

- Zustandssumme 737, 738 freie Expansion 52 Freie Grenzflächenenthalpie 799 Freie Lösungsenthalpie 820 Freie Mischungsenthalpie

- ideale Lösung 198, 199
- ideales Gas 190–192
- reguläre Lösung 200, 201, 220
- teilweise mischbarer Flüssigkeiten

Freie Reaktionsenthalpie 264-266

- und Gleichgewichtszellspannung 283, 284
- und Reaktionsquotient 267, 268 Freie Standardbildungsenthalpie 130, 131
- Zustandssumme 738, 739 Freie Standardreaktionsenthalpie 129, 266

freie Weglänge, mittlere 22, 904, 909

freies Elektron, g-Faktor 676 Freiheitsgrade 48, 162, 580

- Anzahl der 162, 580
- Schwingungs- 580

freiwillige Prozesse 99, 100, 102, 104, 125, 126, 284

- Kriterien 125, 126, 284 Fremdhalbleiter 878 Frenkel, J.I. 117, 887 Frenkel-Defekt 117 Frenkel-Exciton 887 Frequenz 307, 354

- Larmor- 637, 638
- Offset- 688
- Rotationsübergangs- 371
- Stoß- 21, 22
- Winkel- 354, 364, 365, 555

Frequenzbedingung, Bohr'sche 312, 313, 638

Frequenzbereich (FID) 663, 664, 666

Frequenzfaktor 965-967, 1014, 1019

Frequenzgenerator 549

Frequenzmischung 902

Frequenzverdopplung (SHG) 840, 890

FRET 995

Freundlich, H. 1085

Freundlich-Isotherme 1085

Friedrich, W. 847

FT 550, 551, 664-667 FT-Methoden 550 FT-NMR 660, 661 FT-Spektrometer 550 FT-Spektroskopie 550 Fugazität 142, 240 Fugazitätskoeffizient 142 Fundamentalgleichung 134 - der chemischen Thermodynamik

### 137, 187 Funktion

- abgeleitete 695, 696, 736
- Bessel- 753
- Eigen- 325
- Exponential-547
- Extrema 27
- Exzess- 199, 200
- Gauß- 355, 489, 547, 1121
- Krümmung 27
- Kugelflächen- 369
- Langevin- 767, 768, 775
- polynomische 244
- Probe- 450, 451, 472
- radiale Verteilungs- 408-410, 418, 419, 789-791
- Versuchswellen- 450, 451, 472
- Weg- 76
- Wellen- 305, 318
- Zustands- 48, 49

g-Faktor

- des Elektrons 640, 676, 677, 883,
- des Kerns 637 Galilei, G. 5

Galliumarsenid 225

Galvani, L. 1099, 1100, 1106, 1107 Galvani-Potenzialdifferenz 1099, 1100, 1106, 1107

galvanische Zelle 280, 1106, 1107 Galvani-Spannung 1099, 1100, 1106, 1107

Gammastrahlung 308, 309, 888 Gas

- Druck 15
- Eigenschaften 3,4
- ideales 3, 4, 6, 7, 9
- kinetische Gastheorie (KMT) 14
- Löslichkeit in Flüssigkeiten 298
- Mischungen 10, 190-192
- reales 3, 4, 9, 24
- Stoßzahlen 1015, 1016

- Treibhaus- 585 Verflüssigung 81 - 84Gasdruck 15 Gaselektrode 280

Gasentladungslampe 549

Gasgesetz 7 - ideales 8 Gaskonstante 8, 18 – molare 8, 18

Gasmischungen 10 Gassättigungsmethode 180 gasselektive Elektrode 293 Gassolvatation 171

Gastheorie, kinetische (KMT) 14

Gauß (Einheit) 637

Gauß, C.F. 355, 489, 547, 637, 1121 Gaußfunktion 355, 489, 547, 1121

Gaußkurve 355 Gay-Lussac, J.L. 78, 79 Gay-Lussac-Versuch 78, 79 gebundener Zustand 350, 404

Gefrieren 114, 115 Gefrierpunkt 7, 202

- von Wasser 7

Gefrierpunktserniedrigung 202,

Gefrierpunktskonstante 204, 205 Gefriertemperatur 7, 202 gekreuzte Molekularstrahlen 1041 gekrümmte Oberflächen 794, 795

Gel 815, 823 gelöster Stoff - Aktivität 233–235

- chemisches Potenzial 233 geordnete Bewegung 47

gepaarte Spins 445, 449 gepulster Laser 631 gerade Parität 461

gerade Symmetrie 591 gerichtete Geschwindigkeit 14, 339 gerichtete Größe 14, 339

Gerlach, W. 414, 415, 444 Germer, L. 316

gesättigte Lösung 205 Gesamtbahndrehimpuls 432-434 Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl 432, 433

Gesamtdampfdruck 211-213 Gesamtdrehimpuls 429, 433, 595 - zweiatomige Moleküle 595 Gesamtdrehimpulsquantenzahl

432, 434, 708 Gesamtenergie

– der  $\pi$ -Elektronen 485, 486

 $\mathbf{H}$ 曲  $-\mathbf{H}$ 

H

# **1172** Stichwortverzeichnis

- eines Systems 715, 716
- eines Teilchens 46
- eines Zweiniveausystems 716
- quadratischer Beitrag 48, 49 Gesamtentropie 102, 107, 126, 192 Gesamtordnung 950 Gesamtspin 428

Gesamtspindrehimpuls 433 Gesamtspinquantenzahl 429

Gesamtstromdichte 1098

Gesamtwechselwirkung 780-782 Gesamtwellenfunktion 416, 417, 566, 567

geschlossenes System 44 Geschwindigkeit 14, 365

- Adsorptions- 1076-1080, 1085–1088, 1090–1092
- Anfangs- (Methode) 951-953
- Bildungs- 948
- Desorptions- 1080, 1085-1088, 1090-1092
- Diffusions- 908, 909
- Drift- 917-919
- Effusions- 912, 913
- Flucht- 38
- gerichtete 14, 339
- Licht- 307
- Maximal- (enzymatische Katalyse) 984-987
- mittlere 19-21, 904, 905, 909, 1015
- mittlere Relativ- 20, 21
- Momentan- 948
- quadratisch gemittelte 16, 19
- Radial- 354, 364, 365, 555
- Reaktions- 943-945, 949
- Verbrauchs- 948, 949
- wahrscheinlichste 20
- Winkel- 354, 364, 365, 555

geschwindigkeitsbestimmender Schritt 974, 975

Geschwindigkeitsgesetz 943, 944,

949-953, 970

- allgemeine Form 950
- Bestimmung 950-953
- Definition 949
- Eley-Rideal- 1091, 1092
- erster Ordnung 950, 954-956,
- integriertes 943, 954-959
- Langmuir-Hinshelwood- 979
- Michaelis-Menten- 985
- nullter Ordnung 950, 954, 959
- pseudo-erster Ordnung 951

- pseudo-nullter Ordnung 951
- pseudo-zweiter Ordnung
- Übergangszustand 1028
- zweiter Ordnung 950, 956-959 Geschwindigkeitsgradient 906, 914 Geschwindigkeitskonstante 943,
- aktivierungskontrollierte Reaktion 1023
- Definition 949

949-953, 956

- diffusionskontrollierte Reaktion 1023-1025
- effektive 951
- Elektronenübertragung 1049, 1050, 1052-1054
- Eyring-Gleichung 1027, 1030, 1031
- Fluoreszenz 992
- Fluoreszenzlöschung 992, 993
- RRK-Modell (Kassel-Form) 1021
- Stoßtheorie 1018
- Temperaturabhängigkeit 965-967
- Theorie des Übergangszustands 1030, 1031
- unimolekulare Reaktion 1021, 1028
- unimolekulare Reaktion (Kassel-Form) 1021
- Zusammenhang mit der Gleichgewichtskonstante
- zustandsaufgelöste 1042 Geschwindigkeitsverteilung, Maxwell'sche 16, 17, 1038, 1039 Gesetz
- Bohr'sche Frequenzbedingung 312, 313
- Boyle'sches 7
- Bragg'sches 849, 850, 858, 859
- Charles'sches 7
- Coulomb- 46, 132
- Curie- 884
- Dalton'sches 10
- De-Broglie-Relation 316, 318, 856, 857
- De-Broglie-Relation,
- relativistische 1119, 1120
- Debye-Hückel-Grenz- 238-240, 243, 1033, 1034
- Debye-Hückel-Grenz-(erweitertes) 239, 240
- Debye'sches T<sup>3</sup>- 120
- der unabhängigen Ionenwanderung 916

- Dritter Hauptsatz der Thermodynamik 99, 121
- Dulong-Petit-Regel 311
- Energieerhaltungssatz 46
- Erster Hauptsatz der
- Thermodynamik 43, 49
- Erstes Fick'sches 905, 924–927
- Gas- 7
- Geschwindigkeits- (Definition)
- Graham'sches Effusions- 906, 912
- Grenz- 7
- Hebel- 215, 216
- Henry- 195, 196, 233, 234, 237,
- Hess'sches 68
- Hooke'sches 353, 812
- ideales Gas- 7, 8
- Impulserhaltungssatz 15
- integriertes Geschwindigkeits-(Definition) 954
- Kirchhoff'sches 70, 71
- Kohlrausch'sches Quadratwurzel-916
- Lambert-Beer'sches 544
- Newton'sches 15, 353
- Newton'sches Abkühlungs- 147
- Raoult- 193-196, 233, 237, 240
- Rayleigh-Jeans- 309, 310
- Satz von Hess 68
- Stefan-Boltzmann-
- Stokes'sches 917
- Wien'sches 307
- Zeit-(Definition) 949
- Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik 99-101
- Zweites Fick'sches 927, 928
- Zweites Newton'sches 15, 353
- gestreckt 558, 559, 563 Gewicht, statistisches 696-698 gewöhnliche Ableitung 27, 28
- Gibbs, J.W. 99, 125, 126, 139, 162, 188, 189, 737, 738, 799, 800
- Gibbs-Duhem-Gleichung 188, 189 Gibbs-Energie 99, 125, 126, 737,
- Gibbs-Helmholtz-Gleichung 139 Gibbs'sche Isotherme 799, 800
- Bravais- 842, 843

Gitter

- Kristall- 840-845
- kubisch flächenzentriertes (bcc) 842, 843



 $-\Pi$ 

- kubisch raumzentriertes (fcc) 862
- magnetisch geordnete 857, 858 Gitterebenen 843-845 Gitterenergie 867-870 Gitterenthalpie 867-870 - Born-Mayer-Gleichung 868
- Gitterpunkte 841-843 Glanz, metallischer 888, 889 Glanzwinkel 849, 850
- Glaselektrode 292, 293 Glasübergangstemperatur 812, 813 Gleichgewicht
- Aggregations- 821
- Annäherung an das 961, 962
- Bedingung 962, 963
- chemisches 263, 266
- chemisches Potenzial 160
- Dissoziations- 740, 741
- dynamisches 264
- Einfluss der Temperatur 277-279
- Einfluss des Drucks 275-277
- heterogenes 269
- idealer Gase 266
- mechanisches 4, 52
- Reaktionen in der Nähe des 961, 962
- thermisches 52
- thermodynamisches Kriterium
- vorgelagertes 976, 977
- Gleichgewichtsbedingung 962, 963 Gleichgewichtsbindungslänge 447, 597, 598
- Gleichgewichtskonstante
- Berechnung aus der Zustandssumme 739-743
- Berechnung aus
- Standardpotenzialen 291, 292
- Beziehung untereinander 270, 2.71
- Definition 264, 266, 268
- Druckabhängigkeit 270, 271
- Konzentrationsabhängigkeit 943, 961, 962
- molekulare Interpretation 271,
- Temperaturabhängigkeit 277-279
- thermodynamische 268, 269
- und Besetzungszahl 741–743
- und Gleichgewichtszellspannung 285

- Van-'t-Hoff-Gleichung (Reaktionsisobare) 277–279
- Zusammenhang mit der Zellspannung 285
- Zusammenhang mit
- Geschwindigkeitskonstanten 962
- Zusammenhang zwischen Gleichgewichtskonstanten 270,
- Zustandssumme 739-743 Gleichgewichtszellspannung 283, 284
- Zusammenhang mit der Gleichgewichtskonstante 285 Gleichgewichtszusammensetzung
- Einfluss der Temperatur 277-279
- Einfluss des Drucks 275-277 Gleichung
- Arrhenius- 943, 965-969, 1014
- Axilrod-Teller- 780
- barometrische Höhenformel 11, 36, 181, 748
- Berthelot- 31
- Boltzmann- 105, 729, 730, 734
- Born-Mayer- 868
- Born'sche 131, 132
- Butler-Volmer- 1098-1102
- Clapeyron- 172
- Clausius-Clapeyron- 174
- Clausius-Mossotti- 769, 770
- Clausius'sche Ungleichung 110
- Davies- 239, 240
- De-Broglie-Relation 316, 318
- Debve- 769
- Dieterici- 31 - Diffusions- 903, 927-931, 1023,
- Diffusions- (verallgemeinerte)
- 929-931
- Eigenwert- 324, 325, 484, 485
- Einstein- (Ionenbeweglichkeit) 920, 921
- Einstein- (Wärmekapazität) 311, 312, 726
- Einstein-Smoluchowski- 933
- erweitertes Debye-Hückel-Grenz-239, 240
- Eyring- 1027, 1030, 1031
- Fundamental- 134
- Fundamental- (chemische Thermodynamik) 137, 187
- Gibbs-Duhem- 188, 189
- Gibbs-Helmholtz- 139

- Größen- 6
- Karplus- 652
- Kelvin- 791, 801
- Kohn-Sham- 489, 490
- Lamb-Formel 645, 646
- Laplace- 791, 794, 795, 801
- London- 778
- Margules- 236
- Maxwell- 770
- McConnell- 678, 679
- Michaelis-Menten- 985
- Nernst- 283-285
- Nernst-Einstein-Beziehung 920, 921
- phänomenologische 903-906
- Poisson- 242
- quadratische 474, 475
- radiale Diffusions- 1023, 1024
- radiale Wellen- 376, 401
- Rydberg- 400
- Sackur-Tetrode- 731, 732
- Säkular- 474, 479, 481
- Scatchard- 260
- Schrödinger- 305, 318
- Simultan- 974, 1091
- Stern-Volmer- 992, 993 - Stoffbilanz- 1025, 1026
- Stokes-Einstein- 926, 1024
- Stokes'sche 917
- thermochemische 66, 67
- thermodynamische Fundamental-
- thermodynamische Zustands-136, 747
- transzendente 220, 252
- Truesdell-Jones- 239, 240
- Van-der-Waals- 29-31, 745-747, 825, 827
- Van-'t-Hoff-
- (Gleichgewichtskonstante,
- Reaktionsisobare) 277–279 - Van-'t-Hoff- (Osmose) 207, 208
- verallgemeinerte Diffusions-929-931
- Virial- 26, 31, 792, 825, 826
- Wierl- 858
- Zustands- 7, 31
- Gleichverteilungssatz 48, 791
- Gleitebene 870, 874
- globale Erwärmung 585
- Globar 549
- Glorienstreuung 1040
- Glycin, Symmetrie 514

曲

 $-\Pi$ 

H

# **1174** *Stichwortverzeichnis*

Glykolyse 273, 274, 995 - anaerobe 93 Gordan, P. 433, 434 Gouy, L.G. 883, 1097 Gouy-Chapman-Modell 1097 Gouy-Waage 883 Grad Celsius (Einheit) 5 grafische Darstellungen 490 Graham, T. 906, 912 Grahame, D.C. 1097 Grahame-Modell 1097 Graham'sches Effusionsgesetz 906, Graphen 870 Graphit 159, 182, 870 - Struktur 870 Gravimetrie 1076 Grenzdruck 798 grenzflächenaktive Substanzen 798-800 Grenzflächenenthalpie, Freie 799 Grenzgesetz 7 - Debye-Hückel- 238-240, 243, 1033, 1034 - Debye-Hückel- (erweitertes) 239, Grenzleitfähigkeit, molare 916, 917, 919, 920 Grenzorbitale 478, 480, 481, 766, 865, 866, 885, 1051 Größe 5 - extensive 7 - gerichtete 14, 339 - intensive 7 - komplementäre 334 - kritische 28 - partielle molare 184, 185 - physikalische 5, 1122 - reduzierte 31 - vektorielle 14, 339 Größengleichung 6 großkanonisches Ensemble 721 Grotrian, W. 427, 428 Grotrian-Diagramm 427, 428

Grotthuß, T. v. 919

- Bestimmung 510

Gruppe

Grotthuß-Mechanismus 919

Grundübergang 571, 582, 583

Grundzustand 405, 466, 467, 595

- Definition 508-510, 515, 516

dreidimensionale Rotations 513

Grundton 571, 582, 583

- Hermann-Mauguin-System 508, 509 - ikosaedrische 512, 513 - Internationales System 508, 509 - kubische 512, 513 - oktaedrische 512, 513 - Punkt- 508-513 - Raum- 508 - Schönflies-System 508, 509 - Symmetrie- 508-510 - tetraedrische 512, 513 Gruppe des Periodensystems 421 Gruppentheorie 505, 515 - Grundlagen 515-517 - irreduzible Darstellungen 519-521 - Matrixdarstellungen 517-520 - Orthogonalitätstheorem 521 GTO 489 Gummi 837 Gunn, J.B. 549, 641 Gunn-Diode 549 Gunn-Oszillator 641 Guoy, L.G. 883 Guoy-Waage 883 Gyrationsradius 807-809 gyromagnetisches Verhältnis - des Elektrons 640 - des Kerns 637 Н Haber, F. 869, 870 Hämolyse 209 häufige Kerne 670 halbdurchlässige Membran 206 Halbleiter 875-879 - Definition 875 - extrinsischer 878 - Fremd- 878 - III/V- 225 - intrinsischer 878 - Leitungsband 877, 878 - Löcher 877, 878 - n-Typ- 878, 879 - p-Typ- 878, 879 Valenzband 877, 878 - Verbindungs- 878 Halbreaktion 280, 281 - Reaktionsquotient 281 Halbwertsbreite 668

Halbwertszeit

956

- der Desorption 1087

- Reaktion erster Ordnung 955,

414 353, 354 703, 704 361 357 357, 358 Hartree, D.R. 424, 425, 441 Hartree-Fock-Methode des selbstkonsistenten Feldes

- Reaktion *n*-ter Ordnung 957 Reaktion zweiter Ordnung 957 Halogenlampe 549 Hamilton, W. 324, 325, 413, 414, 456, 481, 483, 486, 487 Hamilton-Matrix 481, 483, 486, 487 Hamilton-Operator 324, 325 - des Wasserstoffmolekül-Ions 456 - von Mehrelektronenatomen 413, wasserstoffähnlicher Atome 400 Hanes, C.S. 1009 Hanes-Diagramm 1009 Hardy, W.B. 818 Harmonische 571, 582, 583 harmonische potenzielle Energie harmonische Schwingung 353, 354 - Energieniveaus 354, 570 harmonischer Oszillator – Besetzungszahl 704 Energieniveaus 354, 355, 570, - Innere Energie 727 - mittlere Energie 358-360, 718 - Nullpunktsenergie 354 - potenzielle Energie 353, 354, 569 quadratisch gemittelte Auslenkung 931 - Randbedingungen 353 - Rückstellkraft 354 Schrödinger-Gleichung 353, 356, - Tunnelwahrscheinlichkeit 360, - Umkehrpunkt 354, 358 - Variablentrennung 376, 377 Wahrscheinlichkeitsdichte 356, - Wellenfunktionen 355-358 - Wellenfunktionen, normierte - Winkelgeschwindigkeit 354 – Zustandssumme 703, 704 Harned, H.S. 287, 289 Harned-Zelle 287, 289 Harpunenmechanismus 1020 Hartkugelpotenzial 726, 745-747, 780, 791, 826 Hartree (Einheit) 441

(HF-SCF) 424, 425, 488





 $-\mathbf{H}$ 

Ħ

Hauptdrehachse 507, 558 Hauptgruppenelemente, Atomradien 422 Hauptquantenzahl 341, 404 Hauptsatz der Thermodynamik - Dritter 99, 121 - Erster 43, 49 - Zweiter 99-101 hcp 861-863, 874 HDP 861-863, 874 Hebelgesetz 215, 216 Heisenberg, W. 305, 332–335 Heisenberg'sche Unschärferelation 305, 332-335 heiße Quelle 101, 102 Heizen, elektrisches 54, 55, 90 Helium - Energieniveaus 428, 429 - hypothetisches Dimer 463 - Phasendiagramm 165, 166 - suprafluides 166 - Tripelpunkt 165 - Wellenfunktion 414 Helix 743, 783, 785, 804, 858, 859 Helmholtz, H. v. 125, 126, 139, 736, 745, 1097 Helmholtz-Energie 125, 126, 736, 745, 794 Helmholtz-Modell der Doppelschicht 1097 Helmholtz-Schicht (AHS) - äußere 1097 Helmholtz-Schicht (IHS) - innere 1097 Henry, W. 195, 196, 233, 234, 237, 240 Henry-Gesetz 195, 196, 233, 234, 237, 240 Henry-Konstante 195, 196 Hermann, C. 508, 509 Hermann-Mauguin-System 508, Hermite, C. 327-329, 355, 356 Hermite-Polynom 355, 356 hermitescher Operator 327–329 Hermitizität 327-329 Hertz (Einheit) 307, 354 Hertz, H.R. 307, 354 Hess'scher Satz 68 heteroatomare zweiatomige Moleküle 471-476

- Orbitalenergien 475

heteroatomares Spinsystem 656

 $\mathbf{H}$ 

曲

heterogene Katalyse 1067, 1089-1095 heterogener Katalysator 1089 heterogenes Gleichgewicht 269 Heterogenitätsindex 803, 804 hexagonal dichte Kugelpackung (HDP, hcp) 861-863, 874 hexagonales Kristallsystem 842 HF-SCF 424, 425, 488 Hinshelwood, C. 979, 980, 1021, 1090-1092 Hintergrundstrahlung, kosmische 553, 621 Hochtemperatursupraleiter (HTSC) 879, 880, 885 höchstes besetztes Molekülorbital (HOMO) 478, 480, 481, 766, 865, 866, 885, 1051 Höhenformel, barometrische 11, 36, 181, 748 Hofstee, B.H.J. 1009 Hohlraum 794, 795 HOMO 478, 480, 481, 766, 865, 866, 885, 1051 homoatomare zweiatomige Moleküle 448-455 - Orbitalenergien 462, 475 homoatomares Spinsystem 656 Homogenisierung 815, 816 Homogenitätsverbreiterung 668 Hooke, R. 353, 812 Hooke'sches Gesetz 353 - statistisches Knäuel 812 HTSC 879, 880, 885 Hückel, E. 238-240, 446, 480, 481, 483, 817, 1033, 1034 Hückel-Methode 446, 480 - Matrixformulierung 481, 483 Hückel-Näherung 446, 480, 481 Hull, A. 848 Humphreys, C.J. 443 Humphreys-Serie 443 Hund, F. 419, 420, 436, 462, 654, 680 Hund'sche Regeln 419, 420, 436, 462, 654, 680 Hush, N.S. 1050 Hybridisierung 445, 452–455 und Bindungswinkel 454 Hybridorbital 452–455 - Linearkombination (VB-Theorie) 448

- sp- 454, 455

 $- sp^2 - 454, 455$  $-sp^3$ - 452, 453, 455 Hydratationsenthalpie 131 hydrodynamische Strömung 1038 hydrodynamischer Radius 918, 926, 1024 hydrophil 815 hydrophob 815 hydrophobe Wechselwirkung 762, 819, 820 Hydrophobizitätskonstante 820 hydrostatische Belastung 872 hydrostatischer Druck 792, 793 Hyperfeinaufspaltung 677–680 Hyperfeinkopplungskonstante 677-680 Hyperfeinstruktur (ESR-Spektrum) 677-680 Hyperfläche 1042-1047 - attraktive 1046 - repulsive 1046, 1047 Hyperpolarisierbarkeit 765, 890 hypertonische Lösung 209 hypotonische Lösung 209 IC 607, 608, 989-991 ideal verdünnte Lösung 195, 196, - Aktivität des gelösten Stoffs 234 - chemisches Potenzial des gelösten Stoffs 234 ideale Gaskonstante 8, 18 ideale Lösung 193, 194, 198, 199, 207, 208 - chemisches Potenzial 194 - Freie Enthalpie 237 - Freie Mischungsenthalpie 198, 199 - Gesamtdampfdruck 212 - Mischungsenthalpie 198 - Mischungsentropie 198, 199 - Van-'t-Hoff-Gleichung 207, 208 - Zusammensetzung des Dampfs 211

idealer Kristall 121, 730, 789
ideales Elastomer 89, 811, 812
ideales Gas

- Definition und Grundlagen 3, 4, 6, 7, 9

- Freie Mischungsenthalpie 190–192

ideale Mischungen 193, 194, 198,

199, 207, 208, 211, 212

### **1176** *Stichwortverzeichnis*

- Gleichgewicht 266

isotherme reversible Expansion

- Mischungsenthalpie 192

- Mischungsentropie 192

- Stoßfluss 906-908

– Temperaturskala 5, 6

- Transporteigenschaften 903-905

- Zustandsgleichung 7,8 ideales Gasgesetz 7, 8, 31 Identität 508

IHS 1097

ikosaedrische Gruppe 512 Imaginärteil einer Zahl 319 **Impuls** 

364, 365, 371, 372, 555, - Dreh-556

- Fluss 906

- linearer 14, 365

Impulserhaltungssatz 15 Impulsoperator 327, 329, 330, 332, 334, 338, 339, 343

Impulsunschärfe 332-334 Indikatordiagramm 51, 52 Indizes, Miller'sche 843-845 Induced-Fit-Modell 984 Induktion

- frei abklingende (FID) 663-667, 688, 689

- magnetische 643, 647, 884, 885 Induktionsperiode 973 induzierte Absorption 542, 543 induzierte Emission 542, 543 induziertes Dipolmoment 564, 565, 611-613, 763, 765, 766 induziertes Magnetfeld 643, 647 induziertes magnetisches Moment

inelastische Neutronenstreuung 914

infrarotaktiv 570, 582, 584 Infrarotaktivität 570, 582, 584, 590

- Auswahlregeln 570, 582

- Normalschwingungen 582, 584, 590, 591

Infrarotchemilumineszenz 1041, 1042

infrarotinaktiv 571, 582 Infrarotspektroskopie 570, 571

- Auswahlregeln 571 Infrarotstrahlung (IR) 308

 ferne (FIR) 308 - nahe (NIR) 308

Inhibitor 987

Inhomogenitätsverbreiterung 668 inkompressibel 792, 793 inkongruentes Schmelzen 226 Innenwiderstand, Ohm'scher 1106, 1107

innenzentrierte Elementarzelle 842

Innere Energie

- Änderung 49, 50, 57, 77

- Definition 48

- Eigenschaften 134-137

 eines Systems aus harmonischen Oszillatoren 727

- Flüssigkeiten 792

- molare 48

- molekulare Interpretation 48, 49

- Temperaturabhängigkeit 49

- Volumenabhängigkeit 49, 78

- Zustandsfunktion 48

- Zustandssumme 695, 727

innere Helmholtz-Schicht (IHS) 1097

innere Umwandlung (IC) 607, 608, 989-991

Integral

- bestimmtes 18, 1121, 1122

- Coulomb- 474-476

- Konfigurations- 725, 745, 746,

- Resonanz- 474

– Überlappungs- 457, 459, 464-466, 474, 497, 498

- unbestimmtes 18, 1121, 1122

- verschwindendes 526-528 integraler Absorptionskoeffizient 545, 546

Integralrechnung 18 Integrand 18 Integration 18 - partielle 327, 328 integriertes Geschwindigkeitsgesetz

943, 954-959 erster Ordnung 954–956, 959

- nullter Ordnung 954, 959

- zweiter Ordnung 956-959 Intensität

- NMR-Signale 639, 640

- Röntgenbeugung 856, 858 intensive Größe 7

Interferenz 308, 463, 849 Interferogramm 550-552 Interferometer 550, 552

- Michelson- 550 Intermediat 971–977 intermolekulare potenzielle Energie

- große Moleküle 816, 817

Van-der-Waals-Gleichung 29-31, 745-747, 825, 827

intermolekulare Stöße 21

intermolekulare Wechselwirkungen 24, 761, 772

Internationales System

(Symmetriegruppen) 508, 509 Intersystem Crossing (ISC) 607,

989-991 intrinsischer Halbleiter 878 invariantes System 163

Invarianzbedingung 526 inverse Fourier-Transformation 664-666

inverse Matrix 482 inverse Mizelle Inversion 507

Inversion-Recovery-Experiment 669, 670

Inversionssymmetrie 461, 507 Inversionstemperatur 81, 83 Inversionszentrum 461, 464, 507, 511, 514

invertierte Region 1054 Ion-Dipol-Wechselwirkung 772, 773

Ionen 237

- Aktivität 237

- Beweglichkeit 917-921

- Bildungsenthalpie (Konvention)

- Entropie (Konvention) 122, 123

- Radius 422, 423, 866, 867

- Reaktionen zwischen Ionen 1033-1035

Ionenaktivität 237

Ionenbeweglichkeit 917-921

Einstein-Gleichung 920, 921 Ionenkanäle 921, 922

Ionenleitfähigkeit 915-917

Ionenpumpen 921, 922

Ionenradius 422, 423, 866, 867

ionenselektive Elektrode 292, 293

Ionenstärke 238, 239 Ionentransport 921, 922

Ionenwolke 238, 241

Ion-Ion-Wechselwirkung 777

Ionisationsmanometer,

Bayard-Alpert- 5

ionische Bindung 866–870

曲  $-\mathbf{H}$ 

ionische Lösung 237 - Leitfähigkeit 915-917 ionischer Festkörper 866–870 ionisch-kovalente Resonanz 450, 451 Ionisierung, photochemische 988 Ionisierungsenergie 405, 423 - erste 423 - zweite 423 irreduzible Darstellung 519–521 - totalsymmetrische 521, 526-529 irreversible Elektrode 1102 IR-Strahlung 308 ISC 607, 989-991 isenthalper Prozess 81–83 Isobare 8, 9 isobares Kalorimeter 60 Isochore 8, 9 isoelektrischer Punkt 818 Isolator 875 Isoliermethode 950, 951 isoliertes System 44 Isomerisierung 988 Isoplethe 215 isosbestischer Punkt 616 Isostearinsäure 798 isostere Adsorptionsenthalpie 1080-1082 Isotherme - Adsorptions- 1078-1085 - Brunauer-Emmett-Teller- (BET) 1082-1085, 1109-1111 - Definition 7-9 - Freundlich- 1085 - Gibbs'sche 799, 800 - kritische 25 - Langmuir- 1078-1082 - Temkin- 1085 - Van-der-Waals- 30-32 isotherme Kompressibilität 79, 80, 182, 873, 890-892 isotherme reversible Expansion 53 isotherme Titrationskalorimetrie (ITC) 72, 73 isotonische Lösung 209 Isotopeneffekt, kinetischer 1035-1037 Isotopenmarkierung 684 Isotopologe 563 ITC 72, 73

Jablonski, A. 607

Jablonski-Diagramm 607

Jahr (Einheit) 1122 Jeans, J.H. 309, 310 jj-Kopplung 435, 436 Jones, B.F. 239, 240 Josephson, B.D. 883 Josephson-Kontakt 883 Joule (Einheit) 45, 55, 918, 1123 Joule, J.P. 45, 55, 78, 79, 81, 918, 1123 Joule-Experiment 78, 79 Joule-Thomson-Effekt 81-84 Joule-Thomson-Koeffizient 81, 83 Käfigeffekt 1022 Kälteerzeugung 102, 111 Kältemaschine - Wirkungsgrad 108 Kältemaschine, Linde- 82 Kalomelelektrode 292 Kalorimeter 54, 72 - adiabatisches Bomben- 54, 55 - adiabatisches Verbrennungs- 60 - Bomben- 54, 55 - Differenzial- (DSC) 60, 61, 71, 72 - isobares 60 - Konstante 55 Verbrennungs- 60 Kalorimeterkonstante 55 Kalorimetrie 54, 60 - isotherme Titrations- (ITC) 72, - Messung der Entropie 119 kalte Senke 101, 102 kanonische Verteilung 722, 723 kanonische Zustandssumme 722-724, 745 - abgeleitete Funktionen 695, 696, 736 kanonisches Ensemble 695, 721, Kante (Fehlstelle) 1068, 1069 Kapazitätsmanometer 5 Kapillardepression 796 Kapillarmethode 930 Kapillarwirkung 761, 795–797 Karplus, M. 652 Karplus-Gleichung 652 Kassel, L.S. 1021, 1055-1057 Kassel-Form (Geschwindigkeitskonstante)

1021

- formselektiver 1089, 1090 - heterogener 1089 Katalyse - Auto- 1011 - enzymatische 984-987 - heterogene 1067, 1089-1095 katalytische Aktivität 1092, 1093 katalytische Effizienz 1008 katalytisches Reformieren 1094 Kathode 281 kathodische Stromdichte 1098, 1099, 1102 KDP 861-863, 874 Keesom, W.H. 775, 776 Keesom-Wechselwirkung 775, 776 Keimbildung, spontane 801 Kekulé, F.A. 451 Kekulé-Struktur 451 Kelvin (Einheit) 6, 7, 1123 Kelvin-Gleichung 791, 801 Kelvin'sche Formulierung des Zweiten Hauptsatzes 101 Kelvin-Temperaturskala 6, 7, 109, Keramiken 879 Kernabstand, wahrscheinlichster Kerne - äquivalente 654, 655 - häufige 670 - seltene 670 - stark gekoppelte 656 Kern-g-Faktor 637 Kernladung 400, 418, 419, 422, 423 - abgeschirmte 418 - effektive 418, 419 Kernladungszahl 399, 400, 402, 403, 410, 419, 420, 422, 423, 431, Kernmagneton 637 Kern-Overhauser-Effekt (NOE) 635, 670-673 - Verstärkungsfaktor 672, 673 Kernspin 415, 567, 568, 636, 637, 677, 678 Kernspinquantenzahl 636 Kernspinresonanz, magnetische (NMR) 635, 636 Kernspintomografie (MRT) 636, 673, 674, 684 Kernstatistik 566-568 Kettenabbruch 982, 983

Katalysator 969, 984, 1092-1095





# H

 $-\Box$ 

# **1178** Stichwortverzeichnis

Kettenlänge

- kinetische 983

- mittlere 981

Kettenpolymerisation 980, 982, 983

Kettenreaktion 980, 982, 983

- Radikal- 982, 983

Kettenregel, Euler'sche 57

Kettenstart 982

Kettenträger 982

Kettenübertragung 982

Kettenwachstum 982

Kevlar 830

Kilogramm (Einheit) 5, 6, 1123

Kinetik

- chemische 943-945, 954

- von Polymerisationen 980

kinetische Energie

- Definition 45

- der Rotation 364, 365, 706, 707

- der Translation 365, 706, 707

- Krümmung 326

kinetische Gastheorie (KMT) 14

kinetische Kettenlänge 983

kinetische Kontrolle 977

kinetische Translationsenergie

365, 706, 707

kinetischer Druck 792

kinetischer Isotopeneffekt

1035-1037

kinetischer Salzeffekt 1033-1035

Kirchhoff, G.R. 70, 71

Kirchhoff'sches Gesetz 70, 71

Klasse (Symmetrie) 516, 517

klassische Mechanik 305, 306, 335,

342, 343, 355

Klimawandel 585, 586

Klystron 549, 641

KMT 14

Knipping, P. 847

Knoten 320, 341, 342, 356, 357,

366, 370

- radialer 370

Knotenebene 410, 411

Knudsen, M. 912, 913

Knudsen-Methode 912, 913

Koadsorption 1089

Koagulation 817, 818

Koaleszenz 657 Kobreite 368

Kobreite 36 Koeffizient

- Absorptions- 544-546, 601

- Aktivitäts- 233–235

- Ausdehnungs- 79, 80

der thermischen Ausdehnung 79, 80, 155

- Diffusions- 905, 908-910, 920,

921, 926, 1024, 1072

- Einstein- 542, 543

- Extinktions- 544

- Fugazitäts- 142

- integraler Absorptions- 545, 546

- Joule-Thomson- 81, 83

- Kohlrausch- 916, 917

- Leistungs- 111

- mittlerer Aktivitäts- 237-239

- molarer Absorptions- 544, 545, 601

- osmotischer 260

- osmotischer Virial- 208

- Selektivitäts- 293

- stöchiometrischer 67, 70, 267

- Transmissions- 1028, 1029

- Transport- 906-912

- Van-der-Waals- 29, 745, 825, 827

- Virial- 26, 745, 747, 825-827

- Viskositäts- 906, 911, 912, 917

- Wärmeleitfähigkeits- 905,

909-911

Koexistenzkurve 160, 161, 171

kohärente

Anti-Stokes-Raman-Spektroskopie

(CARS) 1041

kohärentes Licht 630, 631

Kohäsionsenergiedichte 832 Kohäsionskräfte 772, 789, 796, 797

Kohlendioxid

- Dipolmoment 763

- kritische Isotherme 25

- Normalschwingungen 581

- Phasendiagramm 164

- Tripelpunkt 164

- überkritisches 166, 167

- Zustandssumme 711

Kohlenmonoxid,

Nullpunktsentropie 734

Kohlenwasserstoffe

- lineare 500, 501, 1093, 1094

- zyklische 499, 500

Kohlrausch, F. 916, 917

Kohlrausch-Koeffizient 916, 917

Kohlrausch'sches

Quadratwurzelgesetz 916

Kohn, W. 489, 490

Kohn-Sham-Gleichungen 489, 490

kolligative Eigenschaften 201, 202 Kolloide 762, 815–817

– Stabilität 816, 817

Kombinantionsbanden 583 Kombinationsdifferenzen 576, 577 Kommutatoren

- des Drehimpulses 372

- von Ort und Impuls 334

komplementäre Observable 334 komplette Vernachlässigung der

differenziellen Überlappung (CNDO) 488, 489

Komplex

- aktivierter 967, 968, 1013, 1027–1029, 1031–1033, 1100

- d-Metall- 603

- Wirt-Gast- 785, 786

komplexe Ebene 330

komplexe Zahlen 319, 320

Komponente 162

Kompressibilität, isotherme 79, 80,

182, 873, 890–892

Kompression, Einfluss auf das

Gleichgewicht 275-277

Kompressionsfaktor 25

- kritischer 32

Kompressionsmodul 873, 874, 890–892

Kondensation 761, 791, 801

Kondensationskeime 801 Konfiguration

- Atom- 414

- dominierende 722

eines Systems 696–698Elektronen- 462–464, 467,

592-594

- Gewicht einer 696–698

- momentane 696

- statistische 696-698

zweiatomige Moleküle 462–464
 Konfiguration im Grundzustand

405, 466, 467, 595homonukleare, zweiatomige Moleküle der zweiten Periode

466, 467 Konfigurationsintegral 725, 745, 746, 790

Konformation 804, 805

Konformationsentropie 810–812 Konformationsumwandlung

656–658 kongruentes Schmelzen 226 konjugiert komplexe Zahl 319

Konode 214, 215 Konsekutivreaktionen 971–973

### Konstante

- Abschirmungs- 418, 643, 645-648
- Anharmonizitäts- 572, 573
- Avogadro- 6
- Boltzmann- 2, 7, 104, 700, 949
- Dielektrizitäts- 46, 166, 769
- ebullioskopische 204
- effektive Geschwindigkeits-(Definition) 951
- elektrische Feld- 46, 132, 400, 765, 766
- Faraday- 242, 284, 919
- Feinstruktur- 378
- Gas- 8, 18
- Gefrierpunkts- 204, 205
- Geschwindigkeits- (Definition)
- Gleichgewichts- 264, 266, 943, 961
- Henry- 195, 196
- Hydrophobizitäts- 820
- Hyperfeinkopplungs- 677-680
- Kalorimeter- 55
- Kraft- 353, 569, 570
- kritische 28
- kryoskopische 204, 205
- Lamé- 898
- Lichtgeschwindigkeit 307
- Lösch- 992-994
- Madelung- 867, 868
- magnetische Feld- 645, 648, 884
- Michaelis- 985
- molare Gas- 8, 18
- Normierungs- 321, 355, 357, 363
- Planck- 310, 315
- Planck'sches Wirkungsquantum 310, 315
- Rotations- 558, 576, 577, 600, 601, 710
- Rydberg- 400, 404, 405
- Siedepunkts- 204
- skalare Kopplungs- 649, 652
- Spin-Bahn-Kopplungs- 430–432
- Spin-Spin-Kopplungs- 649, 652
- Zentrifugaldehnungs-
- Konstituent 162

konstruktive Interferenz 308, 463, 849

Kontaktwechselwirkung, Fermi-653, 654, 680

Kontaktwinkel 796, 797 Kontinuum 608 Kontrastmittel 674

Kontrolle, kinetische 977

Konturlänge 807

Konturliniendiagramm 783, 784

Konvektion 928, 929, 1025 Konvektionsfluss 1025

Konvergenz 204, 571, 572

Konzentration 189, 190, 927–929

- molare 189, 190, 948

Konzentrationsgradient 905, 925-928

Konzentrationspolarisation 1103 Konzentrationszelle 281, 282

- Elektroden- 281, 282
- Elektrolyt- 281, 282

kooperativer Übergang 743, 744

Koopmans, T.C. 468, 469

Koopmans-Theorem 468, 469 Koordinationszahl 423, 862, 863,

866, 867

Kopfgruppe 821, 822

Kopplung

- Hyperfein- 677-680
- jj- 435, 436
- Russell-Saunders- 434-436
- skalare 649-654
- Spin-Bahn- 429-431, 595
- Spin-Spin- 649-656
- Kopplungskonstante
- Hyperfein- 677-680
- skalare 649, 652

Korrelationsanalyse 1033 Korrelationsdiagramm 436

Korrespondenzprinzip 342, 343 kosmische Hintergrundstrahlung

553, 621

kosmische Strahlung 308 kovalente Bindung 458 kovalenter Festkörper 870, 871

Krafft, F. 820

Krafft-Temperatur 820

Kraft

- Definition und Einheiten 5, 6, 15, 1123
- elektromotorische (EMK) 283
- Rückstell- (harmonischer Oszillator) 354
- Rückstell- (statistisches Knäuel)
- thermodynamische 903, 924, 925 Kraftkonstante 353, 569, 570
- abgeplatteter 558, 559, 563
- Entartung 559, 560
- gestreckter 558, 559, 563

- linearer 560, 562, 563
- sphärischer 556–558
- starrer 555, 560, 561
- symmetrischer 558-560
- Kreisprozess 106, 148, 869, 870
- Born-Haber- 869, 870
- Carnot- 106
- Otto- 148
- thermodynamischer 106

Kristall

- aperiodischer 841
- Ebenen 843-845
- Ein- 848, 849
- Fehlstellen 117, 1067-1069
- Flüssig- 227, 228
- Gitter 840-845
- idealer 121, 730, 789
- Nano- 351
- Oberfläche 1067-1069
- periodischer 841, 842
- Ouasi- 841

Kristalldefekte 117, 1067-1069

Kristalldiode 551

Kristallebenen 843-845

Kristallgitter 840-845

Kristallinität (Polymere) 812 Kristallografie 839, 840, 847–851,

858, 859

Kristallstrukturen 839-845, 861, 862

Kristallsysteme 841-843 Kriterien der Freiwilligkeit 125,

126, 284

kritische Größen 28

kritische Isotherme 25

kritische Konstanten 28 kritische Mischungstemperatur

- 220, 221
- obere 220 - untere 221
- kritische Mizellenkonzentration

(CMC) 820-822

kritische Temperatur 25, 28, 161, 885

- Magnetismus 885
- Supraleitfähigkeit 885
- kritischer Druck 28, 161
- kritischer Kompressionsfaktor 32
- kritischer Mischungspunkt 231 kritischer Punkt 25, 28, 160
- kritischer Realfaktor 32
- kritisches molares Volumen 28 Krümmung
- Diffusion 928





 $-\Box$ 

# **1180** *Stichwortverzeichnis*

- Funktion 27, 326, 327 kinetische Energie 326 kryoskopische Konstante 204, 205 K-Strahlung 848 Kubikmeter (Einheit) 6 kubisch dichte Kugelpackung (KDP, ccp) 861-863, 874 kubisch flächenzentriert (fcc) 862 kubisch raumzentriert (bcc) 842, 843 kubische Elementarzelle 842 kubische Gruppen 512, 513 kubisches Kristallsystem 842 Kühlschrank 102, 111 Kugelflächenfunktionen 369, 370 Kugelkoordinaten 367-369, 375, 408, 427, 646, 767 Kugelpackungen, dichte 861-864 kumulierte Reaktionswahrscheinlichkeit

Ladung, elektrische 55 Ladungsdichte 242 Ladungs-Dipol-Wechselwirkung 772, 773 Länge 1122, 1123 Längenausdehnung (Arbeit) 51 Lagendre, A.-M- 368 Lagendre-Operator 368 Lagrange, J.-L. 699, 700 Lagrange-Verfahren 699, 700 Laguerre, E.N. 402 Laguerre-Polynom, assoziiertes 402 Lamb, W.E. 645, 646  $\lambda$ -Linie 165, 166 Lambert, J.H. 544 Lambert-Beer'sches Gesetz 544 Lamb-Formel 645, 646 Lamé, G. 898 Lamé-Konstanten 898 laminare Strömung 906 Landau, L. 817 lange Periode 421 Langevin, P. 767, 768, 775 Langevin-Funktion 767, 768, 775 Langmuir, I. 797, 1078–1082, 1090-1092 Langmuir-Blodgett-Schicht 797 Langmuir-Hinshelwood-Mechanismus 1090-1092 Langmuir-Isotherme 1078–1082

Langmuir-Waage 797 Lanthanoide (Lanthanide) 421, 422 Lanthanoiden-Kontraktion 422 Laplace, P.-S. 242, 367, 368, 791, 794, 795, 801 Laplace-Gleichung 791, 794, 795, Laplace-Operator 242, 367, 368 Laporte, O. 596, 602, 603 Laporte-Auswahlregel 596, 602, 603 Larmor, J. 637, 638, 644, 645 Larmor-Frequenz 637, 638 - chemische Verschiebung Larmor-Präzession 638 Laser 549, 552, 605, 609, 610, 630, 631, 889, 890 - Dauerstrich- 631 - Dioden- 889, 890 - Festkörper- 610 - gepulster 631 - Nd:YAG 610, 890 - Neodym- 610, 890 - Pumpen 609, 610, 890 - resonante Moden 630 - Resonator 630, 890 - Vier-Niveau-Laser 609, 610 laserinduzierte Fluoreszenz 1041 Laserstrahlung 609 Laue, M. v. 847, 848 LCAO 411, 456, 457, 530, 863, 864 LCAO-MO 456, 457, 462, 479, 530, 863, 864 LCD 227, 228 Le Chatelier, H.L. 276 Le Chatelier-Prinzip 276 Lebensdauer - beobachtete 547, 548 Fluoreszenz- 991 von Systemzuständen 547, 548 Lebensdauerverbreiterung 547, 548 LED 549, 889 LEED 1070, 1074-1076

Legendre, A.-M. 368 Legendre-Operator 368 Legierung 158 Leistung 45, 1123 - elektrische 55 Leistungskoeffizient 111 Leitfähigkeit - dielektrische 46, 769

- elektrische 875, 876, 899 – ionischer Lösungen 915–917

- molare 915, 916, 919, 920, 938, 939

- molare Grenz- 916, 917, 919, 920 spezifische 915, 916, 919 Leitungsband 877, 878, 889 Leitwert, elektrischer 899, 915 Lennard-Jones-(12,6)-Parameter 781.873

Lennard-Jones-(12,6)-Potenzial 781, 782, 873, 874 Lennard-Jones, J.E. 781, 782, 873,

874 Leuchtdiode (LED) 549, 889

Levich, B.G. 1050 Lewis, G.N. 467, 625, 648, 686

Lewis-Base 648 Lewis-Säure 648

Lewis-Struktur 467, 625, 686

LFER 1033

LH-Mechanismus 1090–1092 Licht

- Absorption 541, 542, 887–889 - Beugung 308

- Brechung 770 - Energie 592

- Farbe 307, 308, 592 - Frequenz 592 - kohärentes 630, 631 - sichtbares 307, 308

- weißes 307, 308

- Teilchencharakter 305, 313, 316

Lichtbogen 549 Lichtbrechung 770 Licht-emittierende Diode (LED) 549, 889 Lichtgeschwindigkeit 307

Lichtsammelkomplex 994, 995 Lichtstärke 1123 Ligandenfeldaufspaltung 602 Ligand-zu-Metall-Charge-Transfer-Übergang (LMCT) 603 Linde, C.P.G. 82 Linde-Kältemaschine 82 Lindemann, F. 979, 980, 1021 Lindemann-Hinshelwood-Mechanismus 979, 980, 1021

Linde-Verfahren 82 lineare Kohlenwasserstoffe 500,

lineare Voltammetrie 1103, 1104 lineare-Freie-Enthalpie-Beziehung (LFER) 1033



 $-\mathbf{H}$ H

linearer Impuls 14, 365 linearer Kreisel 560

- Auswahlregeln 562, 563
- Energieniveaus 562, 563

lineares System, Energieniveaus 354, 570

Linearkombination 330, 331, 411, 417, 448

- symmetrieadaptierte (SALK) 519, 530-532
- von Atomorbitalen (LCAO) 411, 456, 457, 530, 863, 864
- von Hybridorbitalen (VB-Theorie) 448

Lineweaver, H. 985, 986 Lineweaver-Burk-Auftragung 985, 986

Linienbreite, natürliche 546, 548 Linienform 546, 547

Linienverbreiterung 546-548, 668

- Doppler- 546, 547
- homogene 668
- inhomogene 668
- Lebensdauer- 547, 548

Lipid-Doppelschicht 227, 822, 823, 921

Liposom 821 Liter (Einheit) 1122

Lithiumatom 416, 417, 419, 420, 424

LMCT 603

Löcher (Halbleiter) 877, 878 Löschung (Fluoreszenz) 605, 606, 991-994

- Geschwindigkeitskonstante 992-994
- Mechanismen 993-995 Löslichkeit 205, 206, 298
- eines idealen gelösten Stoffs 206
- Temperaturabhängigkeit 206
- von Gasen in Flüssigkeiten 298 Lösung
- Eigenschaften 198
- Gefrierpunktserniedrigung 202,
- gesättigte 205
- hypertonische 209
- hypotonische 209
- ideal verdünnte 195, 196, 234
- ideale 193, 194, 198, 199
- ionische 237, 915-917
- isotonische 209
- reale 234

- reguläre 199-201, 236, 237
- Siedepunktserhöhung 202–204 Lösungsenthalpie 820 Lösungsentropie 820
- Lösungsmittel
- Aktivität 233
- Beitrag zur Abschirmungskonstante 645,
- chemisches Potenzial 233

lokaler Beitrag zur Abschirmungskonstante 643, 645, 646

lokales Magnetfeld 643, 648, 658 London, F.W. 777, 778

London, H. 778

London-Gleichung 778

London-Wechselwirkung 777, 778 longitudinale Relaxation 667, 668 longitudinale Relaxationszeit

667-670 Lord Kelvin (Thomson, E.) 6, 81,

101, 791, 801, 1123

Lorentz, H.A. 666, 668

Lorentz-Absorptionslinie 666, 668

Lot / Lötzinn 224

Luftfeuchtigkeit, relative 34 LUMO 478, 480, 481, 766, 865, 866,

Lyman, T. 400 Lyman-Serie 400

lyophil 815 lvophob 815

lyotrope Mesomorphe 822

Maclaurin, C. 204 Maclaurin-Reihe 204 Madelung, E. 867, 868 Madelung-Konstante 867, 868 Magic-Angle-Spinning (MAS) 659 Magnet (NMR-Spektrometer) 638,

Magnetfeld 637, 643, 647, 648, 652, 653

- lokales 643, 648, 658
- von Dipolen 647, 648 Magnetfeldstärke 882, 883

magnetisch äquivalente Kerne 654 magnetisch geordnete Gitter 857,

magnetische Eigenschaften

- von Festkörpern 840, 882
- von Supraleitern 879, 885

- magnetische Feldkonstante 645, 648, 884
- magnetische Feldstärke 882, 883 magnetische Flussdichte 637, 883 magnetische Induktion 643, 647,
- magnetische Kernspinresonanz (NMR) 635, 636
- magnetische Quantenzahl 363, 369, 370, 404
- magnetische Resonanz 635, 636 magnetische Spinquantenzahl 415 magnetische Suszeptibilität 647, 840, 882-884
- molare 883, 884
- magnetische Volumensuszeptibilität

magnetisches Dipolmoment 882, 883

magnetisches Feld 637, 643, 647, 648, 652, 653

- lokales 643, 648, 658
- von Dipolen 647, 648 magnetisches Moment
- des Kerns 636, 637
- induziertes 884, 885
- permanentes 883, 884
- Präzession 638

Magnetisierung 661, 662, 882-884 Magnetisierungsvektor 661, 662 Magnetismus 840, 884, 885

- kritische Temperatur 885
- Spin 884
- Magneton - Bohr'sches 640, 883, 884
- Kern- 637

802-804

Magnetresonanztomografie (MRT) 636, 673, 674, 684

- Makromoleküle 761, 802 Molmasse von Polymeren
- Osmometrie 208, 209
- Röntgenkristallografie 858, 859
- Struktur 782-785, 804, 805
- Manometer 5, 35
- Bayard-Alpert-Ionisations- 5
- Kapazitäts- 5

Marcus, R.A. 1021, 1050-1053, 1064 Marcus-Kreuzbeziehung 1064

- Marcus-Theorie 1050-1053
- Freie Aktivierungsenthalpie 1050, 1052, 1053
- Kreuzbeziehung 1064





 $-\Box$ 

### **1182** *Stichwortverzeichnis*

Margules, M. 236 Margules-Gleichungen 236 Mars, X. 1094 Mars-Van-Krevelen-Mechanismus 1094

MAS 659

Masse 1122, 1123

- atomare 6
- effektive 355, 569, 570
- molare 6
- molekulare 6
- reduzierte 400, 401, 570

Masseneinheit, atomare

- atomare 6, 556

massengewichtete mittlere Molmasse 803

Materiefluss 904, 905, 908, 909

- Blockdiagonalform 519, 520
- Darstellung (Gruppentheorie)
- Diagonalisierung 483, 484
- Eigenschaften 482
- Einheits- 482
- Hamilton- 481, 483, 486, 487
- inverse 482
- Spur 482
- Überlappungs- 481

Matrixdarstellung (Gruppentheorie) 517-520

Matrixdiagonalisierung 483, 484

Matrixelement 482

Matrixformulierung 446, 481, 483

Mauguin, C.-V. 508, 509

maximale Arbeit 54, 126, 127 maximale Nichtvolumenarbeit

129, 130, 924

maximale Volumenarbeit 54

Maximalgeschwindigkeit 984-987

Maximum 27

Maxwell, J.C. 16, 17, 30, 134, 135,

770, 1038, 1039

Maxwell-Beziehungen 134, 135

Maxwell-Boltzmann-Verteilung 16, 17, 1038, 1039

Maxwell-Gleichungen 770

Maxwell-Konstruktion 30

Maxwell'sche

Geschwindigkeitsverteilung

16, 17, 1038, 1039

Mayer, M. 868

MBE 881

McConnell, H.M. 678, 679

McConnell-Gleichung 678, 679

Mechanik, klassische 305, 306, 335, 342, 343, 355 mechanische Arbeit 50

mechanische Belastung 872, 873 mechanische Spannung 872, 873

mechanisches Gleichgewicht 4, 52

mehratomige Moleküle - Elektronenspektren 601 mehratomige Moleküle,

MO-Beschreibung

 MO-Beschreibung 479 mehratomige Moleküle,

VB-Beschreibung

VB-Beschreibung 451

Mehrelektronenatome 399, 413

- Aufbauprinzip 417
- Auswahlregeln 436, 437
- Hamilton-Operator 413, 414
- Orbitalnäherung 413, 414
- Spektren 428
- Wellenfunktionen 413, 414

Mehrphotonenionisation (MPI)

- resonante (REMPI) 1041, 1042

Meißner, W. 885

Meißner-Effekt 885

Meißner-Ochsenfeld-Effekt 885 Membran

- biologische 822, 823

semipermeable (halbdurchlässige)

Meniskus 795, 796

Menten, M. 984-987 Mesomorphe 822

Mesophase 227

Metabolismus 273

Metall/Metallion-Elektrode 280

Metall/Salz-Elektrode 280

Metalle 860-866

- elektrische Leitfähigkeit 875, 876

- elektrochemische Spannungsreihe 290, 291
- Farbe 601, 602
- Glanz 888, 889
- optische Eigenschaften 888, 889
- Übergangs- 421, 602, 603, 1092,

metallische Bindung 861 metallische Festkörper 860–866 metallischer Glanz 888, 889 metallischer Leiter 875, 876

Metall-zu-Ligand-Charge-Transfer-

Übergang (MLCT) 603 metastabile Phase 159

metastabiler angeregter Zustand

Meter (Einheit) 5, 1123

Methan

- Dipolmoment 765
- Symmetrie 508
- Symmetriezahl 711, 712 - VB-Beschreibung 453
- Methode
- Ab-initio- 488, 489
- Blitzlichtphotolyse 947
- der Anfangsgeschwindigkeiten 951-953
- der unbestimmten
  - Multiplikatoren (Lagrange) 699,
- Diaphragma- 930
- direkte 856
- Hartree-Fock- (HF-SCF) 423,
- 424, 488
- Hückel- 446, 480 - Isolier- 950, 951
- Kapillar- 930
- Knudsen- 912, 913
- Monte-Carlo- 790, 791
- Partialbruchzerlegung 958 - Patch-Clamp- 921, 922
- Quenching- 947
- Relaxations- 962-964
- selbstkonsistentes Feld (HF-SCF) 423, 424, 488
- semiempirische 488, 489
- Stopped-Flow- 946, 947, 986
- Strömungs- 946
- Temperatursprung- 963, 964

Michaelis, L. 984-987

Michaelis-Konstante 985

Michaelis-Menten-Gleichung 985 Michaelis-Menten-Mechanismus

984-987

Michelson, A.A. 550

Michelson-Interferometer 550

Mie, G. 781

Mie-Potenzial 781

mikrokanonisches Ensemble 721 mikroporöse Materialien 1095

Mikroskopie

- Elektronen- 1071, 1072
- Raster-Auger-

Elektronenspektroskopie (SAM)

- Rasterelektronen-(SEM) 1072 Rasterkraft- (AFM) 781, 782,

881, 1073



 $-\Pi$ Ħ

- Rastersonden-(SPM) 1072

- Rastertunnel- (STM) 1072, 1073
- Transmissionselektronen- (TEM) 1072

Mikrowellendetektor 551 Mikrowellenspektroskopie 371, 561–564

Auswahlregeln 561, 562
 Mikrowellenstrahlung 308
 Mikrozustände 104
 Miller, W.H. 843–845

Miller'sche Indizes 843–845 Millimeter Quecksilbersäule

(Einheit) 4 Minimum 27

der Freien Enthalpie 264Minute (Einheit) 1122

Mischbarkeit, begrenzte 199 Mischphasen 190–192

Mischung

- azeotrope 216-218
- binäre 184, 198, 211, 212, 255
- Dampfdruck 211, 212
- eutektische 224, 225
- flüchtige Flüssigkeiten 216
- flüssige 193, 194, 198, 199
- Gas- 10, 190-192
- ideal verdünnte 195, 196
- ideale 193, 194, 198, 199, 208, 211, 212
- idealer Gase 190–192
- partielles molares Volumen 185, 186
- Phasendiagramm 211, 224
- reguläre 199–201
- Thermodynamik 190
- Mischungsenthalpie
- ideale Lösung 198
- ideales Gas 192

Mischungsenthalpie, Freie

- ideale Lösung 198, 199
- ideales Gas 190-192
- reguläre Lösung 200, 201
- teilweise mischbarer Flüssigkeiten 220

Mischungsentropie 192, 198, 199, 202

- ideale Lösung 198, 199
- ideales Gas 192

Mischungsprozesse, spontane 190–192

Mischungspunkt, kritischer 231

- Mischungstemperatur
- obere kritische 220
- untere kritische 221 mittlere Energie
- Beitrag des Spins 719
- der Rotation 717
- der Schwingung 358–360, 717, 718
- der Translation 716, 717
- eines Systems 723
- elektronischer Beitrag 718, 719
- harmonischer Oszillator358–360, 718
- Spins im Magnetfeld 718, 719
- unabhängiger Moleküle 725
- wechselwirkender Moleküle 726
- Zweiniveausystem 716–718
  mittlere freie Weglänge 22, 904,

909 mittlere Geschwindigkeit 20, 904,

905, 909, 1015 mittlere Kettenlänge 981

mittlere Molmasse

- massengewichtete 803
- zahlengewichtete 802, 803

mittlere Relativgeschwindigkeit 20 mittlerer Aktivitätskoeffizient 237–239

mittlerer Radius (Wasserstoffatom) 407, 408

mittleres Dipolmoment 767, 768 Mizelle 762, 819–822

- Bildung 820-822
- inverse 822
- kritische Konzentration (CMC) 820–822
- Schicht- 822, 823

Mizellenkonzentration, kritische (CMC) 820–822

MLCT 603, 992

mmHg (Einheit) 4

MO-Beschreibung

- Benzol 486, 487
- Butadien 483, 484
- Ethen 480
- mehratomige Moleküle 446, 479
- Peptidgruppe 502
- Sauerstoff 467
- Stickstoff 466, 467
- zweiatomige Moleküle 462–464 Modell
- Bohr'sches Atom- 440, 441
- der harten Kugeln (Flüssigkeiten)791

- frei bewegliche Kette 805
- Gouy-Chapman- 1097
- Grahame- 1097
- Helmholtz-Doppelschicht 1097
- ideales Elastomer 811, 812
- Induced-Fit- 984
- Reißverschluss- 744
- RRK- 1021
- RRKM- 1021
- Schlüssel-Schloss- 785, 786
- Vektor- 371, 372, 415, 416, 428, 661, 662
- VSEPR- 625
- Zimm-Bragg- 744

Modul 872–874, 890–892

Modulation, Stark- 552

Mol (Einheit) 6, 1123

Molalität 189, 190, 235, 239

- Standardwert 190
- Zusammenhang mit der Aktivität 235
- Zusammenhang mit der Ionenstärke 239

molare Gaskonstante 8, 18

molare Grenzleitfähigkeit 916, 917, 919, 920

molare Größen, partielle 184, 185 molare Innere Energie 48 molare Konzentration 189, 190,

molare Leitfähigkeit 915, 916, 919, 920, 938, 939

Konzentrationsabhängigkeit 938,

molare Löslichkeit 196

molare magnetische Suszeptibilität 883, 884

molare Masse 6

948

- Bestimmung 206, 208, 209
- massengewichtete mittlere 803
- zahlengewichtete mittlere 802, 803
- *Z*-gewichtete mittlere 803

molare Polarisation 768–770

molare Standardenthalpie 67, 867 molare Standardentropie 119

molare Wärmekapazität bei

konstantem Druck 62, 63

molare Wärmekapazität bei

konstantem Volumen 56

molare Zustandssumme 738, 739

molarer Absorptionskoeffizient 544, 545, 601





# Τ

 $-\Box$ 

### **1184** *Stichwortverzeichnis*

molares Ausschlussvolumen 826, 827 molares Volumen 9, 10, 25 – kritisches 28 – partielles 185, 186 Molarität 189, 190 Molekülachse 507, 558 Moleküldynamik 791 Molekülgeschwindigkeit, mittlere 19, 20

Molekülorbital 445, 446, 456, 479

- allgemeine Form 479

- Energien 476, 477

Energieniveaudiagramm 462, 463, 466, 478

höchstes besetztes (HOMO) 478, 480, 481, 766, 865, 866, 885, 1051

Linearkombination ausAtomorbitalen (LCAO-MO) 456, 457, 462

- mehratomige Moleküle 413, 414

niedrigstes unbesetztes (LUMO)478, 480, 481, 766, 865, 866, 1051

- Normierung 457

- Parität 461

zweiatomige Moleküle 462–466Molekülorbital (MO)-Theorie 445, 446, 456, 462, 463

- Anwendungen 485

- Energien 476, 477

 heteroatomare zweiatomige Moleküle 471

 homoatomare zweiatomige Moleküle 462

mehratomige Moleküle 479
 Molekülspektren 312, 313
 Molekülsymmetrie 505–512

- Anwendungen 526

- Auswahlregeln 510, 513, 514

Konsequenzen 513, 514
 Molekülwolken 553, 554
 Molekularbewegung, Brown'sche

100, 101
Molekulardynamik 791
molekulare Festkörper 870, 871
molekulare Masse 6
molekulare Spektroskopie 312, 313, 539
molekulare Strömung 1038
molekulare Wechselwirkungen 24,

molekulare Zustandssumme 695, 700, 703–706

761, 772

molekularer Beitrag zur Abschirmungskonstante 645, 647, 648

molekularer Festkörper 870, 871 Molekularität 970, 971

Molekularstrahlen 1038-1041

- gekreuzte 1041

Molekularstrahlepitaxie (MBE) 881

Molenbruch 10, 189, 190 Molmasse 6

- Bestimmung 206, 208, 209

- massengewichtete mittlere 803

zahlengewichtete mittlere 802, 803

Z-gewichtete mittlere 803
 Momentangeschwindigkeit 948
 monochromatische Strahlung 549
 Monochromator 549, 550, 552
 monodisperses Polymer 802–804
 monokline Elementarzelle 842
 monoklines Kristallsystem 842
 Monolage 797, 798

- selbstorganisierte (SAM) 1071

Monomer 802

Monopol 765

Monte-Carlo-Methode 790, 791 Morse, P.M. 571–573, 750, 756 Morse-Oszillator 571–573, 750, 756

Morse-Potenzial 572

Mossotti, O.-F. 769, 770

MO-Theorie 445, 446, 456, 462, 463
- Anwendungen 485

- Energie 476, 477

- Ellergie 4/0, 4//

heteroatomare zweiatomige
 Moleküle 471

 homoatomare zweiatomige Moleküle 462

- mehratomige Moleküle 479

MPI 1041

MRI 636, 673, 674, 684

MRT 636, 673, 674, 684

Mulliken, R. 472

Mulliken-Elektronegativität 472

Multiplett 648-651

Multiplizität 434

Multipol, elektrischer 459, 776

# M

Nachbargruppenbeitrag zur Abschirmungskonstante 645, 647, 648 Näherung

- Born-Oppenheimer- 445, 447

– fast freier Elektronen 863

- fester Bindung 863, 864

- Hückel- 446, 480, 481

- Orbital- 413, 414

quasistationärer Zustände 973, 974, 976, 983, 1049

- Stirling- 698, 738, 934

- von Aktivitäten 268, 269

nahe Infrarotstrahlung (NIR) 308

Nahordnung 789, 790

Nanodrähte 321, 322, 351, 881

Nanokristall 351

Nanotechnologie 351

Nanowissenschaft 321, 351, 636, 681, 881

Naphthalin

- Jablonski-Diagramm 607

- Symmetrie 507, 508

Natrium, D-Linien 431, 432

Natriumchlorid, Elementarzelle 852

natürliche Linienbreite 546, 548 Nd:YAG-Laser 610, 890

Nebenquantenzahl 369, 370, 404

Néel, L. 885

Néel-Temperatur 885

negative Aktivierungsenergie 976, 977

nematische Phase 227

Neodym-Laser 610, 890

Neonatom 420, 424

Nernst, W. 121, 283–285, 549, 920, 921

Nernst-Einstein-Beziehung 920, 921

Nernst-Gleichung 283–285 Nernst'sches Wärmetheorem 121

Nernst-Stift 549

Nettoabsorption 541 Netzebenen 843–845

Netzwerkfestkörper 870, 871

Neutronen, thermische 857

Neutronenbeugung 856, 857

Neutronenspin 415, 416, 614 Neutronenstreuung, inelastische

014

Newton (Einheit) 5, 1123 Newton, I. 5, 15, 147, 353, 906,

newton, 1. 5, 15, 147, 353

Newton'sche Strömung 906 Newton'sches Abkühlungsgesetz

Newton'sches Gesetz, Zweites 15, 353





 $-\mathbf{H}$ 

H

nicht mischbare Flüssigkeiten 218 nicht totales Differenzial 76, 77 nicht unterscheidbare Moleküle 724, 725 nichtbindendes Orbital 487, 502. 530, 779, 863 nichtlineare optische Effekte 890, nichtprimitive Elementarzelle 841, 843 Nichtvolumenarbeit 51 maximale 129, 130, 924 niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (LUMO) 478, 480, 481, 766, 865, 866, 1051 NIR-Strahlung 308 Niveaus (eines Terms) 429–431 NMR 635, 636 - Absorptionsintensität 639, 640 - Besetzungsunterschied 639 - Fourier-Transformations-(FT-NMR) 660, 661 - in Festkörpern 658, 659 - Pulstechniken 635, 660-663

- Resonanzbedingung 638 - Resonanzfrequenz 637, 638 NMR-Spektrometer 638-640 NMR-Spektroskopie 635, 636 NMR-Spektrum 635, 643-645 - Feinstruktur 648-651 NOE 635, 670-673 NOE-Verstärkungsfaktor 672, 673 Normalbedingungen (STP) 10 Normaldehnung 873 Normalerstarrungspunkt 161 Normalgefrierpunkt 161 Normalkoordinate 589 Normalschmelzpunkt 161 Normalschwingungen 580–582 - Entartung 587-589 - Infrarotaktivität 582, 584, 590 – Raman-Aktivität 584, 590, 591 - Symmetrie 587-589

von Kohlendioxid 581

Normalsiedepunkt 161

Normalspannung 873

357, 363

曲

- von Wasser 581, 587, 588

Normbedingungen (STP) 10

- eines Molekülorbitals 457

n-Typ Halbleiter 878, 879

Nukleationsschritt 744

Normierung 321, 322, 357, 363

Normierungskonstante 321, 355,

Nukleotide 785 Nullpunktsenergie - Definition 343 - des harmonischen Oszillators 354 des Teilchens im eindimensionalen Kasten 343 - des Teilchens im zweidimensionalen Kasten 346 Nullpunktsentropie 121, 122, 734, 0 obere kritische Mischungstemperatur 220 Oberfläche 1067, 1068 - Bedeckungsgrad 1070, 1071, 1078, 1090-1092 - Diffusion 1072, 1073 - Fehlstellen 117, 1067-1069 - gekrümmte 794, 795 - gleicher Elektronendichte 490 - Solvens-zugängliche 490 - Struktur 1068 - Wachstum 1068 oberflächenaktive Substanzen 798-800 Oberflächenarbeit 51, 793, 794 Oberflächendruck 797, 798 Oberflächenfilm 761 Oberflächenplasmonenresonanz (SPR) 1076, 1077 Oberflächenschichten 761, 797-800 Thermodynamik von 798–800 Oberflächenschichtwaage 797 Oberflächenspannung 761, 793-797 - Einfluss von Tensiden 798-800 - Freie Energie 793 Temperaturabhängigkeit 796 Oberflächenstruktur 1068 Oberflächenüberschuss 799, 800 Oberflächenwachstum 1068 Oberschwingungen 572, 573, 583 Obertöne 572, 573, 583 Oberwellenerzeugung (SHG) 840, 890, 1076

Observable 305, 324, 335

- Berechnung 324, 325

- komplementäre 334

- Messung 328

Ochsenfeld, R. 885

offenes System 44

Offset-Frequenz 688 Ohm (Einheit) 915 Ohm, G. 915, 1106, 1107 Ohm'scher Innenwiderstand 1106, 1107 Oktaeder 501, 512, 602 oktaedrische Gruppen 512, 513 Oktett, erweitertes 452 Oktupol 765 Operator - Definition 305, 324 - des Dipolmoments 598 - des magnetischen Moments 637 - Energie- 324, 325 - Erwartungswert 331, 332 - Hamilton- 324, 325 - hermitescher 327-329 - Impuls- 327, 329, 330, 332, 334, 338, 339, 343 - Konstruktion 325, 326 - Laplace- 242, 367, 368 - Legendre- 368 - Orts- 325, 327, 336 - Projektions- 531 Oppenheimer, J.R. 445, 447 optisch aktive Moleküle 514 optische Eigenschaften - von Festkörpern 840, 887 - von Metallen 888, 889 optisches Pumpen 609, 610, 890 Orbital - antibindendes 460, 461, 464, 476 - Atom- 404 - Besetzung mit Elektronen 417-422 - bindendes 458, 459, 461, 464, 476 - d- 411, 602 - e- 602 - Entartung 524, 525, 594 - Gaußfunktion (GTO) 489 - Grenz- 478, 480, 481, 766, 865, 866, 885, 1051 - Hybrid- 452-455 - Konfiguration 414 - Molekül- 445 - nichtbindendes 487, 502, 530, 779, 863 - Notation 406 - p- 410, 411, 465, 466  $-\pi$ - 462, 464, 466 - s- 407, 408, 465, 466 selbstkonsistentes 424, 425  $-\sigma$ - 457, 462, 463, 466  $-\sigma^*$ - 460, 462, 463

### **1186** *Stichwortverzeichnis*

- Symmetriebezeichnungen 522-524

- t- 602

Orbitalbesetzung 416-422, 462 Orbitalentartung 524, 525, 594 Orbitalnäherung 413, 414 Orbitalüberlappung 863–866 Ordnung

- Bindungs- 467, 468
- Fern- 789
- Gesamtreaktions- 950
- Gruppentheorie 520, 521
- Nah- 789, 790
- Pseudo-Reaktions- 951
- Reaktions- 950-953, 971

Ordnungszahl 399, 400, 402, 403, 410, 419, 420, 422, 423, 431, 433 Orientierungspolarisation 768 orthogonal 328, 329, 521, 522 orthogonale Polynome 355 orthogonale Vektoren 521, 522 Orthogonalität 328, 329, 521, 522 Orthogonalitätstheorem 521 orthonormal 328, 522 orthonormale Vektoren 522 Orthonormalität 328, 522 orthorhombisches Kristallsystem

ortho-Wasserstoff 568, 710, 711 Ortsoperator 325, 327, 336 Ortsunschärfe 332-334 Osmometrie 206, 208, 209 Osmose 206, 207, 209

- Van-'t-Hoff-Gleichung 207, 208 osmotischer Druck 206-208 osmotischer Koeffizient 260 osmotischer Virialkoeffizient 208 Oszillator
- anharmonischer (Morse-) 571, 572, 750, 756
- harmonischer 306, 353-355 Otto, N. 148 Otto-Kreisprozess 148 Overbeek, J.T.G. 817 Overhauser, A.W. 635, 670-673 Overhauser-Abschwächung 672 Overhauser-Verstärkung 672, 673 Oxidation 280, 281 Oxidationsmittel 280 oxidative Phosphorylierung 273 Ozon, Dipolmoment 763 O-Zweig 577, 578

parabolische potenzielle Energie 353, 354, 447, 569 parabolisches Potenzial 353, 354, 447, 569 parallele Banden 582 parallele Spins 428 paramagnetisch 883-885 paramagnetischer Beitrag zur Abschirmungskonstante 645,

- Paramagnetismus 883-885
- temperaturunabhängiger (TIP) 885
- Van-Vleck-885

Parameter

- Aktivierungs- 1031–1033
- Arrhenius- 965-969, 1014, 1019, 1023, 1032
- Lennard-Jones-(12,6)- 781, 873
- Stabilitäts- 744
- Stoß- 1039, 1040
- Tensid- 821

 Van-der-Waals- 29, 745, 825, 827 para-Wasserstoff 568, 710, 711 Parität 461, 593, 595, 596 Partialbruchzerlegung 958 Partialdruck 10, 170, 211, 212 Partialladung 471 partiell starre Knäuel 809, 810 partielle Ableitung 56, 57 partielle Differenzialgleichung 344, 345 partielle Integration 327, 328 partielle molare Freie Enthalpie 187

partielle molare Größen 184, 185 partieller Dampfdruck 10, 170, 211, 212

partielles Differenzial 56, 57 partielles molares Volumen 185, 186

Pascal (Einheit) 4, 6, 1123 Pascal, B. 4, 6, 651, 678, 1123 Pascal'sches Dreieck 651, 678 Paschen, F. 400

Paschen-Serie 400 Patch-Clamp-Technik 921, 922 Patterson, A.L. 855, 856

Patterson-Karte 855, 856 Patterson-Synthese 855, 856

Pauli, W. 414, 416, 417, 462, 566,

653, 654, 680, 710

Pauli-Ausschlussprinzip 399, 414-417, 462

Pauling, L. 471, 472, 782, 783 Pauling-Elektronegativität 471, 472 Pauli-Prinzip 416, 417, 566, 653,

654, 680, 710

p-Band 865

p-Block 421

PDI 803, 804

Peptidbindung 502, 782-784, 804 Peptidgruppe, MO-Beschreibung

Periode 421

502

Periodensystem der Elemente 421 periodischer Kristall 841, 842 Periodizität der atomaren Struktur 421

peritektische Linie 226 Permeabilität, Vakuum- 645, 648, 884

Permittivität

- relative 46, 166, 769
- Vakuum- 46, 132, 400, 765, 766 Perpetuum mobile 49 Persistenzlänge 809, 810 PES 468, 469, 628, 1073

Petit, A.T. 311, 865, 866

Pfund pro Quadratzoll (psi, Einheit)

Pfund, A.H. 442 Pfund-Serie 442

phänomenologische Gleichungen 903-906

Pharmakokinetik 1001

Phase 25, 158

- Anzahl 158, 162
- cholesterische 227
- disperse 762, 815-817
- metastabile 159
- nematische 227
- smektische 227
- Stabilität 158, 160, 168 Phasendiagramm 158, 160-162, 211
- binäre Mischung 255
- Calcium/Silicium 255
- feste Zweikomponentensysteme
- Flüssig/Fest- 224-226
- Flüssig/Flüssig- 211, 218, 219
- flüssige

Zweikomponentensysteme 211

- Flüssigkristall 227, 228
- Hebelgesetz 215, 216

 $\mathbf{H}$ 曲  $-\Pi$ 

H

- Helium 165, 166 - Hexan/Heptan 251 - Kohlendioxid 164

- Silber/Zinn 254

- Stahl 232

teilweise mischbarer Flüssigkeiten 250

- ternäre Systeme 229-232

- Wasser 164, 165

- Zweikomponentensysteme 211,

phasenempfindlicher Detektor 641, 642

Phasengrenze 160, 161, 171 Phasengrenzlinie 160, 161, 171

- fest/flüssig 161, 172, 173

- fest/gasförmig 161, 175

- flüssig/gasförmig 161, 173, 174

- Steigung 171

Phasenproblem 651, 652 Phasenregel 157, 162, 163 Phasenstabilität 158, 160, 168 Phasenübergang 66, 67, 159

- charakteristische Eigenschaften 161

- Entropieänderung 114, 115

- Gefrieren 114, 115

- Kondensation 761, 791, 801

- Resublimation 164

- Schmelzen 161, 169, 170, 226

- Sieden 114, 115, 161

- Sublimation 66, 67

- thermodynamische Betrachtung 168

- Verdampfen 65-67 Phasenübergangsenthalpie 66, 67 Phasenübergangsentropie 119 Phasenübergangstemperatur 66, 159

- Standard- 114 Phenylalanin 831 Phosphatidylcholin 822 Phosphoreszenz 605-607, 989, 990 Quantenausbeute 990 Phosphorpentachlorid, Symmetrie

512 Phosphorylierung, oxidative 273 Photobleaching 631 Photochemie 944, 988-991 photochemische Ionisierung 988 photochemische Prozesse 944,

988-991 Photodiode 552

photoelektrischer Effekt 314, 315

Photoelektron 468

Photoelektronenspektrometer 469 Photoelektronenspektroskopie (PES) 468, 469, 628, 1073

Photoelektronenspektroskopie

(UPS)

- UV- 469, 1073

Photoelektronenspektroskopie (XPS)

- Röntgen- 469, 1073, 1074

Photoelektronenspektrum 468, 469, 628, 1074

Photoelement 552

Photoemissionsspektrometer 469, 1073

Photoemissionsspektroskopie (PES)

468, 469, 628, 1073

Photometrie 945

Photonen 313, 314

Photonenspin 415

photophysikalische Prozesse

988-990

Photosynthese 994, 995

Photosystem 994, 995

Photovervielfacher (PMT) 552 pH-Wert 272, 292, 293, 818

physikalische Atmosphäre (Einheit)

4, 6, 1122

physikalische Größe 5, 1122 physikalischer Zustand 4, 7, 65

Physisorption 1069, 1070, 1085,

1086

 $\pi$ -Bindung 449–451 Pictet, R. 114, 115

Pictet-Trouton-Regel 114, 115

 $\pi$ -Elektronen

- Gesamtenergie 485, 486

- Wechselwirkung 786

 $\pi^* \leftarrow n$ -Übergang 603

 $\pi$ -Orbital 462, 464, 466  $\pi^* \leftarrow \pi$ -Übergang 603, 604

Placzek, G. 632

Placzek-Teller-Beziehung 632 planare Doppelschicht 822, 823

Planck, M. 310, 311, 313, 315, 553

Planck-Konstante 310, 315 Planck'sches Wirkungsquantum 310, 315

Planck-Verteilung 310, 553

Plasma 23, 1076

Plasmonen 1076

plastische Deformation 872, 873

PMT 552

p-n-Kontakt 878, 879 Poise (Einheit) 914

Poiseuille, J.L.M. 914 Poisson, S.D. 242, 873 Poisson-Gleichung 242 Poissonzahl 873 polare Bindung 471

polares Molekül 513, 514, 762, 763

Polarisation 767-770

- Konzentrations- 1103

- molare 768-770

- Orientierungs- 768

- Verschiebungs- 768

Polarisationsmechanismus 653, 654, 680

Polarisierbarkeit 564, 761, 765, 766, 768

- anisotrope 564, 766

- elektronische 768

- Hyper- 765, 890

- quantenmechanischer Ausdruck 766

Polarisierbarkeitsvolumen 763, 765, 766

polarisierte Linie 584

Polarität 513, 514

Polarkoordinaten 367-369, 375,

408, 427, 646, 767 Polarwinkel 368, 369

Polyaddition 980-982

polychromatische Strahlung 549

Polychromator 549

polydisperses Polymer 802-804 Polydispersitätsindex (PDI) 803,

Polyelektrolyt 785

Polyethylen 804, 805, 812

Polykondensation 980-982

Polymer

- Copolymer 802, 804

- Definition 782, 802

- Glasübergangstemperatur 812, 813

- Kettenlänge 981, 983

- mechanische Eigenschaften 810-812

- monodisperses 802-804

- polydisperses 802-804

- quervernetztes 802, 804, 811

- Schmelztemperatur 812, 813 - spezifisches Volumen 813

- thermische Eigenschaften 812,

813

Polymerisation

- Ketten- 980, 982, 983





# **1188** *Stichwortverzeichnis*

- Kinetik 980

- schrittweise 980–982, 988 Polymerisationsgrad 981-983 Polymorph 158, 164, 165, 848 Polymorphismus von Eis 164, 165 Polynom

- Hermite- 355, 356

- Laguerre- (assoziiertes) 402

- orthogonales 355 Polynukleotide 782, 785 Polypeptide 782-784, 804 Polytypen 861–863 Population 1, 700–702, 704 – Temperaturabhängigkeit 700,

p-Orbital 410, 411, 465, 466

Porphin 538 Postulate der Quantenmechanik

335 Potenzial

- (exp, 6)- 781

- chemisches 157, 160, 169, 187, 188, 193, 198, 202, 876

- Coulomb- 132, 824, 825, 918

- Coulomb- (abgeschirmtes) 241

- Diffusions- 282

- elektrisches 132, 824, 825, 918

- elektrochemisches 1099

- Elektroden- 288-290, 1098

- elektrokinetisches 817

- Hartkugel- 726, 745-747, 780, 791, 826

- Lennard-Jones-(12,6)- 781, 782, 873, 874

- Mie- 781

- Morse- 572

- parabolisches 353, 354

- Standardzell- 284-286, 288-290

- Zell- 282-286

 $-\zeta$ - 817

Potenzialdifferenz 55

- Galvani- 1099, 1100, 1106, 1107 Potenzialfläche, elektrostatische

Potenzialhyperflächen 1042-1047

- attraktive 1046

- repulsive 1046, 1047

Potenzialkurve 447, 459, 569

Wasserstoffmolekül-Ion 459 Potenzialtopf 340, 346, 350 potenzielle Energie

- (exp, 6)- 781

- Coulomb'sche 241, 772

- Definition und Grundlagen 24,

- des harmonischen Oszillators 353, 354

- effektive 401

- harmonische 353, 354, 569

- Hartkugelpotenzial 726, 745–747, 780, 791, 826

- Hyperflächen 1042-1047

- intermolekulare 24

- intermolekulare (Born-Oppenheimer-Näherung) 353, 354, 447, 569

- intermolekulare (Van-der-Waals-Gleichung) 29-31, 745-747, 825, 827

- Lennard-Jones-(12,6)- 781, 782

- Mie- 781

- Morse- 572

- parabolische 353, 354, 447, 569

- Van-der-Waals-Gleichung 29-31,

- zweiatomiges Molekül 569

ppm (Einheit) 644

745-747, 825, 827

Prädissoziation 608

präexponentieller Faktor 965-967, 1014, 1019

Präfixe (SI-System) 5, 1123

Präzession 638, 661, 662

Primärprozess, Quantenausbeute 989, 990

Primärstruktur 782, 804 primitive Elementarzelle 841–843 Prinzip

- Aufbau- 417-422, 462

- Avogadro- 7

- der gleichen

a-priori-Wahrscheinlichkeiten 696

- der übereinstimmenden Zustände 32

- des kleinsten Zwangs 276

- Franck-Condon- 596-600, 605,

- Korrespondenz- 342, 343

- Le Chatelier- 276

- Pauli- 416, 417, 566, 653, 654, 680, 710

- Pauli-Ausschluss- 399, 414-417,

– Quasistationaritäts- 973, 974, 976, 983

Schlüssel-Schloss- 785, 786, 984

- Unschärferelation 305, 332-335

- Variations- 450, 451, 472, 473,

Probefunktion 450, 451, 472 Produkt, direktes 527-530

Projektionsoperator 531

Promotion (Elektronen) 445, 452, 877, 878

Propadien. Symmetrie 512

Propagationsschritt 744

Proteinfaltung 782-784, 804

Protonen, Tunneln von 1036, 1037

Protonenbeweglichkeit 919

Protonenentkopplung 670

Protonenspin 415, 567, 568, 636, 637

**Prozess** 

adiabatischer 85–87

endenthalpischer 65

- endothermer 46, 65

- exenthalpischer 65

- exothermer 46,65

- freiwilliger 99, 100, 102, 104, 125, 126, 284

- isenthalper 81-83 - Kreis- 106, 148, 869, 870

- photochemischer 944, 988-991

- photophysikalischer 988-990

- Primär- 989, 990

- reversibler 52

- spontaner 99, 100, 102, 104, 125, 126, 284

Pseudo-Reaktionsordnung 951 p-Typ Halbleiter 878, 879 Puls (NMR) 661-663, 669

- 90°- 662, 663, 669

- 180°- 669

Pulstechniken (NMR) 635, 660-663, 669

Pulverbeugungsdiagramm 848, 854

 systematische Auslöschungen 854

Pulverdiffraktometer 848 Pumpen, optisches 609, 610, 890 Punktdefekt (Fehlstelle) 117 Punktdipol, elektrischer 762, 763,

765, 772–774, 778 Punktgruppe 508-513

- Bestimmung 510

- ikosaedrische 512, 513

- kubische 512, 513

- tetraedrische 512, 513





Punktladungen

- typische Anordnungen 765
- Wechselwirkung zwischen 777,

pyroelektrisches Element 552 P-Zweig 575, 600, 601

Q-Band 684 QCM 1076 QSAR 786, 787 quadratisch gemittelte Auslenkung 931 quadratisch gemittelte

Geschwindigkeit 16, 19 quadratisch gemittelter Abstand 807, 809, 810

quadratische Gleichung 474, 475 quadratischer Beitrag (zur Gesamtenergie) 48, 49 Quadratwurzelgesetz,

Kohlrausch'sches 916

Quadrupol 765

Quadrupolmoment, elektrisches 658, 659

Quantelung

- der Energie 1, 305, 307, 323, 341,
- des Drehimpulses 365, 366, 371
- räumliche 371, 372
- Randbedingungen 323, 354
- Richtungs- 371, 372
- Rotations- 365, 366, 556, 558-560

# Quantenausbeute

- der Fluoreszenz 630, 989-993
- der Phosphoreszenz 990
- des Primärprozesses 989, 990 Quantenchemie mit Computern 488-492

Quantencomputer 335, 336 Quantenmechanik 1, 305-307, 342, 343

- Postulate der 335

quantenmechanische Streutheorie 1047

Quantenoszillation 1040 Ouantenpunkte 351 Quantentheorie 1, 305-307

- Bahndrehimpuls- 369, 370, 404
- Definition 341

Quantenzahl

- Drehimpuls- 369, 370, 404

- Gesamtbahndrehimpuls- 432,
- Gesamtdrehimpuls- 432, 434, 706
- Gesamtspin- 429, 884
- Haupt- 341, 404
- Kernspin- 636
- magnetische 363, 369, 370, 404
- magnetische Spin- 415
- Neben- 369, 370, 404
- Rotations- 556, 558-560
- Schwingungs- 354, 582
- Spin- 415

Quantisierung (Quantelung) 1, 305, 307, 323, 341, 354, 365, 366, 371, 372, 556, 558-560

quantitative

Struktur-Wirkungs-Beziehungen (QSAR) 786, 787

Quartärstruktur 804, 805 Quarz/Wolfram-Halogenlampe 549

Quasikristall 841

Quasistationaritätsprinzip 973, 974, 976, 983, 1049 Quecksilberlichtbogen 549

Quenching 605, 606, 991-994

- Geschwindigkeitskonstante 992-994
- Mechanismen 993–995 Quenchingmethoden 947 Querdehnungszahl 873 Ouerkontraktionszahl 873 quervernetztes Polymer 802, 804, 811

Q-Zweig 575, 577, 578, 600

radiale Diffusionsgleichung 1023, 1024

radiale Verteilungsfunktion 408-410, 418, 419

- von Flüssigkeiten 789-791 radiale Wellenfunktion 401
- wasserstoffähnlicher Atome 401-403

radiale Wellengleichung 401 radialer Knoten 370

Radialgeschwindigkeit 354, 364, 365, 555

Radienverhältnisregel 866, 867 Radikal

- g-Faktor 676, 677

Radikal, g-Faktor 676, 677

Radikal-Kettenreaktion 982, 983 radioaktiver Zerfall 972 Radiofrequenzfeld 661-663 Radiowellen 308

Radius

- Atom-
- Bohr'scher 334, 402
- Gyrations- 807-809
- hydrodynamischer 918, 926, 1024
- Ionen- 422, 423, 866, 867
- mittlerer 407, 408
- Scher- 817
- Stokes'scher 918
- Trägheits- 807-809
- Van-der-Waals- 779

Radiusquotientenregel 866, 867 räumliche Quantisierung 371, 372 Ramachandran, G.N. 783, 784 Ramachandran-Auftragung 783,

Raman, C.V. 541, 552, 564-567, 577, 578, 584, 590, 591, 1041 Raman-Aktivität 564, 566, 577, 584, 590, 591

- Auswahlregeln 564, 565, 577
- Normalschwingungen 584, 590,

Raman-Linien 565, 567, 584 Raman-Rotationsspektren 564-566 Raman-Rotationsspektroskopie 564-566

- Auswahlregeln 564, 565, 611, 612

Raman-Schwingungsspektren 577,

Raman-Schwingungsspektroskopie 577, 578, 584

- Auswahlregeln 577, 613, 614 Raman-Spektren 564-566, 577, 578 Raman-Spektrometer 552 Raman-Spektroskopie 541, 552, 564-566, 577, 578

 kohärente Anti-Stokes- (CARS) 1041

Raman-Streuung 541

Ramsperger, H.C. 1021, 1055–1057 Randbedingungen

- harmonischer Oszillator 353
- Wellenfunktionen 322, 323, 340,
- zyklische 363, 368

Random Walk

- eindimensionaler 931-935





### **1190** *Stichwortverzeichnis*

- Wahrscheinlichkeitsverteilung 931, 932
- zweidimensionaler 834

Raoult, F. 193-196, 233, 237, 240 Raoult-Gesetz 193-196, 233, 237,

Raster-Auger-Elektronenmikroskopie – pseudo-zweiter Ordnung 951 (SAM) 1074

Rasterelektronenmikroskopie (SEM) - thermodynamisch kontrollierte 1072

Rasterkraftmikroskopie (AFM) 781, 782, 881, 1073

Rastersondenmikroskopie (SPM) 1072

Rastertunnelmikroskopie (STM) 1072, 1073

Raumelement 17, 18, 319, 362, 368,

- in Kugelkoordinaten 18, 368, 369
- in zylindrischen Koordinaten

Raumerfüllung 862, 863 Raumgitter 840-845 Raumgruppe 508

Raumwinkel 1039

raumzentrierte Elementarzelle 842, 843

Rayleigh, J.W.S. 309, 310, 541, 564, 567

Rayleigh-Jeans-Gesetz 309, 310 Rayleigh-Linie 564, 567 Rayleigh-Strahlung 541, 564 Reaction Product Imaging 1042 Reaktion

- Abstraktions- 988
- Additions- 980-982, 988
- aktivierungskontrollierte 1013,
- bimolekulare 971, 1019, 1023, 1032, 1043
- diffusionskontrollierte 1013, 1022-1025
- Disproportionierungs-
- Elementar- 970, 971
- endergone 265, 266
- endotherme 65, 265
- erster Ordnung 950, 954-956, 959, 961, 962
- exergone 265, 266
- exotherme 65, 1027, 1028
- Folge- 971-973
- geschwindigkeitsbestimmender Schritt 974, 975
- Halb- 280

- kinetisch kontrollierte 977
- Konsekutiv- 971-973
- nullter Ordnung 950, 954, 959
- photochemische 944, 988-991
- pseudo-erster Ordnung 951
- pseudo-nullter Ordnung 951
- Redox- 280
- unimolekulare 970, 971, 978-980, 1021, 1028, 1090
- Zell- 282, 283
- zweiter Ordnung 950, 956-959
- zwischen Ionen 1033-1035 Reaktionen in der Nähe des Gleichgewichts 961-964 Reaktionen zwischen Ionen 1033-1035 Reaktionsdynamik 1013
- Reaktionsenthalpie 67, 68
- elektrochemische Bestimmung 285-287
- Freie 264, 265
- Temperaturabhängigkeit 70 Reaktionsentropie 122
- elektrochemische Bestimmung
- Temperaturabhängigkeit 123 Reaktionsgeschwindigkeit 943-945, 954
- Definition 947-949
- Temperaturabhängigkeit 965-969

Reaktionsisobare, Van-'t-Hoff'sche

Reaktionskoordinate 967, 1027 Reaktionslaufzahl 264, 265, 948 Reaktionsmechanismen 944, 949, 970, 978

Reaktionsordnung 950-953, 971

- Gesamt- 950
- Pseudo- 951
- Reaktionsprofil 1027, 1028 Reaktionsquerschnitt 1019
- differenzieller 1039, 1040
- zustandsaufgelöster 1042
- Reaktionsquotient 266-268
- der Halbreaktion 281
- Reaktionsverlauf 945-947

Reaktionswahrscheinlichkeit,

kumulierte 1047

reaktive Sauerstoffspezies (ROS) 478

reaktive Stöße 1014, 1015

– Mindestenergie 1016

reale Lösungen 234, 237

- Aktivität des gelösten Stoffs 234,
- chemisches Potenzial des gelösten Stoffs 234
- Freie Enthalpie 237

reales Gas 3, 4, 9, 24

Realfaktor 25

- kritischer 32

Realteil einer Zahl 319

Rechnen mit Vektoren 431

Redox-Elektrode 280

Redoxpaar 280

Redoxreaktion 280

Reduktion 280, 281

Reduktion (irreduzible Darstellung) 519

Reduktionsmittel 280

reduzierte Größen 31, 32

reduzierte Masse 400, 401, 570

reduzierte Variablen 31, 32

Referenzzustand 69

Reflex 849-852

Refokussierung 669, 670

Reformieren, katalytisches 1094

- Ableitungs- 27, 28, 56, 57
- Ausschluss- 584, 591
- Corey-Pauling- 782, 783
- Hund'sche 419, 420, 436, 462, 654, 680
- Phasen- 157, 162, 163
- Pictet-Trouton- 114, 115
- Radienverhältnis- 866, 867
- Radiusquotienten- 866, 867
- Schulze-Hardy- 818
- Trouton'sche 114, 115 Regenbogenstreuung 1041

Regenbogenwinkel 1041

Region, invertierte 1054

reguläre Lösungen 199–201

- Aktivität 236, 237
- Freie Enthalpie 200, 201
- Freie Mischungsenthalpie 200, 201, 220

Reibung, viskose 917

Reihe (mathematische) 26, 204

- Maclaurin- 204

- Taylor- 204, 571, 572

Reihe, elektrochemische 290, 291

曲

Reihenentwicklung 26, 204, 571 - Divergenz 204

- Konvergenz 204, 571, 572 Reihenvektor 482

reine Scherung 872

Reißverschlussmodell 744

Rekombination 982

Rekonstruktion 1074, 1075 Rektifikation 213, 216, 217

relative Besetzungszahl 1, 700-702

- Temperaturabhängigkeit 700, 704

relative Luftfeuchtigkeit 34 relative molekulare Masse 6 relative Permittivität 46, 769 Relativgeschwindigkeit, mittlere 20, 21

Relaxation 666-668, 962-964

- longitudinale 667, 668
- Spin-Gitter- 667, 668
- Spin-Spin- 667, 668
- transversale 667, 668
- von Reaktionsmischungen 962-964

Relaxationsmechanismus 667, 668 Relaxationsmethoden 962-964 Relaxationszeit 667

- effektive transversale 668
- longitudinale 667-670
- Spin-Gitter- 667-670
- Spin-Spin- 663, 667-670
- transversale 667–670

REMPI 1041, 1042

Reorganisationsenergie 1052-1054 repulsive Hyperfläche 1046, 1047 resonante Mehrphotonenionisation (REMPI) 1041, 1042

resonante Moden 630 Resonanz

- Elektronenspin-(ESR) 635, 636, 640, 641, 676
- in der VB-Theorie 450, 451
- ionisch-kovalente 450, 451
- magnetische Kernspin- (NMR) 635, 636
- Oberflächenplasmonen- (SPR) 1076, 1077

Resonanzbedingung

- in der ESR 641, 676
- in der NMR 637, 638

Resonanzenergietransfer 994, 995

- Fluoreszenz- (FRET) 995
- Wirkungsgrad 994

Resonanzfrequenz

- ESR 641
- NMR 637, 638

Resonanzhybrid 450

Resonanzintegral 474

Resonanzstabilisierung 451 Resonator 630, 890

Resublimation 164

resultierender Vektor 428, 661,

763, 764, 824, 825

resultierendes Dipolmoment 763, 764

Retinal 387, 985, 988

reversible adiabatische Expansion 85-87, 106-109

- Beziehung zwischen Druck und Volumen 86, 87
- Temperaturänderung 85, 86 reversible Änderung 52 reversible Elektrode 1102 reversible Expansion 52
- adiabatische 85-87, 106-109
- Arbeit 53

reversible isotherme Expansion 53 reversibler Prozess 52

Rheologie 872 rhomboedrisches Kristallsystem

Ribonukleinsäure (RNA) 782, 785

Ribozvme 984 Rice, O.K. 1021, 1055-1057

Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus-Modell 1021

Rice-Ramsperger-Kassel-Modell 1021, 1055-1057

Richtungskomponenten (Vektor) 14, 339

Richtungsquantelung 371, 372 Rideal, E. 1091, 1092 Rinderserumalbumin (BSA) 818

Ringstrom 648, 884, 885 RNA 782, 785 Röntgen, W.C. 308, 469, 839, 840,

847–850, 858, 859, 1073, 1074 Röntgenbeugung 839, 847-850,

858, 859 Intensität 856, 858

Röntgenfluoreszenz 1074 Röntgenkristallografie 839, 840, 847-851, 858, 859

Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (XPS) 469, 1073, 1074 Röntgenphoton 848

Röntgenstrahlung 308, 847, 848

ROS 478

Rotation 306, 362, 555

- Beitrag zur Entropie 732, 733
- Energieniveaus 555, 556
- in drei Dimensionen 367-373
- mittlere Energie 717
- *n*-zählige 506, 507
- Trägheitsmoment 555-557
- zweidimensionale 362

Rotation in drei Dimensionen 367-373

Rotation in zwei Dimensionen 362-367

Rotationsachse 506, 507, 555, 842, 843

– *n*-zählige 506, 507

Rotationsbeitrag

- zur Entropie 732, 733
- zur Wärmekapazität 758, 761

Rotationsenergie 555, 556

- kinetische 364, 365, 706, 707
- mittlere 717
- Quantelung 365, 366, 556, 558-560

Rotationsfeinstruktur 600, 601 Rotationsgruppe, dreidimensionale

Rotationskonstante 558, 576, 577, 600, 601, 710

Rotationsquantelung 365, 366, 556, 558-560

Rotationsquantenzahl 556, 558-560

Rotationsschwingungsspektren 574-577

- Zweigstruktur 575, 576 Rotationsspektren 539, 555,

562-564 - Einfluss der Kernstatistik 566, 567

Rotationsspektroskopie 539, 553-555

Auswahlregeln 561, 562, 611

Rotationssymmetrie 506, 507, 517, 841, 842

Rotationstemperatur, charakteristische 710

Rotationsterm 558 Rotationsübergangsfrequenz 371 Rotationszustände 566-568, 701,

Rotationszustandssumme 708–712

- abgeplatteter 558, 559, 563

曲  $-\mathbf{H}$ 

#

 $-\Box$ 

# **1192** *Stichwortverzeichnis*

- Entartung 559, 560 - gestreckter 558, 559, 563 - linearer 560, 562, 563 - sphärischer 556–558 - starrer 555, 560, 561 - symmetrischer 558–560 rotierendes Bezugssystem 662 RRKM-Modell 1021 RRK-Modell 1021, 1055–1057 Rückstellkraft

Elastomer 811, 812harmonischer Oszillator 354

- statistisches Knäuel 811, 812 Ruhespannung 1106, 1107 Runge, C. 628

Russell, H.N. 434–436 Russell-Saunders-Kopplung

434–436 Ruthenocen, Symmetrie 509 Rydberg, J. 400, 404, 405, 444 Rydberg-Atome 444 Rydberg-Gleichung 400 Rydberg-Konstante 400, 404, 405 R-Zweig 575, 600, 601

# S

Sackur, O. 731, 732 Sackur-Tetrode-Gleichung 731, 732 Säkulardeterminante 474, 475, 479, 864 Säkulargleichungen 474, 479, 481 Sättigung 205 SALK 519, 523, 530-532 Salzbrücke 280, 282 Salzeffekt, kinetischer 1033-1035 SAM 1071 SATP 10 Sattelpunkt 1044, 1046 Satz von Hess 68 Sauerstoff 477, 478 - elektronische Übergänge 596 - MO-Beschreibung 467 - reaktive Spezies (ROS) 478 - Termsymbol 594, 595 Saunders, F. 434-436 Sayre, D. 856 Sayre-Wahrscheinlichkeitsbeziehung 856 s-Band 865 s-Block 421 Scatchard, G. 260 Scatchard-Gleichung 260

SCF 424, 425, 488

Schale 406
- abgeschlossene 417
- Valenz- 419, 466
Schaum 815
Schaumflotation 820
Scherdehnung 873
Schermodul 873, 874
Scherradius 817
Scherrer, P. 848
Scherspannung 872, 873
Schichtmizellen 822, 823
Schiff, H. 633
Schiff'sche Base 633
Schlüssel-Schloss-Prinzip 785, 786,

984
Schmelzen 161, 169, 170, 226
- inkongruentes 226
- kongruentes 226
- unter Druck 169, 170
Schmelzenthalpie 66, 67, 172, 173
Schmelzentropie 172, 173
Schmelzpunkt 161, 169, 181
Schmelztemperatur 161, 169, 181
- Druckabhängigkeit 169, 170
- von Polymeren 812, 813
Schockdesorption 1078

Schönflies-System 508, 509 schrittweise Polymerisation 980–982, 988 Schrödinger, E. 305, 318, 338, 339, 341, 344, 353, 356, 357, 362, 363, 365, 367–369, 400

Schönflies, A.M. 508, 509

Schrödinger-Gleichung
– Definition 305, 318

- der Schwingung 570

des harmonischen Oszillators 353, 356, 357

des Teilchens auf einer Kreisbahn 362, 363, 365

des Teilchens auf einer Kugelschale 367–369

- des Teilchens im

eindimensionalen Kasten 341

des Teilchens im zweidimensionalen Kasten 344

eines frei beweglichen Teilchens

318, 338, 339 - wasserstoffähnliche Atome 400

zeitunabhängige 318Schulze, H. 818Schulze-Hardy-Regel 818Schumann, V. 628

Schumann-Runge-Bande 628

schwach gekoppelte Spektren 656 schwarzer Strahler 307–309

spektrale Energiedichte 309Schwefeldioxid

– Matrixdarstellung 517, 518

Spektrum 313, 633
Schwefelhexafluorid,
VB-Beschreibung 455
Schwingquarzwaage (QCM) 1076
Schwingung 306, 353, 354, 569, 580-582

- anharmonische 572, 573

- Beitrag zur Entropie 733, 734

- Deformations- 581

- Energieniveaus 354

- Freiheitsgrade 580

- harmonische 353, 354

mittlere Energie 358–360, 717, 718

- Normal- 580-582

- Ober- 572, 573, 583

Streck- 581Valenz- 581

- Zustandssumme 712, 713, 1029

Schwingungsbeitrag

– zur Entropie 733, 734

zur Wärmekapazität 728
 Schwingungsenergie, mittlere

358–360, 717, 718

Schwingungsfeinstruktur 469 Schwingungsfreiheitsgrade 580 Schwingungsgrundübergang 571 Schwingungsmoden, Anzahl der 580

Schwingungsniveaus, Konvergenz 571, 572

Schwingungsprogression 598 Schwingungsquantenzahl 354, 582 Schwingungsspektren 539, 540, 569

Symmetrieanalyse 293, 587–590
 Schwingungsspektroskopie 539, 540, 553, 554, 569–571, 580

Auswahlregeln 571, 612, 613
 Schwingungsstruktur 596, 608
 Schwingungstemperatur,

charakteristische 713

Schwingungsterme 570–573, 581 Schwingungsübergänge 570–573, 582

Schwingungszustandssumme 712, 713, 1029

Scratchard, G. 260 Scratchard-Gleichung 260

seitenzentrierte Elementarzelle 842, 843 Sekundärstruktur 804 Sekunde (Einheit) 1123 Selbstdiffusion 117 selbstkonsistente Orbitale 424, 425 selbstkonsistentes Feld (SCF) 424, 425, 488 Selbstorganisation 762, 815, 1071 selbstorganisierte Monolage (SAM) Selektivitätskoeffizient 293 seltene Kerne 670 SEM 1072 semiempirische Verfahren 488, 489 semipermeable Membran 206 senkrechte Banden 582 Separation von Variablen 345, 374-377, 400, 401, 570 Serien (des Wasserstoffatoms) 400 Sham, L.J. 489, 490 SHE 288 SHG 840, 890, 1076 SI-Basiseinheiten 4-6, 1123 sichtbare Strahlung (VIS) 307, 308 sichtbares Licht 307, 308 Siedediagramm 213-215 - Hexan/Nitrobenzol 219 - teilweise mischbarer Flüssigkeiten 219 - Wasser/Nicotin 221 - Wasser/Triethylamin 221 - Zweiphasengebiet 214, 215 Sieden 114, 115, 161 Siedepunkt 161, 173, 174, 202 – Druckabhängigkeit 173 - Normal- 161 - Standard- 161 Siedepunktserhöhung 202-204 Siedepunktskonstante 204 Siedetemperatur 161, 173, 174, 202 SI-Einheiten 4–6, 1123 Siemens (Einheit) 875, 899, 915 Siemens, W. v. 875, 899, 915  $\sigma$ -Bindung - in der MO-Theorie 458-460 - in der VB-Theorie 449  $\sigma$ -Elektron 458, 459  $\sigma$ -Orbital 457, 462, 463, 466  $\sigma^*$ -Orbital 460, 461, 463 Simultangleichungen 974, 1091 Singulett-Term 428, 429 Singulettzustand 428, 429, 607, 991 SI-Präfixe 5, 1123

skalare Kopplung 649-654 skalare Kopplungskonstante 649, Skalarprodukt 45, 431 smektische Phase 227 Smoluchowski, M. 933 Sol 815, 816 Solvensbeitrag zur Abschirmungskonstante 645, Solvens-zugängliche Oberfläche s-Orbital 407, 408, 465, 466 sp<sup>2</sup>-Hybridorbital 454, 455 sp<sup>3</sup>-Hybridorbital 452, 453, 455 Spaltenvektor 482 Spannung - Asymmetrie- 293 - Durchlass- 879 - einachsige 872, 873 elektrische 55 - Galvani- 1099, 1100, 1106, 1107 - mechanische 872, 873 - Normal- 873 - Oberflächen- 761, 793-800 - Ruhe- 1106, 1107 - Scher- 872, 873 - Sperr- 879 - Standardzell- 284-286, 288-290 - transversale 873 - Über- 1098, 1100-1103, 1106 - Zell- 282 - Zellüber- 1106 Spannungsreihe, elektrochemische 290, 291 Spektralanalyse 549-551 spektrale Energiedichte 308 Spektrallinien 400 – Natrium D-Linien 432 - Verbreiterung 546-548 - Wasserstoffatom 400 Spektrometer, allgemeiner Aufbau 548, 549, 552 Spektroskopie - Absorptions- 541, 548, 549, 947 - Astrophysik 437, 438 - Atom- 312, 313, 426 - Auger-Elektronen- (AES) 1073, 1074 - Elektronen- 592 - Elektronenspinresonanz-(ESR) 635 - Emissions- 540, 541

- ESR- 635, 636, 640, 641

- Fourier-Transformations- 550 - Fourier-Transformations-NMR-660,661 - FT- 550 - FT-NMR- 660, 661 - Grundlagen 312, 313, 539-541 - Infrarot (IR)- 570, 571 - Kernspinresonanz- (NMR) 635 - Mikrowellen- 371, 561-564 - molekulare 312, 313, 539 - NMR- 635, 636 - Photoelektronen- (PES) 468, 469 - Photoemissions-(PES) 468, 469 - Raman- 541, 552, 564-566 - Raman-Rotations- 564-566 - Raman-Schwingungs- 577, 578, 584, 613, 614 - Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (XPS) 469, 1073, 1074 - Rotations- 539, 553-555, 561, - Schwingungs- 539, 540, 553, 554, 569-571 - thermische Desorptions- (TDS) 1087, 1088 - UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS) 469, 1073 spektroskopischer Übergang 312, 313, 426, 427 Spektrum - Absorptions- 592, 994, 995 - Analyse 549-551 - Atom- 399, 426 - Banden- 574, 583 - Definition 311 - elektromagnetisches 308, 592 - Elektronen- 540, 592, 601 - Emissions- 406, 432, 994, 995, 1041 - erster Ordnung 656 - ESR- 635, 677-679, 682 - Feinstruktur 432 - Fluoreszenz- 606 - Mehrelektronenatome 428 - NMR- 635, 643-645 - Photoelektronen- 468, 469, 628 - Raman- 564-566, 577, 578 - Raman-Rotations- 564-566 - Raman-Schwingungs- 577, 578, 584 - Rotations- 539, 555, 562-564 Rotationsschwingungs- 574–577 - schwach gekoppeltes 656 - Schwefeldioxid 313, 633





# **1194** Stichwortverzeichnis

- Schwingungs- 539, 540, 569

- stark gekoppeltes 656

- wasserstoffähnliche Atome 400, 426, 427

- Wasserstoffatom 400, 426, 427

- Zweigstruktur 575-578

- zweiter Ordnung 656

Sperrspannung 879

spezifische Enthalpie 73, 74, 95 spezifische Leitfähigkeit 915, 916,

spezifische Wärmekapazität 56 spezifisches Volumen (Polymer) 813

sphärische Polarkoordinaten 367-369, 375, 408, 427, 646, 767 sphärischer Kreisel 556-558 Sphaleritstruktur 866, 867 sp-Hybridorbital 454, 455 Spiegelebenen 507 Spiegelsymmetrie 507, 514 Spiegelung 507, 594

- antiparalleler 428, 655

- Definition 414-416

- Drehimpuls 415, 416, 428, 595

- Echo 669, 670

Spin

- Elektronen- 415, 416, 883, 884

- Entkopplung 670

- Gesamt- 428, 567

- Kern- 415, 567, 568, 636, 637, 677, 678

- Korrelation 420

- Magnetismus 884

- mittlere Energie 718, 719

- Neutronen- 415, 416, 614

- Paket 669, 670

- paralleler 428, 655

- Photonen- 415

- Protonen- 415, 567, 568, 636, 637

- Relaxation 666-670

- Vektormodell 415, 416, 428

- Wellenfunktionen 416, 417

- Zustände 417

Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen 415, 416, 638

Spin-1-Teilchen 415, 416

Spin-Bahn-Kopplung 429–431, 595

- Energie der Wechselwirkung 430, 431

Spin-Bahn-Kopplungskonstante 430-432

Spindichte 679

Spindrehimpuls 415, 416, 428, 595, Standardelektrodenpotenziale 883, 884

Spinecho 669, 670

Spin-Gitter-Relaxation 667, 668 Spin-Gitter-Relaxationszeit

667-670

Spinkorrelation 420

Spinmarker 636, 681

Spinpaarung (VB-Theorie) 445, 449

Spinpaket 669, 670

Spinguantenzahl 415

- magnetische 415

Spinrelaxation 666-670

Spins im Magnetfeld, mittlere

Energie 718, 719

Spinsonde 636, 681

Spin-Spin-Kopplung 649-656

Spin-Spin-Kopplungskonstante

649,652

Spin-Spin-Relaxation 667, 668 Spin-Spin-Relaxationszeit 663,

667-670 Spinsystem

- A<sub>2</sub>-System 654-656

- AX<sub>2</sub>-System 650, 651

- AX<sub>3</sub>-System 651

- AX-System 649, 650, 656

- heteroatomares 656

- homoatomares 656

Spinzustände 417, 667

SPM 1072

Sponer, H. 573, 574

spontane Emission 542, 543

spontane Prozesse 99, 100, 102,

104, 125, 126, 284

- Kriterien 125, 126, 284

spontante Keimbildung 801

SPR 1076, 1077

springender Ball 100, 101

Sprödigkeit 872-874

Spur (Matrix) 482

SQUID 883

Stabilität

- aromatischer Verbindungen 486-488

- von Kolloiden 816, 817

von Phasen 158, 160, 168

Stabilitätsparameter 744 Standardbedingungen (STP) 10

Standardbildungsenthalpie

- Freie 130, 131, 738, 739

- Ionen 69

Standarddruck 4, 6

284-286, 288-290

Standardenthalpie, Änderungen der 65 - 68

Standardentropie 119, 122

kalorimetrische Messung 119

- molare 119

- nach dem Dritten Hauptsatz 122

 von Ionen in Lösung (Konvention) 122, 123

Standardionisierungsenthalpie 67 Standard-Phasenübergangsenthalpie

Standard-Phasenübergangs-

temperatur 114 Standardpotenzial

– Anwendungen 290–292

- biologisches 273

- chemisches 1099

elektrochemische Zelle 284-286, 288-290

Standardreaktionsenthalpie 67, 68

Freie 266

- Temperaturabhängigkeit 70, 71,

Standardreaktionsentropie 122

 elektrochemische Bestimmung 285-287

- Temperaturabhängigkeit 123

Standardschmelzenthalpie 66, 67

Standardschmelzpunkt 161

Standardsiedepunkt 161

Standardsublimationsenthalpie 66 Standard-Umgebungsbedingungen

(SATP) 10

Standardverbrennungsenthalpie 67 - 69

Standardverdampfungsenthalpie

65 - 67Standardverdampfungsentropie 67

Standard-Wasserstoffelektrode (SHE) 288

Standardzellpotenzial 284-286,

288-290 Standardzellspannung 284-286, 288-290

– Anwendungen 290–292

- Berechnung 289, 290

– Temperaturabhängigkeit 286

Standardzustand 65

- biologischer 272, 995

stark gekoppelte Kerne 656 stark gekoppelte Spektren 656

Stark, J. 552, 562



 $-\mathbf{H}$ H

Stark-Effekt 562 Stark-Modulation 552 starrer Rotator 555, 560, 561 stationäres Bezugssystem 662 statistische Entropie 105 statistische Thermodynamik 695 statistisches Gewicht 696–698 statistisches Knäuel (Random Coil) 181, 743, 761, 805-810

- Elastomer 89, 811, 812
- Gyrationsradius 807-809
- Hooke'sches Gesetz 812
- Konformationsentropie 810, 811
- Konturlänge 807
- mit starren Bindungswinkeln
- Modell der frei beweglichen Kette
- partiell starres 809, 810
- Persistenzlänge 809, 810
- quadratisch gemittelter Abstand 807, 809, 810
- Rückstellkraft 811, 812
- Trägheitsradius 807-809
- Wahrscheinlichkeitsverteilung 805-807

Stearinsäure 798

Steckschwingung, symmetrische 581

Stefan, J. 309

Stefan-Boltzmann-Gesetz 309 Steinsalzstruktur 866 Sterine 823

sterischer Faktor 1015, 1019, 1020, 1032

Stern, O. 414, 415, 444, 992, 993, 1097

Stern-Gerlach-Experiment 414, 415, 444

Stern-Modell 1097

Stern-Volmer-Auftragung 992, 993 Stern-Volmer-Gleichung 992, 993 Stickstoff

- MO-Beschreibung 466, 467
- Photoelektronenspektrum 469
- VB-Beschreibung 449, 450

Stickstoffdioxid 531 Stickstofffixierung 477

Stickstoffmonoxid

- elektronische Zustandssumme 714
- MO-Energieniveaudiagramm 478

Stirling, J. 698, 738, 934

Stirling-Näherung 698, 738, 934 STM 1072, 1073

Stöchiometriefaktor 70

stöchiometrische Koeffizienten 67, 70. 267

Stöße, intermolekulare 21 Stoffbilanzgleichung 1025, 1026

Stoffmenge 6, 1123

Stoffmengenanteil 10, 189, 190 Stokes, G.G. 541, 552, 565, 577,

578, 917, 918, 926, 1024

Stokes-Einstein-Gleichung 926, 1024

Stokes-Linien 541, 552, 565, 577,

578 Stokes'sche Gleichung 917

Stokes'scher Radius 918 Stokes'sches Gesetz 917

Stokes-Streuung 541

Stopped-Flow-Methode 946, 947,

Stoß, elastischer 14 Stoß, reaktiver 1014 Stoßdesaktivierung 993 Stoßdichte 1015, 1016 Stoßdurchmesser 21 Stoßfluss 906-908

Stoßfrequenz 21, 22 stoßinduzierte Emission 989

Stoßlebensdauer 548 Stoßpaar 1022

Stoßparameter 1039, 1040 Stoßquerschnitt 21, 1015

- Energieabhängigkeit 1016, 1017

- reaktiver 1019 Stoßtheorie 1013, 1014

 Geschwindigkeitskonstante 1018, 1019

Stoßverbreiterung 548 Stoßzahl 21, 22

STP 10

strahlende Desaktivierung 605 Strahlung

- Anti-Stokes- 541
- Brems- 847, 848
- elektromagnetische 307
- ferne Infrarot (FIR)- 308
- Gamma- 308, 309, 888
- gestreute 541
- Hintergrund-(kosmische) 553, 621
- Infrarot (IR)- 308
- K- 848
- kosmische 308

- Laser- 609
- Mikrowellen-308
- monochromatische 549
- nahe Infrarot (NIR)- 308
- polychromatische 549
- Radio- 308
- Rayleigh- 541, 564
- Röntgen- 308, 847, 848
- schwarzer Körper 307-309
- sichtbare (VIS)- 307, 308
- Stokes- 541
- Synchrotron- 549, 848
- Ultraviolett- (UV)- 308

strahlungslose Desaktivierung 605, 606

Strahlungsquellen 549

Streckschwingung 581

- antisymmetrische 581 - symmetrische 581

Streufaktor 850, 851, 856, 858

elektronischer 858

Streuguerschnitt

- differenzieller 1039, 1040
- zustandsaufgelöster 1042

Streusalz 224

Streutheorie, quantenmechanische 1047

Streuung

- Anti-Stokes- 541
- Glorien- 1040
- Raman- 541
- Rayleigh- 541
- Regenbogen- 1041
- Stokes- 541

Strömung

- hydrodynamische 1038
- laminare 906
- molekulare 1038
- Newton'sche 906
- Strömungsmethode 946

Strom

- elektrischer 55, 1123
- lokaler 648
- Ring- 648, 884, 885
- Stromdichte 1098-1102, 1106
- anodische 1098, 1099, 1102
- Austausch- 1098, 1100-1102,
- Gesamt- 1098-1100
- kathodische 1098, 1099, 1102

Stromschlüssel 280, 282

Stromstärke, elektrische 55, 1123

Struktur

- Atom- 399





### **1196** *Stichwortverzeichnis*

- von Eis 871

- Cäsiumchlorid- 866 - Faltblatt- 783, 784 - Helix- 743, 783, 785, 804, 858, 859 - Kekulé- 451 - Kristall- 839-845, 861, 862 - Primär- 804 - Quartär- 804, 805 - Schwingungs- 596 - Sekundär- 804 - Sphalerit- 866, 867 - Steinsalz- 866 - Tertiär- 804 - Verfeinerung der 856 - von Diamant 870

- von Flüssigkeiten 789, 790 - von Graphit 870 - von Makromolekülen 782-785, 804, 805 - wasserstoffähnliche Atome 400 - Zinkblende- 866, 867 - Zweig- (Spektrum) 575-578 Strukturfaktor 851–853 Strukturverfeinerung 856 Stufe (Fehlstelle) 1068, 1069 Stunde (Einheit) 1122 Sublimation 66, 67 Sublimationsdruck 161, 175 Sublimationsenthalpie 66, 175 Substrat (Adsorbens) 1068-1070 Substrat (eines Enzyms) 984 Superkontinuum 947

Suprafluid 166 supraleitender Magnet 639 Supraleiter

- Cooper-Paar 879, 880

Superposition 329, 330, 333

– Definition 875, 879 - Hochtemperatur-(HTSC) 879,

- magnetische Eigenschaften 879, 885

- vom Typ I 885 - vom Tvp II 885

Supraleitfähigkeit 875, 879, 880,

- kritische Temperatur 885 Suszeptibilität, magnetische 647, 840, 882, 883 Symmetrie 505-512

 Auswahlregeln 510, 513, 514, 595, 596

– Flussdiagramm 510

- gerade 591 - Inversions- 461, 507 - Konsequenzen der 513, 514 - kubische 512, 513 - oktaedrische 512, 513 - Punktgruppen 508-510 - Rotations- 506, 507, 517, 841, 842

- Spiegel- 507, 514 - tetraedrische 512, 513 - ungerade 591 - von Alanin 514

 von Ammoniak 506, 507 - von Benzol 507

- von Bortrifluorid 510, 511 - von Buckminsterfulleren 513

- von Chinolin 510 - von Ferrocen 509 - von Glycin 514 - von Methan 508 - von Naphthalin 507, 508

- von Normalschwingungen 587-589

- von Phosphorpentachlorid 512

- von Propadien 512 - von Ruthenocen 509

- von Tetraphenylmethan 512, 514 - von Wasser 506, 507

- von Wasserstoffperoxid 510 - von Weinsäure 510 Symmetrieachse 506, 507

symmetrieadaptierte Linearkombination (SALK) 519,

Symmetriebezeichnungen 522–524 Symmetrieelemente 505–508, 515

- essenzielle 842 - Klassifizierung 510 Symmetriegruppe 508-510, 515, 516

- Bestimmung 510 Symmetrieklasse 516, 517 Symmetrieoperationen 506-508, 515-517 Symmetrierasse 521, 587–589

Symmetriezahl 710-712 Symmetriezentrum 461, 464, 507, 511, 514

symmetrische Streckschwingung 581 symmetrischer Kreisel 558-560,

562, 709 - Auswahlregeln 562

- Energieniveaus 709 Synchrotron 549, 848

System

- A<sub>2</sub>- 654-656 - abgeschlossenes 44 - AX- 649, 650, 656 - AX<sub>2</sub>- 650, 651 - AX<sub>3</sub>- 651

- binäres 184, 198, 211, 212, 255

- Definition 44

- disperses 762, 815-817 - Gesamtenergie 715, 716 - geschlossenes 44 - invariantes 163 - isoliertes 44

- Konfiguration 696-698 - Kristall- 841-843 - mittlere Energie 723

- offenes 44

- Parameter (Phasenregel) 162 - ternäres 229, 230 - Zweiniveau- 704, 705 systematische Auslöschungen 854 S-Zweig 577, 578

T

 $T_1$ 667-670  $T_2$ 663, 667-670  $T_2^*$ 668 Tafel, J. 1102, 1103 Tafel-Auftragung 1102, 1103 Tag (Einheit) 1122 Taylor, B. 204, 571, 572 Taylor-Reihe 204, 571, 572 TDS 1087, 1088 Teilchen auf einer Kreisbahn 362

- Drehimpuls 365 – Energieniveaus 363 - Schrödinger-Gleichung 362, 363,

Wahrscheinlichkeitsdichte 366

Wellenfunktionen 363 Teilchen auf einer Kugelschale 367 - Drehimpuls 371

- Energieniveaus 369-371 - Schrödinger-Gleichung 367–369 Variablentrennung 374

Wellenfunktionen 369, 370 Teilchen im dreidimensionalen Kasten 319, 346

Teilchen im eindimensionalen Kasten 319, 340-343 Teilchen im Kasten 340, 344

- Energieniveaus 341, 345, 346 - Nullpunktsenergie 343, 346

- Schrödinger-Gleichung 344

 $\mathbf{H}$ 曲



 $-\Box$ 

- Wahrscheinlichkeitsdichte 319, 342
- Wellenfunktionen 319, 341, 342, 345, 346

Teilchen im zweidimensionalen Kasten 344-346

teilchenselektive Elektrode 292, 293

teilweise mischbare Flüssigkeiten

- Definition 199
- Destillation 221, 222
- Freie Mischungsenthalpie 220
- Phasendiagramm 250
- Siedediagramm 219
- ternäres System 230, 231

Teller, E. 632, 780, 1082-1085, 1109-1111

TEM 1072

Temkin, M.I. 1085

Temkin-Isotherme 1085

Temperatur

- Boyle- 28
- charakteristische Rotations- 710, 728, 729
- charakteristische Schwingungs-713, 728, 729
- Curie- 885
- Debye- 312
- Definition 1, 2, 5–7
- Definition (thermodynamische) 1, 2, 6, 7, 695, 700
- Einfluss auf das Gleichgewicht 277
- Einstein- 311, 312, 726
- Erstarrungs- 161
- Gefrier- 7, 202
- Glasübergangs- 812, 813
- Inversions- 81, 83
- Krafft- 820
- kritische 25, 28, 161
- kritische Mischungs- 220, 221
- Néel- 885
- Nullpunkt 7
- Phasenübergangs- 66, 114, 159
- Rotations- 710
- Schmelz- 161, 169, 181, 812, 813
- Schwingungs- 713
- Siede- 161, 173, 174, 202
- thermodynamische 1, 2, 6, 7, 695, 700, 1123
- Übergangs- 66, 67

temperaturgesteuerte Desorption (TPD) 1087, 1088

Temperaturgradient 905

- Temperaturskala
- Beziehung zwischen 6
- Celsius- 5
- ideales Gas 5, 6
- Kelvin- 6, 7, 109, 110

- thermodynamische 6, 7, 109, 110 Temperatursprung 962–964

temperaturunabhängiger

Paramagnetismus (TIP) 885

Tenside 798-800

Tensidparameter 821

- Term 426, 429-431, 434 - Dublett 434, 435, 491
- Multiplizität 434
- Niveaus 429-431
- Rotations- 558
- Schwingungs- 570-573, 581
- Singulett- 428, 429
- Triplett- 428, 429

Termniveaus 429-431

Termsymbol 432-435, 592-595

- Sauerstoff 594, 595
- von Molekülen 592–595
- Wasserstoffmolekül-Ion 593
- zweiatomige Moleküle 592, 593

ternärer Festkörper 231, 232 ternäres Phasendiagramm 229–232

ternäres System 229, 230

Terrasse (Fehlstelle) 1068, 1069

Tertiärstruktur 804 Tesla (Einheit)

Tesla, N. 637

tetraedrische Bindung 452, 453,

tetraedrische Gruppen 512, 513 tetragonales Kristallsystem 842

Tetraphenylmethan, Symmetrie 512, 514

Tetrode, H. 731, 732

Theorem

- Äquipartitions- 48, 791
- De-Moivre- 665
- Gleichverteilungssatz 48, 791
- Koopmans- 468, 469
- Nernst'sches Wärme- 121
- Orthogonalitäts- 521
- Virial- 360

theoretische Böden, Zahl der 216, 217

Theorie

- Bänder- 839, 863-866, 875-878
- Debye- (Wärmekapazität) 312
- Debye-Hückel- 238-243

- Debye-Hückel- (erweiterte) 239, 240
- des aktivierten Komplexes 1013, 1027, 1028, 1099
- des Übergangszustands 1013, 1027, 1028, 1099
- Dichtefunktional (DFT)- 489, 490
- DLVO- 817
- Förster- 994, 995
- Gruppen- 505, 515
- Lindemann-Hinshelwood- 979, 980, 1021
- Marcus- 1050-1053
- Molekülorbital (MO)- 445, 446
- Quanten- 1, 305-307
- quantenmechanische Streu-1047
- Stoß- 1013, 1014
- Valence-Bond (VB)- 445, 448, 449, 451
- Valenzbindungs (VB)- 445, 448, 449, 451

thermische

(De-Broglie-)Wellenlänge 316, 317, 706, 707, 725, 731, 732, 737,

857, 1071

thermische Analyse 159

thermische Bewegung 47 thermische

Desorptionsspektroskopie (TDS)

1087, 1088

thermische Neutronen 857 thermischer

Ausdehnungskoeffizient 79,

80, 155

thermisches Gleichgewicht 52

Thermochemie 65

thermochemische Gleichung 66,

Thermodynamik

- Definition 1,43
- Dritter Hauptsatz 99, 121
- Erster Hauptsatz 43, 49
- Fundamentalgleichung 134, 137,
- statistische 695
- von Mischungen 190
- von Oberflächenschichten 798-800
- Zweiter Hauptsatz 99–101

thermodynamische

Fundamentalgleichung 134, 137

 $\mathbf{H}$ 曲  $-\mathbf{H}$ 

H

# Ħ

### . —<u>II</u>

# 1198 Stichwortverzeichnis

thermodynamische Gleichgewichtskonstante 268, 269 thermodynamische Kraft 903, 924, 925 thermodynamische Spontaneitätskriterien 125, 126 thermodynamische Stabilität 159, 160 thermodynamische Temperatur 1, 2, 6, 7, 695, 700, 1123 thermodynamische Temperaturskala 6, 7, 109, 110 thermodynamische Zustandsgleichung 136, 747 thermodynamischer Grenzfall 722 thermodynamischer Kreisprozess Thermogramm 72 Thomson, E. (Lord Kelvin) 6, 81, 101, 791, 801, 1123 Thomson, G.P. 316 TIBO 836, 837 TIP 885 Titration 72, 73 Tonne (Einheit) 1122 t-Orbital 602 Torr (Einheit) 4 Torricelli, E. 5 Torsionswinkel 783, 784 totales Differenzial 76, 77, 135 totalsymmetrische irreduzible Darstellung 521, 526-529 TPD 1087, 1088 Trägheitsmoment 364, 365, 555-557, 710 Trägheitsradius 807-809 Transformation - Ähnlichkeits- 485 - Fourier-(FT) 550, 551, 664-667 Transistor 879 Translation 305, 338 - Beitrag zur Entropie 731, 732 - mittlere Energie 716, 717 Translationsbeitrag zur Entropie 731, 732 Translationsenergie - kinetische 365, 706, 707 - mittlere 716, 717 Translationszustandssumme 706, 707

Transmission 545

Transmissionselektronen-

mikroskopie (TEM) 1072

Transmissionskoeffizient 1028, 1029 Transporteigenschaften 903-905 Transportkoeffizienten 906-912 transversale Relaxation 667, 668 transversale Relaxationszeit 663, 667-670 effektive 668 transversale Spannung 873 transzendente Gleichung 220, 252 Treibhauseffekt 585 Treibhausgas 585 trikline Elementarzelle 842 - Volumen 892, 893 triklines Kristallsystem 842 Tripelpunkt 7, 36, 110, 160-162, 164, 165, 175 - von Helium 165 - von Kohlendioxid 164 - von Wasser 7, 36, 110, 162, 165, Tri-p-Kresylphosphat 798 Triplett-Term 428, 429 Triplettzustand 428, 429, 594, 607, 991 Tropfen 794 Trouton, F.T. 114, 115 Trouton'sche Regel 114, 115 Truesdell, A.H. 239, 240 Truesdell-Jones-Gleichung 239, 240 Tunneleffekt 347-350, 1036, 1037, 1050-1052 - Elektronen 347-350 - Marcus-Theorie 1050-1052 - Wasserstoffatom 1036, 1037 Tunnelwahrscheinlichkeit 348, 349 - des harmonischen Oszillators 360, 361 - Wasserstoffatom 1037 Typ-II-Supraleiter 885 Typ-I-Supraleiter 885

Übergang 426

- Auswahlregeln 426, 427

- Charge-Transfer- 603

- d-d- 596

- elektronischer 543, 595, 596

– erlaubter 426

kooperativer 743, 744Ligand-zu-Metall-Charge-Transfer-(LMCT) 603

- Metall-zu-Ligand-Charge-Transfer-(MLCT) 603  $-\pi^*$  ← n-Übergang 603  $-\pi^*$  ←  $\pi$ -Übergang 603, 604 - spektroskopischer 312, 313, 426, 427 - verbotener 426 - vertikaler 597 - vibronischer 596 Übergangsdipolmoment 426, 427, 532, 543, 595, 596, 598, 766, 887, Übergangsenthalpien 66, 67 Übergangsmetalle 421, 602, 603, 1092, 1093 Übergangstemperatur 66, 67 Übergangswahrscheinlichkeit 542 Übergangszustand 967, 968, 1013, 1027, 1028, 1100 Geschwindigkeitsgesetz 1028 Theorie des 1013, 1027, 1028, 1099 Überhitzung 801 überkritisches Fluid 28, 161, 166, 167 überkritisches Kohlendioxid 166, 167 Überlagerung 329, 330, 333 Überlappung - differenzielle 488, 489 von Orbitalen 530 Überlappungsdichte 458 Überlappungsintegral 457, 459, 464–466, 474, 497, 498, 530 - Einfluss der Symmetrie 530 wasserstoffähnliche Atome 465 Überlappungsmatrix 481 übersättigter Dampf 801 Überschalldüse 1039, 1041 Überschallstrahl 1039 Überspannung 1098, 1100-1103, 1106 Ultrahochvakuumapparaturen (UHV) 1071 Ultraviolettkatastrophe 309, 310 Ultraviolett-Photoelektronenspektro-

skopie (UPS) 469

Ultraviolett-Strahlung (UV) 308

unabhängige Ionenwanderung 916

Umgebung (Definition) 44

Umkehrpunkt 354, 358

Umwandlungsgrad 744

Umlagerung 988

Umklappwinkel 662, 663





unabhängige Moleküle, mittlere
Energie 724, 725
unbestimmte Multiplikatoren 699,
700
unbestimmtes Integral 18, 1121,
1122
ungebundener Zustand 404
ungeordnete Bewegung

- eindimensionale 931-935
- Wahrscheinlichkeitsverteilung 931, 932
- zweidimensionale 834
  ungerade Parität 461
  ungerade Symmetrie 591
  Ungleichung, Clausius'sche 110
  unilamellare Vesikel 822, 823
  unimolekulare Reaktion 970, 971, 978–980, 1021, 1028, 1090
- Geschwindigkeitskonstante 1021, 1028
- Geschwindigkeitskonstante (Kassel-Form) 1021
- oberflächenkatalysierte 1090
   Universum 102, 113
   Unordnung (Konzept) 105
   Unschärferelation, Heisenberg'sche 305, 332–335
   Unschärfeverbreiterung 546–548

Unschärfeverbreiterung 546–548 untere kritische

Mischungstemperatur 221 Unterkühlung 801 Unterschale 406 unterscheidbare Moleküle 724, 725 UPS 469, 1073 UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS) 469, 1073

V

Vakuumpermeabilität 645, 648, 884

Vakuumpermittivität 46, 132, 400, 765, 766

Vakuum-Ultraviolettstrahlung 308 Valence Bond (VB)-Theorie 445, 448

- Resonanz 450, 451

UV-Strahlung 308

Spinpaarung 449Valence Bond

(VB)-Wellenfunktionen 448,

Valence Shell Electron Pair Repulsion Model (VSEPR) 625 Valenzband 877, 878, 889 Valenzbindungstheorie 445, 448, 449, 451

Valenzelektronen 419, 449, 466, 467

Valenzschale 419, 466, 467 Valenzschwingung 581

- antisymmetrische 581
- symmetrische 581

van der Waals, J. 29–32, 745–747, 761, 772, 779, 825, 827, 1041

van Krevelen, D.W. 1094 van 't Hoff, J.H. 207, 208

Van Vleck, J.H. 885 Van-der-Waals-Gleichung 29–31, 745–747, 825, 827

Van-der-Waals-Isotherme 30–32 Van-der-Waals-Koeffizienten 29, 745, 825, 827

Van-der-Waals-Kräfte 761, 772, 1041

Van-der-Waals-Moleküle 1041 Van-der-Waals-Parameter 29, 745, 825, 827

Van-der-Waals-Radius 779 Van-der-Waals-Schleifen 30, 31 Van-der-Waals-Wechselwirkung 761, 772, 1069

Van-der-Waals-Zustandsgleichung 29–31, 745–747

Van-'t-Hoff-Gleichung

- Gleichgewichtskonstante (Reaktionsisobare) 277–279
- Osmose 207, 208

Van-Vleck-Paramagnetismus 885 Variablen, reduzierte 31, 32 Variablentrennung 345, 374–377, 400, 401, 570

- harmonischer Oszillator 376, 377
- Teilchen auf einer Kugeloberfläche 374
- Teilchen im zweidimensionalen Kasten 345
- wasserstoffähnliche Atome 374–376, 400, 401

Varianz 162

Variationsprinzip 450, 451, 472, 473, 475

- heteroatomares zweiatomiges
   Molekül 473, 474
- Wasserstoffatom 505VB-Beschreibung
- Doppelbindung 451

- homoatomare zweiatomige
   Moleküle 448
- mehratomige Moleküle 451
- von Benzol 451
- von Ethen 454
- von Ethin 454, 455
- von Methan 453
- von Schwefelhexafluorid 455
- von Stickstoff 449, 450
- von Wasser 445, 451, 454
- von Wasserstoff 448, 449

VB-Theorie 445, 448 VB-Wellenfunktion 448, 449

Vektor

- Definition 14, 339
- Eigen- 484, 485
- Einheits- 431
- Magnetisierungs- 661, 662
- orthogonale 521, 522
- orthonormale 522
- Rechenvorschriften 431
- Reihen- 482
- resultierender 428, 661, 763, 764, 824, 825
- Richtungskomponenten 14, 339
- Skalarprodukt 45, 431
- Spalten- 482

Vektoraddition 431

elektrisches Dipolmoment 763, 764

Vektormodell 371, 372, 415, 416, 428, 661, 662

Vektormultiplikation 431

Vektorprodukt 431

Vektorsubtraktion 431

Verbindungshalbleiter 878

verbotener Übergang 426

Verbrauchsgeschwindigkeit 948 Verbreiterung von Spektrallinien

546-548

Verbrennung 67–69

Verbrennungsenthalpie 67–69 Verbrennungskalorimeter,

adiabatisches 60

Verdampfen 65–67

Verdampfungsenthalpie 65-67

Verdampfungsentropie 173, 174

Verfahren der

Lagrange-Multiplikatoren 699, 700

Verfeinerung der Struktur 856 Verflüssigung von Gasen 81–84 Verlust der Feinstruktur 656





# **1200** Stichwortverzeichnis

Verschiebung, chemische 643–645, 656–658

Verschiebungspolarisation 768

verschwindendes Integral 526–528

Verstärkungsfaktor (NOE) 672, 673

Versuchswellenfunktion 450, 451,

472 Verteilung

- Boltzmann- 1, 16, 17, 271, 272, 278, 553, 695, 696, 700, 701, 715, 730, 968
- Fermi-Dirac- 876, 877
- Geschwindigkeits- 16
- kanonische 722
- Maxwell-Boltzmann- 16, 17
- Planck- 310, 553
- wahrscheinlichste 698–700 Verteilungsfunktion, radiale

408–410, 418, 419, 789–791 vertikaler Übergang 597

Verwey, E. 817

Vesikel 822, 823

Vibration (Schwingung) 306

vibronischer Übergang 596 Vierkreisdiffraktometer 849

Vier-Niveau-Laser 609, 610 Virial 792, 825, 826

Virialgleichung 26, 31, 792, 825, 826

Virialkoeffizient 26, 745, 747, 825–827

- osmotischer 208

Virialtheorem 360

viskose Reibung 917

Viskosität 906, 911, 912

- Temperaturabhängigkeit 911, 912, 914, 915
- von Flüssigkeiten 906, 914, 915, 918

Viskositätskoeffizient 906, 911, 912, 917

VIS-Strahlung 307, 308

Volmer, M. 992, 993, 1098–1102

Volt (Einheit) 55, 918

Volta, A. 55, 918

Voltammetrie 1103-1106

- lineare 1103, 1104
- zyklische 1104-1106

Voltammogramm 1104–1106

Volumen

- Ausschluss- 826, 827
- Definition 6, 1122
- kritisches molares 28
- molares 9, 10, 25

- Verschiebung, chemische 643–645, partielles molares 185, 186
  - Polarisierbarkeits- 763, 765, 766
  - spezifisches (Polymer) 813

Volumenarbeit 50-52

- freie Expansion 52
- maximale 54
- reversible isotherme 53, 54

Volumenelement 17, 18, 319, 362, 368, 369

- in Kugelkoordinaten 18, 368, 369
- in zylindrischen Koordinaten

Volumensuszeptibilität, magnetische 882, 883

vorgelagertes Gleichgewicht 976, 977

Vorprodukt 1085, 1086 VSEPR-Modell 625 Vulkankurve 1092

# W

# Wärme

- als Form der Energieübertragung 46, 47
- Definition 45
- isotherme, reversible Expansion53
- molekulare Interpretation 47
- spezifische 56
- Vorzeichenkonvention 49, 50
   Wärmefluss, Vorzeichenkonvention 49, 50

# Wärmekapazität

- bei konstantem Druck 62
- bei konstantem Druck, molare62, 63
- bei konstantem Volumen 55
- bei konstantem Volumen, molare56
- bei tiefen Temperaturen 312
- Beziehung untereinander 63
- Debye-Theorie 312
- Definition 55, 56
- des Kalorimeters 55
- Einstein-Gleichung 311, 312
- molare 56
- Rotationsbeitrag 758, 761
- Schwingungsbeitrag 728
- spezifische 56
- Temperaturabhängigkeit 63, 311, 312
- Zustandssumme 728, 729

- Wärmekraftmaschine 100–102, 108, 109
- Wirkungsgrad 108

Wärmeleitfähigkeit 904, 905, 909–911

Wärmeleitfähigkeitskoeffizient 905, 909–911

Wärmeleitung 904

Wärmepumpe 145

Wärmequelle 101, 102

Wärmesenke 101, 102

Wärmetheorem, Nernst'sches 121

Wärmeübergänge 54, 60

Wärmeübertragung und

Enthalpieänderungen 60 Wahrscheinlichkeit

- Adsorptions- 1086, 1087
- Interpretation 322, 323
- Tunnel- 348, 349, 360, 361, 1037
- Übergangs- 542

Wahrscheinlichkeitsamplitude 319 Wahrscheinlichkeitsbeziehung von Sayre 856

Wahrscheinlichkeitsdichte 319

- des harmonischen Oszillators 356, 357
- des Teilchens auf einer Kreisbahn 366
- des Teilchens im dreidimensionalen Kasten 319
- des Teilchens im eindimensionalen Kasten 319, 342
- Wasserstoffatom 320

Wahrscheinlichkeitsverteilung

- statistisches Knäuel (Random Coil) 805–807
- ungeordnete Bewegung (Random Walk) 931, 932

wahrscheinlichste Geschwindigkeit 20

wahrscheinlichste Verteilung 698–700

wahrscheinlichster Kernabstand 410

Wand (eines Systems)

- adiabatische 45
- diathermische 45

Wannier, G. 887 Wannier-Exciton 887

Wasser

- Dipolmoment 763, 766
- Eisstruktur 871
- Gefrierpunkt 7





 $-\Box$ 

- hydrophobe Wechselwirkung 762, 819, 820
- Käfigbildung 819
- Normalschwingungen 581, 587,
- Nullpunktsentropie 734, 735
- partielles molares Volumen 185
- Phasendiagramm 164, 165
- radiale Verteilungsfunktion 789-791
- Symmetrie 506, 507
- Trägheitsmoment 556
- Tripelpunkt 7, 36, 110, 162, 165,
- VB-Beschreibung 445, 451, 454
- Viskosität 914, 915, 918

Wasserdampfdestillation 218 wasserstoffähnliche Atome 399, 400

- Auswahlregeln 426, 427
- Coulomb-Energie des Elektrons
- Energieniveaus 402, 404, 406
- Entartung 407, 408
- Hamilton-Operator 400
- mittlerer Radius 407, 408
- Orbitale 406-408
- radiale Wellenfunktionen 401-403
- Schrödinger-Gleichung 400
- Spektren 400, 426, 427
- Struktur 400
- Überlappungsintegrale 465
- Variablentrennung 374-376
- Wellenfunktionen 400-403
- Wasserstoffatom
- Bohr'scher Radius 334, 402
- Coulomb-Energie des Elektrons 400
- Energieniveaus 402, 404, 406
- Grotrian-Diagramm 427
- Grundlagen 399, 400
- mittlerer Radius 407, 408
- Orbitale 406-408
- spektroskopische Serien 400, 443
- Spektrum 400, 426, 427
- Struktur 400
- Tunnelwahrscheinlichkeit 1036, 1037
- Variationsprinzip 505
- Wahrscheinlichkeitsdichte 320
- Wellenfunktionen 400–403

Wasserstoffbrückenbindung 743, 761, 782-785, 1041

- Wasserstoffelektrode, Standard-(SHE) 288
- Wasserstoffion, Freie
- Bildungsenthalpie (Konvention) 131
- Wasserstoffmolekül 400, 427, 443, 448, 449
- ortho- und para- 568, 710, 711
- Symmetriezahl 711
- VB-Beschreibung 448, 449
- Wasserstoffmolekül-Ion 445, 446, 456-460
- Bindungsenergie 459, 493, 494
- Dissoziationsenergie 574
- Einhüllende 457, 458 - Hamilton-Operator 456
- Potenzialkurve 459
- Schwingungsniveaus 574
- Termsymbol 593
- Wasserstoffperoxid, Symmetrie 510
- Watson, J. 858
- Watt (Einheit) 45, 55, 1123
- Watt, J. 45, 52, 55, 1123
- Wechselwirkung
- abstoßende 780, 781, 868
- anziehende 868
- Coulomb- 46, 241, 772, 866-868, 887, 1020
- Dipol-Dipol- 653, 670, 671, 679, 680, 772-778, 824, 825
- Dipol-induzierter Dipol- 776, 777
- Dipol-Punktladungs- 772, 773
- Dispersions- 777, 778, 816, 817, 1069
- elektrostatische 46, 241, 772, 866-868, 887, 1020
- Fermi-Kontakt- 653, 654, 680
- Gesamt- 780-782
- hydrophobe 762, 819, 820
- Hyperfein- 677-680
- in Flüssigkeiten 789
- intermolekulare 24, 761, 772
- Keesom- 775, 776
- Ladungs-Dipol- 772, 773
- London- 777, 778
- $\pi$ -Elektronen- 786
- Spin-Bahn-Kopplung 429-431,
- Spin-Spin-Kopplung 649–656
- Van-der-Waals- 761, 772, 1069
- Wasserstoffbrücken 743, 761, 782-785, 1041
- zwischen Dipolen 653, 670, 671, 679, 680, 772-778

- zwischen elektrischen Multipolen 775, 776
- zwischen induzierten Dipolen 777, 778
- zwischen Ionen 777
- zwischen Punktladungen 777,
- zwischen Punktladungen und Dipolen 772, 773
- Wechselwirkungsenergien 777 Wegfunktion 76
- Weglänge, mittlere freie 22, 904, 909
- Weinsäure, Symmetrie 510
- weißes Licht 307, 308 Welle, elektromagnetische 307
- Welle, evaneszente 1076, 1077 Wellenfunktion
- akzeptable 322, 323, 335, 340, 341
- antisymmetrische 417
- Born'sche Interpretation 305, 319, 320, 335
- Definition 305, 318, 335
- des harmonischen Oszillators 355-358
- des Teilchens auf einer Kreisbahn
- des Teilchens auf einer Kugelschale 369, 370
- des Teilchens im
- dreidimensionalen Kasten 346
- des Teilchens im eindimensionalen Kasten 341
- des Teilchens im zweidimensionalen Kasten 345, 346
- Entartung 346, 347, 594
- erlaubte 322, 323, 335, 340, 341
- Gesamt- 416, 417, 566, 567
- Knoten 356, 370
- Krümmung 326, 327
- Kugelflächenfunktionen 369, 370
- Linearkombination 330, 331
- Mehrelektronenatome 413, 414
- Normierung 321, 322, 357
- polare Bindung 471
- Probe- 450, 451, 472
- radiale 401-403
- Randbedingungen 322, 323, 335, 340, 341
- Schrödinger-Gleichung 305, 318
- Spin 416, 417



 $-\Pi$ 

# **1202** Stichwortverzeichnis

- Superposition 329, 330, 333

- Valence Bond (VB)- 448, 449

- Versuchs- 450, 451, 472

- vollständiger Satz 331

- wasserstoffähnliche Atome 400-403

- Wellenpaket 333

– winkelabhängige 401

Wellengleichung, radiale 376, 401 Wellenlänge 307

- Compton- 386

- thermische (De-Broglie-) 316,

317, 706, 707, 725, 731, 732, 737, 857, 1071

Wellenpaket 333

Wellenzahl 308

Welle-Teilchen-Dualismus 305,

313, 316

Wendepunkt 27

Wetter 11, 12 Widerstand

- elektrischer 915

- Innen- 1106, 1107

Wien, W. 307

Wien'sches Gesetz 307

Wierl, R. 858

Wierl-Gleichung 858

Wilkins, M. 858

Winkel

- Azimutal- 368, 594

- Bragg'scher 849, 850

- Glanz- 849, 850

- Kontakt- 796, 797

- Polar- 368

- Raum- 1039

- Regenbogen- 1041 - Torsions- 783, 784

- Umklapp- 662, 663

winkelabhängige Wellenfunktion

Winkelfrequenz 354, 364, 365, 555 Winkelgeschwindigkeit 354, 364,

365, 555

Wirkungsgrad

- Carnot- 108

- fraktionierte Destillation 216,

- Resonanzenergietransfer 994

Wärmekraftmaschine 108

Wirkungsquantum, Planck'sches 310, 315

Wolfram-Halogen-Lampe 549

Wolkenbildung 801

X

X-Band 676

Xenon-Gasentladungslampe 549

XPS 469, 1073, 1074

Y

Young, T. 873, 874

Young'scher Modul 873, 874

Z-gewichtete mittlere Molmasse

zahlengewichtete mittlere Molmasse

802, 803

Zeeman, P. 444 Zeeman-Effekt 444

Zeit 1122, 1123

Zeitbereich (FID) 663, 664, 666

Zeitgesetz 949

zeitunabhängige

Schrödinger-Gleichung 318

- Brennstoff- 298, 1107, 1108

- elektrochemische 280-282, 1098, 1100-1103

- Elektroden-Konzentrations-

- elektrolytische 280

- Elektrolyt-Konzentrations- 79

- Elementar- 841-845

- galvanische 280, 1106, 1107

- Harned- 287, 289

symbolische Schreibweise 282

Zellpotenzial 282-286 Zellreaktion 282, 283

Zellspannung

- Definition 282

- Gleichgewichts- 283-285

- Standard- 284-286, 288-290

– Temperaturabhängigkeit 286

- Überspannung 1106

- Zusammenhang mit der Gleichgewichtskonstante 285

Zellsymbole 282

Zellüberspannung 1106

Zentrifugaldehnung 560, 561

Zentrifugaldehnungskonstante 561 Zeolithe 1089, 1090, 1093–1095

 $\zeta$ -Potenzial 817

Zimm, B.H. 744

Zimm-Bragg-Modell 744 Zinkblendestruktur 866, 867

zirkumstellarer Raum 621

Zitronensäurezyklus 273

zurückgelegte Wegstrecke (Diffusion) 930, 931 zusätzliche Arbeit 51 Zusammensetzung

– der Erdatmosphäre 11

eutektische 224, 225 Zusammensetzung im

Gleichgewicht

- Einfluss der Temperatur 277-279

Einfluss des Drucks 275-277 Zustand

- angeregter 605, 606, 609

gebundener 350, 404

metastabiler angeregter

physikalischer 4, 7, 65

 quasistationärer 973, 974, 976, 983, 1049

- Referenz- 69

- relative Besetzungszahl 1,

700-702

- Rotations- 566-568, 701, 702

- Singulett- 428, 429, 607, 991 - Spin- 417, 667

- Standard- 65

Triplett- 428, 429, 594, 607, 991

- Übergangs- 967, 968, 1013, 1027, 1028, 1100

- ungebundener 404

Zustandsdichte 309, 722, 723, 876 Zustandsfunktion 48, 49, 106, 107

Zustandsgleichung

- Berthelot- 31

- Definition 7

- des idealen Gases 7, 8, 31

- Dieterici- 31

- thermodynamische 136, 747

- Van-der-Waals- 29-31, 745-747

- Virial- 26, 31, 792

Zustandssumme

– abgeleitete Funktionen 695, 696, 736

- Beiträge 705, 706

– Definition 695, 704, 705

- Druck 736, 737, 745

- elektronische 713, 714 - Enthalpie 737

738, 739

- Entropie 695, 727, 729-732

- Faktorisierung 705, 706

- Freie Energie 736

- Freie Enthalpie 737, 738 - Freie Standardbildungsenthalpie

- Gibbs-Energie 737, 738

曲

 $-\mathbf{H}$ Ħ

- Gleichgewichtskonstante 739-743
- harmonischer Oszillator 703, 704
- Helmholtz-Energie 736
- Innere Energie 695, 727
- kanonische 722-724, 745
- molare 738, 739
- molekulare 695, 700, 703-706
- Rotations- 708-712
- Schwingungs- 712, 713, 1029
- Translations- 706, 707
- von Kohlendioxid 711
- Wärmekapazität 728, 729
- Zweiniveausystem 704 zweiatomige Moleküle 569
- Elektronenkonfiguration 462-464
- Elektronenspektren 592

- Energieniveaudiagramm 466, 467
- Gesamtdrehimpuls 595
- heteroatomare 471-476 - homoatomare 448-455
- MO-Beschreibung 462-464
- Molekülorbitale 462–466
- Potenzialkurve 569
- Rotationstemperaturen 710
- Termsymbole 592–595 zweidimensionale Bewegung 344
- Zweig - O- 577, 578
- P- 575, 600, 601
- Q- 575, 577, 578, 600
- R- 575, 600, 601
- S- 577, 578

Zweigstruktur (Spektrum) 575–578

Zweiniveausystem 704, 705

– Besetzungszahl 704, 705

- Entropie 731
- mittlere Energie 716-718
- Zustandssumme 704
- Zweiphasengebiet 214, 215
- zweite Ableitung 27, 28
- zweite Ionisierungsenergie 423
- Zweiter Hauptsatz der
  - Thermodynamik 99–101
- nach Clausius 102
- nach Kelvin 101

Zweites Fick'sches Gesetz 927, 928 Zweites Newton'sches Gesetz 15,

353

Zwischenprodukt 971-977

zyklische Kohlenwasserstoffe 499,

500

zyklische Randbedingungen 363, 368

zyklische Voltammetrie 1104-1106

Zylinderkoordinaten 362



