

## Inhaltsverzeichnis

### Vorwort *IX*

<b>1</b>	<b>Die Eigenschaften der Gase</b>	<b>1</b>
1.1	Das ideale Gas	1
1.2	Die kinetische Gastheorie	12
1.3	Reale Gase	22
<b>2</b>	<b>Der Erste Hauptsatz der Thermodynamik</b>	<b>39</b>
2.1	Grundbegriffe	39
2.2	Die Enthalpie	45
2.3	Thermochemie	47
2.4	Zustandsfunktionen und totale Differenziale	56
2.5	Adiabatische Änderungen	62
<b>3</b>	<b>Der Zweite und der Dritte Hauptsatz der Thermodynamik</b>	<b>69</b>
3.1	Die Entropie	69
3.2	Entropieänderungen bei speziellen Prozessen	75
3.3	Die Messung der Entropie	85
3.4	Die Beschränkung auf das System	93
3.5	Die Verbindung von Erstem und Zweitem Hauptsatz	98
<b>4</b>	<b>Physikalische Umwandlungen reiner Stoffe</b>	<b>109</b>
4.1	Phasendiagramme	109
4.2	Thermodynamische Betrachtung von Phasenübergängen	111
<b>5</b>	<b>Die Eigenschaften einfacher Mischungen</b>	<b>125</b>
5.1	Die thermodynamische Beschreibung von Mischungen	125
5.2	Die Eigenschaften von Lösungen	136
5.3	Phasendiagramme flüssiger Zweikomponentensysteme	150
5.4	Phasendiagramme fester Zweikomponentensysteme	157
5.5	Phasendiagramme ternärer Systeme	162
5.6	Aktivitäten	167
<b>6</b>	<b>Das chemische Gleichgewicht</b>	<b>181</b>
6.1	Die Gleichgewichtskonstante	181
6.2	Die Verschiebung des Gleichgewichts bei Änderung der Reaktionsbedingungen	189
6.3	Elektrochemische Zellen	201
6.4	Standard-Elektrodenpotenziale	207

VI | Inhaltsverzeichnis

<b>7</b>	<b>Quantentheorie</b>	221
7.1	Die Anfänge der Quantenmechanik	221
7.2	Wellenfunktionen	227
7.3	Operatoren und Observablen	232
7.4	Translation	240
7.5	Schwingung	254
7.6	Rotation	263
<b>8</b>	<b>Atomstruktur und Atomspektren</b>	273
8.1	Wasserstoffähnliche Atome	273
8.2	Mehrelektronenatome	282
8.3	Atomspektren	285
<b>9</b>	<b>Molekülstruktur</b>	293
9.1	Valence-Bond (VB)-Theorie	293
9.2	Molekülorbital (MO)-Theorie: Das Wasserstoff-Molekülion	296
9.3	Molekülorbital (MO)-Theorie: homoatomare zweiatomige Moleküle	300
9.4	Molekülorbital (MO)-Theorie: heteroatomare zweiatomige Moleküle	305
9.5	Molekülorbital (MO)-Theorie: mehratomige Moleküle	309
<b>10</b>	<b>Molekülsymmetrie</b>	323
10.1	Die Symmetrieelemente von Molekülen	323
10.2	Gruppentheorie	331
10.3	Anwendungen der Molekülsymmetrie	341
<b>11</b>	<b>Molekulare Spektroskopie</b>	349
11.1	Allgemeine Merkmale spektroskopischer Methoden	349
11.2	Rotationsspektren	358
11.3	Schwingungsspektren zweiatomiger Moleküle	369
11.4	Schwingungsspektren mehratomiger Moleküle	381
11.5	Symmetrieanalyse von Schwingungsspektren	383
11.6	Elektronenspektren	385
11.7	Die Desaktivierung angeregter Zustände	396
<b>12</b>	<b>Magnetische Resonanz</b>	403
12.1	Grundlagen der magnetischen Resonanz	403
12.2	Eigenschaften von NMR-Spektren	406
12.3	Pulstechniken in der NMR	414
12.4	Elektronenspinresonanz (ESR)	422
<b>13</b>	<b>Statistische Thermodynamik</b>	427
13.1	Die Boltzmann-Verteilung	427
13.2	Die molekulare Zustandssumme	431
13.3	Die Energie von Molekülen	439
13.4	Das kanonische Ensemble	447
13.5	Innere Energie und Entropie	448
13.6	Abgeleitete Funktionen	461
<b>14</b>	<b>Wechselwirkungen zwischen Molekülen</b>	469
14.1	Elektrische Eigenschaften	469
14.2	Wechselwirkungen zwischen Molekülen	479
14.3	Flüssigkeiten	485
14.4	Makromoleküle	487
14.5	Aggregation und Selbstorganisation	498

<b>15</b>	<b>Festkörper</b>	<b>505</b>
15.1	Kristallstrukturen	505
15.2	Beugungstechniken zur Strukturanalyse	508
15.3	Bindungen in Festkörpern	514
15.4	Mechanische Eigenschaften von Festkörpern	519
15.5	Elektrische Eigenschaften von Festkörpern	521
15.6	Magnetische Eigenschaften von Festkörpern	522
15.7	Optische Eigenschaften von Festkörpern	525
<b>16</b>	<b>Die Bewegung von Molekülen</b>	<b>529</b>
16.1	Transporteigenschaften idealer Gase	529
16.2	Bewegung von Molekülen in Flüssigkeiten	535
16.3	Diffusion	540
<b>17</b>	<b>Chemische Kinetik</b>	<b>549</b>
17.1	Die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen	549
17.2	Integrierte Geschwindigkeitsgesetze	555
17.3	Reaktionen in der Nähe des Gleichgewichts	569
17.4	Die Arrhenius-Gleichung	573
17.5	Geschwindigkeitsgesetze	577
17.6	Reaktionsmechanismen	583
17.7	Photochemie	587
<b>18</b>	<b>Reaktionsdynamik</b>	<b>603</b>
18.1	Die Stoßtheorie	603
18.2	Diffusionskontrollierte Reaktionen	608
18.3	Die Theorie des Übergangszustands	611
18.4	Die Dynamik molekularer Stöße	621
18.5	Elektronentransfer in homogenen Systemen	622
<b>19</b>	<b>Oberflächenprozesse</b>	<b>629</b>
19.1	Eigenschaften der Oberflächen von Festkörpern	629
19.2	Adsorption und Desorption	633
19.3	Heterogene Katalyse	644
19.4	Elektronentransferprozesse an Elektroden	646

