

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	V
Liste der wichtigsten Symbole	XI
1 Aggregatzustände	1
1.1 Ideale Gase	1
1.1.1 Das ideale Gasgesetz	1
1.1.2 Gasmischungen	4
1.1.3 Geschwindigkeiten von Gasteilchen	6
1.1.4 Effusion	11
1.1.5 Stöße zwischen Gasteilchen	12
1.1.6 Flüsse: Diffusion, Viskosität und Wärmeleitung	14
1.2 Reale Gase	22
1.2.1 Zwischenmolekulare Kräfte	23
1.2.2 Virial- und VAN DER WAALS-Gleichung	25
1.3 Flüssigkeiten	30
1.3.1 Niedermolekulare Flüssigkeiten	30
1.3.2 Flüssigkristalle	32
1.3.3 Lösungen von Makromolekülen	32
1.4 Kristalline Festkörper	37
2 Thermodynamik	41
2.1 Erster Hauptsatz der Thermodynamik	41
2.1.1 Begriffe und Definitionen	41
2.1.2 Formulierung des ersten Hauptsatzes	42
2.1.3 Innere Energie und Enthalpie	45
2.1.4 Wärmekapazitäten	47
2.1.5 Adiabatische Prozesse	48
2.1.6 Thermochemie	52
2.1.7 Differenz-Scanning-Kalorimetrie	57
2.2 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	59
2.2.1 Einführung der Größe Entropie	59
2.2.2 Eigenschaften der Entropie	62
2.2.3 GIBBS-Energie und HELMHOLTZ-Energie	66
2.3 Mischungen	72
2.3.1 Partielle molare Größen	72
2.3.2 Das chemische Potenzial	74
2.3.3 Mischungsgrößen	78
2.3.4 Exzessgrößen	79
2.3.5 Das RAOULTsche Gesetz	81
2.3.6 Das HENRYsche Gesetz	83
2.3.7 Kolligative Eigenschaften	86
2.4 Chemische Gleichgewichte	90
2.4.1 Gleichgewichtskonstanten	91

2.4.2	Temperatur- und Druckabhängigkeit von Gleichgewichtskonstanten	95
2.4.3	Ermittlung von Gleichgewichtskonstanten	97
2.5	Phasendiagramme	100
2.5.1	GIBBSsche Phasenregel	100
2.5.2	Einkomponentensysteme	102
2.5.3	Zweikomponentensysteme	105
2.5.4	Klassifikation von Phasenumwandlungen	113
3	Aufbau der Materie	117
3.1	Grenzen der klassischen Physik	117
3.2	Einführung in die Quantenmechanik	119
3.3	Mikroskopische Teilchen in Bewegung	122
3.3.1	Translation	122
3.3.2	Rotation	126
3.3.3	Schwingung	131
3.4	Atome	134
3.4.1	Das Wasserstoffatom	135
3.4.2	Der Elektronenspin	140
3.4.3	Aufbau des Periodensystems der Elemente	142
3.4.4	Termsymbole für Atome	146
3.5	Moleküle	148
3.5.1	Die BORN-OPPENHEIMER-Näherung	148
3.5.2	Der LCAO-Ansatz	149
3.5.3	Die chemische Bindung	151
3.5.4	Ab-initio-Molekülorbital-Rechnungen	155
3.5.5	Molekulardynamik-Computersimulationen	164
3.5.6	Die HÜCKEL-MO-Methode	164
3.6	Photoelektronenspektroskopie	167
4	Statistische Thermodynamik	169
4.1	Isolierte Systeme	169
4.2	Geschlossene Systeme	171
4.2.1	Thermodynamische Größen geschlossener Systeme	174
4.3	Offene Systeme	176
4.3.1	Thermodynamische Größen offener Systeme	178
4.4	Anwendung: Ideale Gase	180
4.4.1	Thermodynamische Größen idealer Gase	184
4.5	Das Äquipartitionstheorem	190
4.6	Anwendung: Wärmekapazitäten kristalliner Festkörper	191
5	Oberflächenerscheinungen	195
5.1	Einleitung	195
5.2	Die Oberflächenspannung	196
5.3	Gekrümmte Oberflächen	198
5.4	Benetzung fester Oberflächen	201
5.5	Thermodynamische Oberflächengrößen	202

5.6	Oberflächenerscheinungen von Mischungen	205
5.6.1	Oberflächenkonzentrationen	205
5.6.2	Der Spreitungsdruck von Oberflächenfilmen	208
5.7	Gasadsorption an Festkörperoberflächen	210
5.7.1	Theorien der Gasadsorption	211
5.7.2	Isostere Adsorptionsenthalpie	213
6	Elektrochemie	215
6.1	Ionentransport in Elektrolytlösungen	215
6.1.1	Mikroskopische Beschreibung der Ionenwanderung im elektrischen Feld	219
6.1.2	Diffusion in Elektrolytlösungen	222
6.1.3	FARADAY-Gesetze (Coulombmeter)	224
6.1.4	Überführungszahlen	225
6.1.5	Leitfähigkeit schwacher Elektrolyte	229
6.2	Thermodynamische Eigenschaften von Ionen in Lösung	230
6.3	Aktivitätskoeffizienten von Elektrolytlösungen	233
6.3.1	DEBYE-HÜCKEL-Theorie	235
6.4	Elektrochemische Thermodynamik	241
6.4.1	Die elektromotorische Kraft	241
6.4.2	Bestimmung von Standard-Potenzialen, Aktivitätskoeffizienten und pH-Werten	249
6.4.3	Diffusionspotenziale	254
6.4.4	Konzentrationsketten	255
6.5	Technisch wichtige Zellen (Galvanische Elemente)	259
6.6	Elektrolyse und Potenziale von Zellen unter Belastung	261
7	Reaktionskinetik	267
7.1	Grundbegriffe und Messmethoden	267
7.2	Einfache Geschwindigkeitsgesetze (Formalkinetik)	270
7.3	Bestimmung der Geschwindigkeitsgleichung	276
7.4	Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten	278
7.5	Komplexe Reaktionen	280
7.5.1	Reversible Reaktionen	281
7.5.2	Parallelreaktionen 1. Ordnung	283
7.5.3	Folgereaktionen	284
7.5.4	Kettenreaktionen	287
7.5.5	Explosionen	288
7.5.6	Oszillierende Reaktionen	289
7.5.7	Enzymreaktionen	289
7.6	Theorien der Elementarreaktionen	292
7.6.1	Stoßtheorie bimolekularer Reaktionen	292
7.6.2	Theorie des Übergangszustandes	294
7.6.3	Katalysatoren	301
7.7	Reaktionen in Lösung	302
7.7.1	Reaktionen zwischen Ionen	304

7.8	Relaxationsverfahren	306
8	Molekülspektroskopie	309
8.1	Elektrische Eigenschaften der Materie	309
8.1.1	Messung von elektrischen Dipolmomenten	311
8.2	Prinzipien der Spektroskopie	314
8.3	Reine Rotationsspektren	318
8.3.1	Der unstarre lineare Rotator	321
8.4	Schwingungsspektroskopie	321
8.4.1	Rotations-Schwingungsspektren	322
8.4.2	Schwingungen mehratomiger Moleküle	326
8.5	RAMAN-Spektroskopie	327
8.5.1	Rotations-RAMAN-Spektren	329
8.5.2	Schwingungs-RAMAN-Spektren	331
8.6	Elektronenschwingungsspektren von Molekülen	332
8.6.1	Elektronenschwingungsspektren in der Gasphase	334
8.6.2	Desaktivierung elektronisch angeregter Zustände	339
8.7	NMR-Spektroskopie	341
8.7.1	Grundlagen	341
8.7.2	Die chemische Verschiebung	346
8.7.3	Spin-Spin-Wechselwirkung	350
8.7.4	Chemischer Austausch	353
8.8	Elektronen-Spin-Resonanz (ESR)	354
A	Literaturauswahl	359
B	SI-Einheiten und abgeleitete Größen	363
C	Naturkonstanten	365