

Inhaltsverzeichnis

Vorwort — V

Danksagung — IX

Lehreinheiten — XV

1 Mathematische Grundlagen — 1

- 1.1 Komplexe Zahlen — 1
 - 1.1.1 Definition und Eigenschaften komplexer Zahlen — 2
 - 1.1.2 Periodisch veränderliche Größen als komplexe Funktionen der Zeit — 7
 - 1.1.3 Anwendungen komplexer e -Funktionen: Wechselstromkreis und Viskoelastizität — 9
- 1.2 Gruppentheorie — 13
 - 1.2.1 Matrizendarstellung von Symmetrioperationen: Beispiel Wassermolekül — 14
 - 1.2.2 Charaktertafel und irreduzible Darstellungen — 18
 - 1.2.3 Bestimmung der Symmetrie von Molekulschwingungen — 19

2 Historische Atommodelle — 25

- 2.1 Erste Modelle der Zusammensetzung der materiellen Welt: von Demokrit zur Alchemie — 25
- 2.2 Die fruhe Chemie: Boyle, Bottger, Lavoisier und Dalton — 26
- 2.3 Klassische Modelle von Atomen: Thomson, Rutherford und Bohr — 29
- 2.4 Das Versagen der klassischen Physik und des Bohr-Modells — 42

3 Grundlagen der Quantenmechanik — 49

- 3.1 Welle-Teilchen Dualismus — 49
 - 3.1.1 Licht: Welle oder Teilchen? — 49
 - 3.1.2 Elektronen: Welle oder Teilchen? — 56
 - 3.1.3 Materiewellen — 60
- 3.2 Die Schrodinger-Gleichung — 73
 - 3.2.1 Eine Wellengleichung für Quantenobjekte — 73
 - 3.2.2 Teilchen im Kasten — 82
- 3.3 Quantenmechanik molekularer Freiheitsgrade — 97
 - 3.3.1 Molekulare Rotation — 97
 - 3.3.2 Molekulare Schwingung — 107

4 Struktur von Atomen und Molekülen — 119

- 4.1 Quantenmechanik der elektronischen Zustände von Atomen — 119
- 4.1.1 Das Wasserstoffatom: Ein-Elektronensystem — 119
- 4.1.2 Mehrelektronensysteme — 129
- 4.2 Quantenmechanik der elektronischen Zustände von Molekülen — 144
- 4.2.1 Das einzige „exakt“ lösbare Problem: H_2^+ — 144
- 4.2.2 Das H_2 -Molekül — 154
- 4.2.3 Die LCAO-Methode für mehratomige Moleküle — 157
- 4.3 Grenzorbitalkonzept der elektronischen Zustände von Molekülen — 164
- 4.3.1 Sigma-Bindungen — 164
- 4.3.2 Pi-Bindungen — 170
- 4.3.3 Mehrelektronensysteme und Grenzorbitale — 171

5 Spektroskopie — 189

- 5.1 Grundlagen der Spektroskopie — 189
- 5.1.1 Grundprinzip spektroskopischer Methoden — 189
- 5.1.2 Wichtige Regeln zu spektroskopisch anregbaren molekularen Übergängen — 193
- 5.1.3 Linienbreiten — 205
- 5.2 Spektroskopie und Quantenmechanik — 211
- 5.2.1 Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für den ungestörten Fall — 211
- 5.2.2 Störungstheorie, Spektroskopie und Fermis Goldene Regel — 215
- 5.3 IR-Spektroskopie: Rotations-Schwingungs Spektren — 225
- 5.3.1 Auswahlregeln für Rotationsübergänge und Schwingungsübergänge — 225
- 5.3.2 Rotationsspektren von Molekülen — 226
- 5.3.3 Schwingungs-Spektren — 238
- 5.3.4 Hochaufgelöste Rotations-Schwingungs Spektren — 250
- 5.4 Raman-Streuung — 256
- 5.4.1 Raman-Spektroskopie: Theoretische Grundlagen — 256
- 5.4.2 Rotations-Raman Spektroskopie — 262
- 5.4.3 Raman-Spektroskopie: Messtechnik — 264
- 5.4.4 Vergleich zwischen Raman- und IR-Spektroskopie — 267
- 5.5 UV/Vis-Absorptionsspektroskopie — 273
- 5.5.1 Experimentelle Grundlagen — 273
- 5.5.2 UV/Vis-Spektren von Atomen — 274
- 5.5.3 UV/Vis-Spektren von Molekülen — 281
- 5.5.4 Anwendungen der UV/Vis-Spektroskopie — 292
- 5.6 Gruppentheorie und optische Spektroskopie — 299
- 5.6.1 Gruppentheorie und Schwingungsspektroskopie — 299
- 5.6.2 Gruppentheorie und UV/Vis-Absorption von Molekülen — 309

5.7	Fluoreszenzspektroskopie — 317
5.7.1	Grundlagen der Fluoreszenzspektroskopie — 317
5.7.2	Zeitaufgelöste Fluoreszenzspektroskopie — 321
5.7.3	Fluoreszenz-Resonanz Energie Transfer (FRET) — 323
5.7.4	Fluorescence Recovery after Photobleaching (FRAP) — 326
5.7.5	Fluoreszenz-Korrelationsspektroskopie (FCS) — 331
5.8	NMR-Spektroskopie — 338
5.8.1	Physikalische Grundlagen der NMR-Spektroskopie — 338
5.8.2	Grundlagen des Impulsverfahrens — 342
5.8.3	Anwendung der NMR-Spektroskopie in der chemischen Analytik — 346
6	Statistische Thermodynamik — 357
6.1	Mikro- und Makrozustand — 358
6.2	Verteilung und Gewicht — 362
6.3	Die wahrscheinlichste Verteilung: Boltzmann-Statistik — 367
6.3.1	Ableitung der Boltzmann-Verteilung — 367
6.4	Entartung — 375
6.5	Molekulare Zustandssumme q und Systemzustandssumme Q — 380
6.5.1	Konzept der Gesamtheiten — 380
6.5.2	Kanonische Zustandssumme — 382
6.5.3	Systeme unabhängiger Teilchen — 383
6.6	Zustandssumme und thermodynamische Funktionen — 385
6.6.1	Statistische Definition der Entropie — 385
6.6.2	Innere Energie und Zustandssumme — 391
6.6.3	Entropie und Zustandssumme — 392
6.6.4	Weitere thermodynamische Funktionen aus der Zustandssumme — 394
6.7	Anwendung der Statistischen Thermodynamik — 401
6.7.1	Beiträge zur Zustandssumme — 401
6.7.2	Ideale Gase — 415
6.7.3	Ideale Kristalle — 417
6.7.4	Chemische Reaktionen: Aktivierter Komplex — 420
7	Schlussbemerkung — 427

Stichwortverzeichnis — 429
