

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 Großen 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 Symmetrieeoperationen: 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 frühe 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 Schrödinger-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	Hochauflöste 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