

## 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

<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> 505
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> 529
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> 549
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> 603
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> 629
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