

Inhalt

Vorwort — v

Hinweise zur Benutzung — vi

Über die Autoren — vii

1	Phänomenologische Thermodynamik — 1
1.1	Die grundlegenden Größen und Konzepte — 1
1.1.1	Reduktion des Systems auf wenige ausgewählte Zustandsgrößen — 1
1.1.2	Wärme und Temperatur — 2
1.1.3	Transportgleichungen — 6
1.1.4	Die experimentellen Schlüsselgrößen der Thermodynamik — 12
1.1.5	Zustandsgrößen: Der mathematische Formalismus — 14
1.2	Der erste Hauptsatz der Thermodynamik — 17
1.2.1	Verständnisfragen — 19
1.3	Die Entropie — 21
1.3.1	Wärme ist keine Zustandsgröße — 21
1.3.2	Die vom System abgegebene Wärme entspricht der Änderung der Zustandsgröße Enthalpie — 22
1.3.3	Temperatur als integrierender Faktor — 23
1.4	Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik — 24
1.4.1	Expansion eines idealen Gases ins Vakuum — 26
1.4.2	Entropiezunahme bei Temperatenausgleich — 27
1.4.3	Freie Energie und Gibbs-Energie — 29
1.5	Die fundamentalen Beziehungen — 31
1.5.1	Die Gibbs-Hauptgleichung — 31
1.5.2	Homogenitätsrelation — 33
1.5.3	Die Gibbs-Duhem-Beziehung — 34
1.5.4	Thermodynamische Potentiale — 35
1.5.5	Eine Zusammenfassung ohne Formeln — 37
1.5.6	Maxwell-Relationen — 39
1.5.7	Das Guggenheim-Quadrat — 40
1.6	Die Gibbs-Energie G — 42
1.6.1	Phasengleichgewichte in Einkomponenten-Systemen — 42
1.6.2	Die Clausius-Clapeyron-Gleichung — 44
1.6.3	Thermodynamik von Mischphasen — 48
1.6.4	Das chemische Potential in einer Mischphase — 48
1.6.5	Die qualitativen Trends — 52
1.6.6	Osiose — 55

1.7	Chemisches Gleichgewicht — 58
1.7.1	Die Reaktionslaufzahl — 58
1.7.2	Die Gleichgewichtsbedingung: Minimum der Gibbs-Energie G — 59
1.7.3	Das Massenwirkungsgesetz — 62
1.7.4	Beeinflussung des Gleichgewichts — 64
1.7.5	Optimierung der Reaktionsausbeute — 65
1.8	Grenzflächen — 68
1.8.1	Grenzflächenspannung — 68
1.8.2	Keimbildung und Wachstum — 70
1.8.3	Grenzflächenspannung und das Spreiten einer Flüssigkeit — 72
1.8.4	Einfluss der Grenzfläche auf das Phasengleichgewicht — 73
1.9	Fiktive Prüfungsgespräche — 75
1.9.1	Henry-Gesetz, Boltzmann, chemische Potentiale, Osmose — 75
1.9.2	Dampfdruck, Raoult'sches Gesetz, Aktivitätskoeffizient, statistische Thermodynamik — 80
1.9.3	Aggregatzustände, Phasendiagramme, chemisches Potential, superkritische Fluide — 87
1.9.4	Phasendiagramm, Keimbildung und Wachstum — 94
1.9.5	Hauptsatz, Gibbs-Energie, ideale und reale Lösung — 96
1.9.6	Gas, Temperatur, Gasverflüssigung, Joule–Thomson-Effekt, zwischenmolekulare Kräfte, Jonglieren mit thermodynamischen Beziehungen — 98
1.9.7	Gibbs-Energie angewandt auf Phasengleichgewichte und chemische Reaktionen — 108
1.9.8	Chemisches Gleichgewicht, Prinzip des kleinsten Zwanges — 115
2	Aufbau der Materie — 119
2.1	Klassische Mechanik — 119
2.2	Wellen — 124
2.2.1	Polarisation und Intensität — 125
2.2.2	Interferenz — 129
2.2.3	Die evaneszente Welle — 133
2.2.4	Optische Lichtleiter — 136
2.2.5	Beugung — 138
2.3	Röntgenstrukturanalyse — 143
2.3.1	Streuverfahren — 143
2.3.2	Kristalle — 144
2.3.3	Netzebene und Millersche Indizes — 145
2.3.4	Reziprokes Gitter — 147
2.3.5	Beugungsmethoden zur Kristallstrukturbestimmung — 149
2.3.6	Verständnisfragen — 153
2.4	Die Doppelnatur Welle–Teilchen — 154

- 2.5 Schlüsselexperimente der Quantenmechanik — 159
- 2.6 Unschärferelation — 163
- 2.6.1 Verständnisfragen — 164
- 2.7 Der Formalismus der Quantenmechanik — 169
- 2.7.1 Axiomatische Formulierung der Quantenmechanik — 169
- 2.7.2 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung — 171
- 2.7.3 Ortsdarstellung - Impulsdarstellung — 175
- 2.7.4 Der Kommutator bestimmt die Erhaltungsgrößen des Systems — 178
- 2.7.5 Das Theorem von Ehrenfest — 180
- 2.7.6 Eine wichtige Lösungsstrategie: die Variationsrechnung — 181
- 2.8 Der Elektronenspin — 185
- 2.8.1 Der Stern-Gerlach-Versuch — 185
- 2.8.2 Spinorbitale und Raumorbitale — 186
- 2.8.3 Pauli-Prinzip — 186
- 2.9 Behandlung von Molekülen — 187
- 2.9.1 Auswahlregeln in der optischen Spektroskopie — 191
- 2.10 Fiktive Prüfungsgespräche — 194
- 2.10.1 Das Teilchen im Kasten — 194
- 2.10.2 Der quantenmechanische Oszillator — 203
- 2.10.3 Atombau und Orbitale — 210
- 2.10.4 Molekülorbitale, Polarisationszustände, Übergangsdipolmoment — 219

- 3 Statistische Thermodynamik — 231**
- 3.1 Makrozustand, Mikrozustand und Verteilungsfunktion — 231
- 3.1.1 Spiel mit Würfeln — 231
- 3.1.2 Verteilung von Teilchen auf Energieniveaus — 233
- 3.1.3 Verteilungsfunktion für ein großes Ensemble — 234
- 3.1.4 Fiktive Prüfungsgespräche — 235
- 3.2 Statistische Deutung der Entropie — 239
- 3.3 Herleitung der Boltzmann-Verteilung — 243
- 3.4 Übungsaufgaben und Verständnisfragen — 247
- 3.4.1 Informationsfluss in chemischen Systemen — 247
- 3.4.2 Teilchen im Gravitationsfeld — 248
- 3.4.3 Zentrifuge Urananreicherung — 250
- 3.4.4 Konformation von Molekülen — 251
- 3.4.5 Gepolte Polymere — 252
- 3.4.6 Spektroskopie: Besetzung von Energieniveaus — 254
- 3.4.7 Diffusion und Zufallsbewegung — 256
- 3.4.8 Aufgabe: Ermittlung der Bedeutung des Lagrange-Multiplikators β — 258

3.5	Die Zustandssumme — 260
3.5.1	Der Formalismus — 261
3.5.2	Das ideale Gas — 262
3.5.3	Die Wärmekapazität — 265
3.5.4	Der Gleichverteilungssatz der Energie — 266
3.6	Die inneren Freiheitsgrade — 267
3.6.1	Beitrag der Rotation zur molaren Wärmekapazität — 268
3.6.2	Fiktives Prüfungsgespräch: Das Rotationspektrum — 270
3.6.3	Beitrag der Schwingung zur molaren Wärmekapazität — 277
3.6.4	Diskussion der Wärmekapazität eines zweiatomigen Gases — 280
3.6.5	Verständnisfragen zur Zustandssumme — 287
4	Kinetik und Elektrochemie — 293
4.1	Ebenen des Verständnisses einer chemischen Reaktion — 293
4.2	Formalkinetik — 294
4.2.1	Die Reaktionsgeschwindigkeit — 294
4.2.2	Reaktionen nullter Ordnung — 295
4.2.3	Reaktionen erster Ordnung — 296
4.2.4	Reaktionen zweiter Ordnung — 297
4.2.5	Reaktionen dritter Ordnung — 298
4.3	Untersuchungsmethoden — 298
4.3.1	Bestimmung der Reaktionsordnung — 299
4.4	Kinetische Ableitung des Massenwirkungsgesetzes — 300
4.5	Reaktionskoordinate — 301
4.6	Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten — 302
4.7	Mikroreversibilität — 303
4.8	Komplexere Reaktionen — 303
4.8.1	Parallelreaktionen — 303
4.8.2	Folgereaktionen — 304
4.9	Fiktive Prüfungsgespräche — 306
4.9.1	Formalkinetik — 306
4.9.2	Enzymkinetik — 313
4.10	Elektrochemie — 318
4.11	Fiktive Prüfungsgespräche — 322
4.11.1	Leitfähigkeit, Batterie, Stockholmer Konvention — 322
4.11.2	Der Bleiakkumulator — 323
4.11.3	Selbstorganisation, Ionen an Grenzflächen — 324
4.11.4	Standardbildungsenthalpien, Lösungswärme — 330

Anhang Mathematischer Leitfaden	334
A.1	Funktionen mit mehreren Veränderlichen — 334
A.1.1	Zeichnerische Darstellungen — 334
A.1.2	Partielle Ableitung — 335
A.1.3	Satz von Schwarz — 337
A.1.4	Gradient — 338
A.1.5	Anwendungen des Gradienten — 340
A.1.6	Richtungsableitung — 342
A.1.7	Differenzierbarkeit — 342
A.1.8	Totales Differential — 344
A.1.9	Extremwerte — 344
A.1.10	Extremwerte mit Nebenbedingungen — 345
A.2	Komplexe Zahlen — 348
A.3	Fourier-Transformation — 351

Danksagung — 354

Sachwortregister — 355