
Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Quantenzustände von Molekülen und Systemen	2
1.3	Statistische Ensembles (Gesamtheiten)	4
1.4	Statistische Verteilungen	6
1.4.1	Binomialverteilung und Gauß-Verteilung	8
1.4.2	Methode des größten Terms	11
1.4.3	Wahrscheinlichste Energieverteilung eines mikrokanonischen Ensembles	13
1.4.4	Zwei mikrokanonische Ensembles im thermischen Kontakt	17
1.5	Übungsaufgaben	19
2	Kanonisches Ensemble	23
2.1	Innere Energie als Ensemble-Mittelwert	23
2.2	Entropie und Mikrozustände	27
2.3	Kanonische Zustandssumme und Nernstscher Wärmesatz	30
2.4	Thermodynamische Größen ausgedrückt durch die Systemzustandssumme $Z(N, V, T)$	34
2.5	Übungsaufgaben	35
3	Systeme von unabhängigen Teilchen	37
3.1	Faktorisierung der Systemzustandssumme	37
3.2	Nichtunterscheidbare Teilchen	39
3.3	Maxwell-Boltzmann-Verteilungsgesetz	40
3.4	Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Statistik	41
3.5	Übungsaufgaben	47

4	Kristalle	49
4.1	Einstein-Theorie	49
4.2	Debye-Theorie	53
4.3	Zwei-Niveau-System	57
4.4	Übungsaufgaben	60
5	Zustandssummen der molekularen Bewegungsformen	63
5.1	Translationszustandssumme	64
5.2	Rotationszustandssumme	67
5.2.1	Einfluss des Kernspins auf die Rotationszustandssumme	71
5.3	Schwingungszustandssumme	74
5.3.1	Zweiatomige Moleküle	74
5.3.2	Mehratomige Moleküle	76
5.4	Klassische Zustandssummen	79
5.4.1	Translation	80
5.4.2	Schwingung	82
5.4.3	Rotation	82
5.5	Gleichverteilungsprinzip der Energie	84
5.6	Übungsaufgaben	85
6	Ideale Gase	87
6.1	Thermodynamische Funktionen reiner Gase	88
6.1.1	Einatomige Gase	88
6.1.2	Zweiatomige Gase	92
6.2	Spektroskopische und kalorimetrische Entropie	95
6.2.1	Eingefrorene Ungleichgewichtszustände	97
6.2.2	Gleichgewichtsverteilung zwischen eng benachbarten Energieniveaus im Kristall	98
6.2.3	Praktische Entropien	99
6.3	Polares Gas im elektrischen Feld	100
6.4	Mischungen von idealen Gasen	103
6.5	Übungsaufgaben	106
7	Chemische Gleichgewichte	109
7.1	Gleichgewichtskonstanten aus Molekülzustandssummen	109
7.2	Beispiele statistischer Gleichgewichtsberechnungen	111
7.2.1	Austauschreaktionen zweiatomiger Moleküle	111
7.2.2	Isotopenaustauschreaktionen mit mehratomigen Molekülen	115
7.2.3	Dampfdruck einatomiger Festkörper	116
7.3	Theorie des aktivierten Komplexes	118
7.3.1	Ein einfaches Beispiel	120
7.3.2	Eine andere Herleitung	121
7.4	Übungsaufgaben	122

8	Reale Gase und Flüssigkeiten	125
8.1	Das Konfigurationsintegral	125
8.2	Der zweite Virialkoeffizient realer Gase	128
8.2.1	Starre Kugeln	134
8.2.2	Kastenpotential	135
8.2.3	Sutherland-Potential	135
8.2.4	Lennard-Jones-Potential	136
8.3	Van-der-Waals-Modell	137
8.3.1	Einfache Herleitung	138
8.3.2	Verallgemeinertes Van-der-Waals-Modell	140
8.4	Radiale Verteilungsfunktion	143
8.4.1	Zweiter Virialkoeffizient	146
8.4.2	Zustandsgleichung für harte Kugeln	147
8.5	Das kritische Zustandsgebiet	148
8.6	Analogie zwischen Atomen und kolloidalen Systemen	153
8.6.1	Wechselwirkungspotential	154
8.6.2	Zustandsverhalten	157
8.7	Übungsaufgaben	161
9	Gittermodelle von Mischungen	165
9.1	Langmuir-Modell der Adsorption	166
9.2	Punktdefekte in Kristallen	168
9.3	Ideale Mischungen	171
9.4	Einfache (reguläre) Mischungen	174
9.4.1	Bragg-Williams-Näherung	177
9.4.2	Eindimensionales Ising-Problem	180
9.4.3	Quasichemische Näherung	182
9.4.4	Entmischung	184
9.4.5	Anwendung der Modelle auf reale Systeme	185
9.5	Polymerlösungen	189
9.6	Übungsaufgaben	194
	Sachverzeichnis	197

Statistische Thermodynamik

Findenegg, G.H.; Hellweg, Th.

2015, XI, 200 S. 55 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-642-37871-3