

Inhalt**Seite**

Formelzeichen und Konstanten.....	VII
1 Einleitung.....	1
2 Statistische Thermodynamik idealer Gase	4
3 Idealgaswärmekapazität der Kältemittel R22, R114 und R134a.....	11
4 Grundlagen der Schwingungsfrequenzberechnung	16
4.1 Die Bewegungsgleichungen N -atomiger Moleküle.....	16
4.2 Die Bewegungsgleichungen in internen Koordinaten	22
4.3 $\mathbf{G}^{(R)}$ - und $\mathbf{F}^{(R)}$ -Matrix der Methan- und Ethanderivate.....	27
5 Symmetrieeigenschaften der Moleküle und deren Normalschwingungen.....	32
5.1 Symmetrieelemente und Symmetrieoperationen	33
5.2 Reduzible und irreduzible Darstellungen der Punktgruppe	36
5.3 Konstruktion der Symmetriekoordinaten.....	40
5.4 Faktorisierung der Säkulargleichung	43
5.5 Schwingungsfrequenz- und Kraftkonstantenberechnung im Raum der Symmetriekoordinaten	46
6 Das Urey-Bradley-Modell der potentiellen Energie	48
6.1 Das einfache Urey-Bradley-Modell	48
6.2 Das modifizierte Urey-Bradley-Modell.....	52

7 Ergebnisse.....	56
7.1 Schwingungsfrequenzen und Idealgaswärmekapazität der Methanderivate	57
7.2 Schwingungsfrequenzen und Idealgaswärmekapazität der Methan- und Ethanderivate	64
7.3 Der Beitrag der gehemmten inneren Rotation zur Idealgas- wärmekapazität.....	86
7.4 Vergleich der Berechnungen mit experimentellen c_p^o -Daten	101
8 Gruppenbeitragsmethoden.....	113
9 Zusammenfassung.....	118
Anhang A: $\mathbf{G}^{(R)}$ -Matrixelemente.....	121
Anhang B: Symmetriekoordinaten	127
Anhang C: Eliminierung der Redundanzen aus dem Urey-Bradley-Modell	143
Anhang D: Redundanzgleichungen.....	149
Anhang E: Geometriedaten.....	152
Anhang F: Kraftkonstanten und Schwingungsfrequenzen der Methanderivate....	155
Anhang G: Kraftkonstanten und Schwingungsfrequenzen der Methan- und Ethanderivate	162
Literatur	188