

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	3
2 Orbitaltheorie	3
2.2 Schrödinger Gleichung	3
2.3 Kimballtheorie	3
2.4 Überlappung homogene Kugel und Punktladung.....	3
2.5 LCAO Überlappung nach Gericke	4
2.6 Überlappung numerisch	4
3 Zustandsgleichungen.....	4
3.1 Van der Waals Gleichung	4
3.2 Soave Redlich Kwong Gleichung	4
3.3 Peng Robinson Gleichung.....	4
3.4 Thermodynamische Daten.....	4
3.4.1 Volumen.....	4
3.4.2 Dichte	4
3.4.3 Verdampfungsenthalpie	4
3.4.4 Zustandsgleichung nach Lennard-Jones.....	4
4 Lennard-Jones	4
4.1 Einleitungen	4
4.2 Parameter A nach Moelwyn-Hughes	5
4.3 Parameter B nach Moelwyn-Hughes.....	5
4.3.1 Dipolmoment.....	5
4.3.2 Molrefraktion	5
4.3.3 Polarisierung.....	5
4.3.4 Bindungsfrequenz	5
4.4 Parameter Sigma und Epsilon	5
4.4.1 Kritische Daten.....	5
4.4.2 Virialkoeffizient	5
4.4.3 Feststoffdichte	6
4.4.4 Sublimationswärme	6
4.5 Feststoffmodell nach Moelwyn-Hughes.....	6
4.6 Flüssigmodell nach Moelwyn-Hughes	6
4.7 Berechnen der Bindungsenergie.....	6
5 Summationskonstanten	6
5.1 Kubische Atomanordnung.....	6
5.2 Hexagonale Atomanordnung.....	7
6 Dynamische Lennard-Jones Simulation.....	8
6.1 2D Simulation nach Hamm in VB und VBA	8
7 Chemcad Daten	8
8 Lennard-Jones Daten.....	8

8.1 Tabelle nach Poling, Prausnitz, O'Connell	9
8.2 Tabelle nach McQuarrie.....	9
8.3 Tabelle nach Ebert, Ederer	9
8.4 Sonstige.....	9
9 Atomare Daten	9
9.1 Atomradien.....	9
9.2 Bindungslängen.....	9
9.3 Elektronegativität	9
10 Anhang.....	9
11 Literatur.....	9
Word Inhaltsverzeichnis erstellen	9
Word Formelnummerierung erstellen	9
Word Formeln nummerieren.....	9
Word Abb. Nummerierung	10
Literaturverzeichnis.....	10