

III. Literaturhinweise

Zum vertieften Studium spektroskopischer Fragestellungen seien die folgenden Literaturhinweise gegeben:

1. Allgemeine Grundlagen

H. Eyring, J. Walter, G. E. Kimball:
Quantum Chemistry.
John Wiley & Sons, 1965

L. Pauling, E. B. Wilson:
Introduction to Quantum
Mechanics.
McGraw-Hill Book Company,
1935

M. Tinkham:
Group Theory and Quantum
Mechanics.
McGraw-Hill Book Company,
1964

M. Hamermesh:
Group Theory and its Application
to Physical Problems.
Addison-Wesley Publishing Com-
pany, 1964

H. Margenau, G. M. Murphy:
Die Mathematik für Physik und
Chemie.
Verlag H. Deutsch, 1967

2. Atomspektroskopie

E. U. Condon, G. H. Shortley:
The Theory of Atomic Spectra.
Cambridge, At the University
Press, 1970.

3. Molekülspektroskopie

C. N. Banwell:
Fundamentals of Molecular
Spectroscopy.
McGraw-Hill Book Company,
1973

J. Brandmüller, H. Moser:
Einführung in die Ramanspektro-
skopie.
Dr. Dietrich Steinkopff-Verlag,
1962

G. Herzberg:
Molecular Spectra and Molecular
Structure
I. Spectra of Diatomic Molecules.
Van Nostrand Reinhold Company,
1950

G. Herzberg:
Molecular Spectra and Molecular
Structure.
II. Infrared and Raman Spectra of
Polyatomic Molecules.
D. van Nostrand Company, 1966

Jaffé and Orchin:
Theory and Applications of Ultra-
violett Spectroscopy.
John Wiley and Sons, 1962

H. L. Schläfer, G. Gliemann:
Einführung in die Ligandenfeld-
theorie.
Akademische Verlagsgesellschaft
Frankfurt am Main, 1980

A. Streitwieser:
Molecular Orbital Theory for
Organic Chemists.
John Wiley & Sons, 1961

4. Mößbauerspektren

H. Wegener:
Der Mößbauereffekt und seine
Anwendung in Physik und Chemie.
Bibliographisches Institut Mannheim,
1966

5. Kern- und Elektronenspinresonanz

H. Günther:
NMR-Spektroskopie.
Georg Thieme Verlag, 1973

H. Sillescu:
Kernmagnetische Resonanz.
Springer Verlag, 1966

C. P. Slichter:
Principles of Magnetic Resonance.
Springer Verlag, 1978

Stichwortverzeichnis

- Abschirmkonstante 146, 149
Abschirmung, diamagnetische 146
Absorption 1, 13, 14, 21
Alkaliatomspektren 40ff.
Anti-Stokes-Linien 132
Antisymmetrieprinzip 46
Atomabsorptionsspektroskopie 36
Atomspektren 36 ff.
–, Einelektronenatome 40ff.
–, Mehrelektronenatome 43 ff., 57
–, Wasserstoffatom 36ff.
Auflösungsvermögen 18
Aufspaltungsschema von Atom-
zuständen bei Symmetrieeer-
niedrigung 84
Auslenkungs koordinaten
(Verrückungs koordinaten) 93, 95, 103, 115, 119
Austausch-Integrale 137
Auswahlregeln, gruppentheo-
retisch 110ff.
Auswahlregeln für elektrische
Dipolübergänge
–, Einelektronenatome bezüglich
 n, l, m_l, s, j 39, 40ff., 42f.
–, Mehrelektronenatome 56f.
–, Mehrelektronenmoleküle 77
–, Rotation 122, 136
–, Rotationsschwingungs-
kopplung 124, 136
–, Schwingungen 107ff., 110ff.
–, IR-aktive und -raman-aktive Schwin-
gungen 106f., 114, 117f., 120, 132,
134
Auswahlregeln für magnetische
Dipolübergänge im NMR 148, 153
–, im ESR 163
Auxochrome 79
- Bahndrehimpuls**, Einelektronen- 33,37,
70, 126
Bahndrehimpuls, Gesamt- 37, 47ff., 71
Bandenspektren 1
Bathochromie 79
Bindungsabstand 123
Bindungsstärke 88
- Bohrsches Magneton 162
Born-Oppenheimer-Näherung 60ff.
Brechungsindex 169
- Charakterentafel $C_{\infty v}$ 72
–, C_{2v} 114
–, $D_{\infty h}$ 72, 119
Charge-Transfer-Banden 86
Chemische Verschiebung 149
Chrom³⁺-Komplexe 83, 85f.
Chromophore 79
Clausius-Mossotti-Gleichung 169
Coulomb-Integrale 137
- Dacheffekt 157, 160
Debye-Waller-Faktor 25
Diagonalisierung, Matrix- 96ff.
Diamagnetische Abschirmung 146
Dielektrizitätszahl 167, 169
Differentialgleichung (gekoppelte) 91
Dipolmoment, elektrisches 106, 122, 128
–, induziertes 130, 167
–, permanentes 169f.
Dipolübergang, elektrischer 16f., 40, 57,
108, 112
–, magnetischer 17, 57, 147f.
Dissoziationsenergie 69
Dopplereffekt 19, 25
Dopplerverbreiterung 23f.
Drehimpuls, Gesamt- 38, 55
- Eigendrehimpuls, Elektronen 37, 162
–, Gesamt- 37, 43, 48, 55
Eigenvektor 97ff.
Einsteinkoeffizient 17
Elektronenkonfiguration, Atome 56
Elektronenspektren, mehratomiger
Moleküle 77ff.
Elektronenspinresonanzspektro-
skopie 162ff.
Elektronenwechselwirkung 44, 49, 55,
83, 137
Emission 1, 21
–, induzierte 14, 17
–, spontane 17
–, rückstoßfreie 24

- Energieeigenwerte für Rotationen 66, 121 ff., 126
 –, Schwingungen 69, 107, 111
 –, Kerne im Magnetfeld 146
 –, Kerne mit Spinkopplung 153
 ESCA-Spektren 142
 Extinktion 3
 Extinktionskoeffizient 3, 87
- Fermi-Kontakt-Wechselwirkung 164 f.
 Fluoreszenzspektren 136, 138
 Franck-Condon-Prinzip 127 ff.
 Freiheitsgrade 1, 17
 –, Separation 58 ff.
 Frequenz 2
 Fundamentalschwingungen 113
 γ -Quanten 20 ff.
- Gesamtzustandsfunktion für gekoppelte harmonische Oszillatoren 111 ff.
- H_2^+ -Molekülion 60
 Halbwertsbreite 18, 21
 Hamiltonoperator, zeitabhängiger 5, 8, 11, 16, 147
 Hauptachsentransformation 27, 96 ff.
 Hauptträgheitsachse 127
 Hermiteische Polynome 69, 107 ff.
 Hooke'sches Gesetz 68, 89
 Hund'sche Regeln 55 f., 73, 75
 Hyperchromie 80 f.
 Hyperfeinstruktur-Kopplungskonstante 164
 Hypochromie 80
 Hypsochromie 79
- Innere Koordinaten 105
 Innere Umwandlung 138 f.
 Intensität 15, 18, 80
 Intersystem Crossing 138 f.
 Ionisierungsenergie 140
 Isochrone Kerne 158
 Isomerieverschiebung 26 ff., 30 f.
 Isosbestischer Punkt 88
 Isotopensubstitution 106
- Jablonski-Schema 138
 Jahn-Teller-Theorem 137
 j – j-Kopplung 58
- Kernmagnetische Resonanzspektroskopie 142 ff.
 Kernzustände 20
 Kombinationsschwingungen 113
 Kontinuierliche Spektren 1
 Koopman-Theorem 140
 Koordinaten, massengewichtete 95, 99, 102
 Kopplungskonstante 150, 157, 164
 Kraftkonstante 68 f., 89, 94, 104 f.
 Kreisel, symmetrischer 126
 Kristallphosphoreszenz 140
 Kristalllumineszenz 139
- Lambert-Beer-Gesetz 2 f.
 Larmor-Frequenz 144, 148
 Landé-g-Faktor 162
 Lebensdauer 17, 18, 22, 136, 137
 Legendre'sche Polynome 41, 65
 Ligandenfeldtheorie 36, 82 f.
 Linearkombination von Atomzuständen (LCAO) 73 f., 86
 Linienbreite 17 ff.
 Linienspektren 1
 Linienverbreiterung 18
 Lösungsmittelleffekte (UV-Spektren) 80
 Lorentz-Lorenz-Gleichung 169
 L – S-Kopplung 58
 Lumineszenz 136
- Magnetisch äquivalente Kerne 158
 Magnetisches Moment, Elektron 162
 –, Kern 142, 144
 Magnetogyrisches Verhältnis 142, 162
 Mehrelektronenatom-spektren 43 ff., 56 f.
 Mehrelektronenatomzustände 43 ff.
 Mehrelektronenmoleküle, Elektronenspektren 77 ff.
 Mehrelektronenniveau, Entartungsgrad 46 f., 53
 Mehrelektronenproduktfunktion 45 f.
 Mehrelektronenterme, Atome 56, 83
 Modalmatrix 101
 Mößbauereffekt, Isomerieverschiebung 30
 –, Quadrupolaufspaltung 30
 Mößbauerspektroskopie 20 ff.
 Mößbauerspektren, Meßprinzip 25
 Molekülspektren zweiatomiger Moleküle 70 ff.

- Molekülzustände 70
 σ, π, δ – 70ff, 78
 Σ, Π, Δ – 71ff.
 –, nicht bindend 78, 141
 Molpolarisation 169f.
 Molrefraktion 169
 Morse-Funktion 69
 Moseley'sches Gesetz 35
 Multiplizität 37, 42, 43, 51, 73
 Multiplizitätsverbot 43, 57, 77, 85, 136f.
- Natrium-D-Linie 21, 40
 Nichtkombinationssatz 50, 54
 Normalfrequenzen, Anzahl 105
 Normalkoordinaten 93f., 110
 Normalschwingungen 91 ff.
 –, Acetylen-Molekül 118 f.
 –, H₂O-Molekül 114ff., 118
 Nullpunktenergie 69
- Obertöne 92, 110, 113
 Orbitalenergie 141
 Oszillator, anharmonischer 69, 110
 –, gekoppelter 90ff.
 –, im elektrischen Feld 15 f.
 –, harmonischer 16, 67 f., 89ff., 107
- Paritätsverbot 77, 85
 Pauliprinzip 46, 71, 76
 p²-Problem 43ff.
 Phasenkonstante 90, 92
 Phosphoreszenzspektren 136, 138
 Photoelektronenspektroskopie 140ff.
 Photoelektronenspektren (Edelgase) 141
 Poisson-Gleichung 29
 Polarisation, elektrische 166ff.
 Polarisierbarkeit 107, 130, 167 ff.
 Polarisierbarkeitstensor 114, 118, 131 f.,
 134
 Potential, anharmonisches 69
 –, harmonisches 67 f., 89, 103
 Präzession 144
 P-Zweig 125, 127
- Quadratische Form 96
 Quadrupolaufspaltung 26 ff., 30, 32
 Quadrupolmoment, elektrisches 32, 159,
 161
 Quadrupolresonanzspektroskopie 159
 Quadrupolübergang, elektrischer 17, 57
- Quadrupolwechselwirkung 122, 161
 Q-Zweig 125, 127
- Raman-Spektroskopie 130ff.
 Rayleigh-Streuung 132
 Refraktion 166ff.
 Relaxation 161
 Repetenz 2
 Resonanz 13
 Resonanzabsorption 13, 21
 Resonanzfluoreszenz 139
 Richtungsquantelung 145
 Röntgenabsorptionsspektrum 35
 Röntgenemissionsspektrum 34f.
 Röntgenkante 35
 Röntgenspektroskopie 33ff.
 Röntgenstrahlung, charakteristische 34
 Rotator, nicht-starrer 125
 –, starrer 66, 120ff.
 Rotationen 59, 66
 Rotationskonstante 122, 125
 Rotationsschwingungskopplung 124, 136
 Rotationsschwingungsspektren 124
 Rotationspektren 120ff.
 Rotationspektrum, starrer
 Rotator 123
 Rotationsstruktur von
 Elektronenzuständen 126
 Russell-Saunders-Kopplung 58, 162
 Rydberg-Konstante 35
 R-Zweig 125, 127
- Säkulargleichung 49, 151
 Sauerstoffmolekül 73ff.
 Schiebeoperatoren 54, 143 f.
 Schrödingergleichung für zeitab-
 hängige Ph nomene 5 ff.
 Schwingungen 59, 66ff., 88ff., 110ff.
 Schwingungsfreiheitsgrade 105
 Schwingungskaskade 138
 Schwingungsspektren 88ff.
 Separation, Molekülfreiheits-
 grade 58 ff., 127
 Separationsansatz 6, 44, 62, 64, 110, 128
 Slaterdeterminante 46f., 48, 76
 Spektralbereiche 4
 Spektrochemische Serie 82
 Spin 37
 Spin-Bahnkopplung 38 f., 42, 56, 58, 162
 Spineigenfunktion 42, 143

Spinoperatoren, Kern 143
–, Elektron 42, 48f.
Spin-Spin-Kopplung, Kern-Kern 149
–, Kern-Elektron 164
Spinzustände, Kern 143, 147
–, Elektron 42
Störung, harmonische 10
–, zeitabhängige 5 ff.
Störungsrechnung, zeitunabhängig 49, 151
Stokes-Linien 132
Stoßverbreiterung 19

Termfunktion 53 f.
Termsymbole, Atome 37 ff.
Trägheitsmoment 121, 123
Transmission 3

Übergangsmetallkomplexe 82
Übergangsmoment 12, 16, 132f., 156
Übergangswahrscheinlichkeit 10 ff., 17
Unschärferelation 18

Vektor, axialer 72, 114
Verrückungskordinaten 89

Wasserstoffatom, Elektronenzustände 38
–, Spektrum 36 ff., 39
–, Feinstruktur 39
Wellenzahl 2

Zeemann-Aufspaltung 145, 163

Grundzüge der Physikalischen Chemie in Einzeldarstellungen

Herausgegeben von Prof. Dr. ROLF HAASE (Aachen)

- Band I: *R. Haase* (Aachen)
Thermodynamik
VIII, 142 Seiten, 15 Abb., 6 Tab. DM 18, –
- Band II: *G. Findenegg* (Bochum)
Statistische Thermodynamik
In Vorbereitung.
- Band III: *R. Haase* (Aachen)
Transportvorgänge
VIII, 95 Seiten, 15 Abb., 5 Tab. DM 12, –
- Band IV: *K.-H. Homann* (Darmstadt)
Reaktionskinetik
X, 154 Seiten, 43 Abb., 7 Tab. DM 22, –
- Band V: *R. Haase* (Aachen)
Elektrochemie I:
Thermodynamik elektrochemischer Systeme
VII, 74 Seiten, 6 Abb., 3 Tab. DM 12, –
- Band VI: *W. Vielstich* und *W. Schmickler* (Bonn)
Elektrochemie II:
Kinetik elektrochemischer Systeme
XII, 147 Seiten, 99 Abb., 6 Tab. DM 28, –
- Band VII: *M. Kahlweit* (Göttingen)
Grenzflächenerscheinungen
X, 160 Seiten, 51 Abb. DM 29,50
- Band VIII: *W. Borchard* (Clausthal)
Hochpolymere
In Vorbereitung.
- Band IX: *K. Hensen* (Frankfurt a. M.)
Molekülbau und Spektren
X, 178 Seiten, 45 Abb., 20 Tab. DM 30, –
- Band X: *K. Hensen* (Frankfurt a. M.)
Theorie der chemischen Bindung
X, 149 Seiten, 39 Abb., 17 Tab. DM 20, –

DR. DIETRICH STEINKOPFF VERLAG · DARMSTADT