

Literaturverzeichnis

Dieses Verzeichnis erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Es gibt nur einige Hinweise auf weiterführende Literatur, Lehrbücher und Tabellenwerke, insbesondere die im Text zitierten.

1. HERZBERG, G.: Molecular spectra and molecular structure. I. Spectra of diatomic molecules. 2nd edition. New York: van Nostrand Co. 1950.
2. HERZBERG, G.: Molecular spectra and molecular structure. II. Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules. 5th edition. New York: van Nostrand Co. 1951.
3. HERZBERG, G.: Molecular spectra and molecular structure. III. Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules. New York: van Nostrand Co. 1966.
4. HERZBERG, G.: The spectra and structures of simple free radicals (An introduction to molecular spectroscopy). Ithaca, N.Y.: Cornell University Press 1971.
5. HERZBERG, G.: Einführung in die Molekülspektroskopie. (Übersetzung von 4.). Darmstadt 1973.
6. BRITAIN, E. F. H., GEORGE, W. O., WELLS, C. H. J.: Introduction to molecular spectroscopy. Theory and experiment. New York: Academic Press 1970.
7. BINGEL, W. A.: Theorie der Molekülspektren. Weinheim/Bergstr.: Verlag Chemie 1967.
8. FINKELNBURG, W.: Kontinuierliche Spektren. Berlin: Springer 1938.
9. TOWNES, C. H., SCHAWLOW, A. L.: Microwave spectroscopy. New York 1955.
10. KUSCH, P.: Atomic and molecular beam spectroscopy. In: Handbuch der Physik, Bd. XXXVII/1, S. 1. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1959.
11. BRÜGEL, W.: Einführung in die Ultrarotspektroskopie. 4. Auflage. Darmstadt 1969.
12. BRANDMÜLLER, J., MOSER, H.: Einführung in die Ramanspektroskopie. Darmstadt 1962.
13. MATOSSI, F.: Der Raman-Effekt. 2. Auflage. Braunschweig 1959.
14. COLTHUP, N. B., DALY, L. H., WIBERLEY, E.: Introduction to infrared and Raman spectroscopy. New York-London 1964.
15. NIELSEN, H. H.: The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infra-red. In: Handbuch der Physik, Bd. XXXVII/1, S. 173. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1959.
16. WILSON, E. B., DECIUS, J. C., CROSS, P. C.: Molecular vibrations. New York 1955.
17. MATHIEU, J. P.: Spectres de vibration et symetrie des molécules et de cristaux. Paris 1945.
18. HARTMANN, H.: Theorie der chemischen Bindung auf quantentheoretischer Grundlage. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1954.

19. HARTMANN, H.: Die chemische Bindung. Drei Vorlesungen für Chemiker. 3. Auflage. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1971.
20. PAULING, L.: Die Natur der chemischen Bindung. 3. Aufl. Weinheim/Bergstr.: Verlag Chemie 1968.
21. MARGENAU, H., KESTNER, N. R.: Theory of intermolecular forces. 2nd ed. Oxford 1971.
22. KOTANI, M., OHNO, K., KAYAMA, K.: Quantum mechanics of electronic structure of simple molecules. In: Handbuch der Physik. Bd. XXXVII/2, S. 1. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1961.
23. PLATT, J. R.: The chemical bond and the distribution of electrons in molecules. In: Handbuch der Physik. Bd. XXXVII/2, S. 173. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1961.
24. WAHL, A. C.: Scientific American. **222**, 54(1970).
25. HELLWEGE, K. H.: Einführung in die Physik der Atome. 4. Auflage. In: Heidelberg Taschenbücher, Bd. 2. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1974.
- 26./27. HELLWEGE, K.-H.: Einführung in die Festkörperphysik, 3. Auflage. Berlin-Heidelberg-New York-London-Paris-Tokyo: Springer 1988.
28. NYE, J. F.: Physical properties of crystals, their representation by tensors and matrices. Oxford: 1957.
29. ROSEN, B. (ed.): Données spectroscopiques relatives aux molécules diatomiques. Tables internationales de constantes sélectionnées, T. 17. Oxford: Pergamon Press 1970..
30. HELLWEGE, K. H. (Hrsg.): LANDOLT-BÖRNSTEIN-Tabellen (Neue Serie), Bde. II/4 (1967), II/6 (1974), II/7 (1976), II/14 a, b (1982, 83), II/15 (1987).

Sachverzeichnis

- Absorptionsspektren von Ionenmolekeln 83
- Abstoßungspotential von Ionenmolekeln 81, 85
- von van der Waals-Molekeln 95
- Abstoßungsterm 11
- des H_2 90
- und Prädissoziation 75
- Abstoßungszustand des H_2 90
- Adiabatische Näherung 4, 8
- Anharmonizitätsfaktoren von Schwingungstermen 25
- — —, spektroskopische Bestimmung 62
- Anti-Stokes*-Linie 129, 135
- Anzahl von Freiheitsgraden 104
- von Rotationen 105
- von Schwingungen 106
- von Translationen 105
- Atom, vereinigt 6, 97
- Atome, getrennte 6, 97
- Atommolekeln 80
- Austausch von gleichen Bosonen 102
- von Elektronen 88
- von gleichen Fermionen 102
- von gleichen Kernen 102, 140
- , Symmetrie bei 140
- Austauschentartung 88, 142
- Austauschintegral 89
- Austauschkraft 85
- Austausch-Übergangsregel 143
- bei elektrischer Dipolstrahlung 144
- durch symmetrische Operatoren 143
- Auswahlregeln bei Dipolstrahlung
- in Bandenspektren 56
- — für die Bahnquantenzahl 57
- — des symmetrischen Kreisels 56
- — für die Parität 57, 136, 147
- — für die Spinquantenzahl 57
- für den harmonischen Oszillator 30
- im Ramanspektrum 133
- Auswahlregeln im Rotationsschwingungsspektrum 29, 35, 118
- im Rotationsspektrum 18, 20, 115
- Asymmetrischer Kreisel, Rotationsramaneffekt 133
- —, Trägheitsellipsoid 105
- Bandenfolge 67
- Bandenkanten 31, 60
- Bandenkonvergenzstelle 70
- durch Extrapolation 73
- , Beispiel J_2 70
- , Beispiel O_2 72
- Bandenserie 67
- Bandenspektren mehratomiger Molekeln 103
- zweiatomiger Molekeln 55
- — —, symmetrischer Kreisel 56
- Bandenstruktur, Störungen der 79
- Bandensystem 56
- , korrespondenzmäßig-klassisch 63
- , Schwingungsstruktur 64
- Berührungsabstand in Ionenmolekeln 81
- Bindungstypen, chemische 80
- Bindungszustand 11
- des H_2 90
- Condon*-Parabel 68
- Coulomb*-Integral 89
- Coulomb*-Wechselwirkung 93
- Dehnungskonstanten der unstarren Hantel 17
- , spektroskopische Bestimmung 20
- Diffuse Spektren 79, 97
- Dipol-Dipol-Wechselwirkung 95
- Dipolmoment, elektrisches 93
- , induziertes 127

- Dipolmoment, permanentes 114, 124, 19
 —, —, von Kugelkreiseln 115
 —, —, von symmetrischen Kreiseln 115
 —, —, und Symmetrie 115
 —, schwingendes 119, 124
 Dipol-Quadrupol-Wechselwirkung 96
 Dipolstrahlung, elektrische
 —, Auswahlregeln für den starren Ro-
 tator 18, 20
 —, — in Bandenspektren 56, 57
 —, —, für Elektronenübergänge 57
 —, — für den anharmonischen rotieren-
 den Oszillator 29, 35
 —, — für den harmonischen Oszillator 30
 Dispersionsbindung 80
 Dispersionskraft 96
 Dissoziation durch Stoß 25, 69
 — durch Lichtabsorption 69, 70
 Dissoziationsarbeit (-energie) 6, 8
 — des anharmonischen Oszillators 26
 —, spektroskopische Bestimmung
 70, 73
 Dissoziationsgrenze des anharmonischen
 Oszillators 25
 Dissoziationsgrenzkontinuum 26
 Drehimpuls zweiatomiger Molekeln
 — der Elektronenbahn 38, 50
 — der Elektronenspins 39, 50
 —, gesamter elektronischer 40, 44
 — der Kernrotation 50
 — des symmetrischen Kreisels (Fall a)
 51
 — bei schwacher Spinkopplung (Fall b)
 54
 — der starren Hantel 13
 Drehimpuls mehratomiger Molekeln
 — von Eigenschwingungen 122
 — des Kugelkreisels 114
 — linearer Molekeln 113
 — des symmetrischen Kreisels 112
 Drehimpulssymbole 100
 Drehimpulsquantenzahlen siehe die
 speziellen Drehimpulse
 —, spektroskopische Bestimmung 62

 Eigenschwingungen 106
 —, Amplitude 107
 —, Anzahl 106
 —, Bewegungsform 106, 107, 108
 —, einfache 106
 —, entartete 108

 Eigenschwingungen, Frequenz 106
 —, Kopplung von 108
 —, Normalkoordinaten 108, 110
 —, Orthonormierung 107
 —, Phase 106, 108
 —, Symmetrie 120
 Elektronenaffinität 81
 Elektronenbahndrehimpuls 38
 —, Eigenwerte 39
 —, *Kramers*-Entartung 39
 —, Quantenzahlen 39
 Elektronen, Bewegung der
 —, zweiatomiger Molekeln 4
 —, —, Eigenzustände 7, 8, 42
 —, —, Energie 7, 8
 —, —, Separation 3
 —, mehratomiger Molekeln 103
 Elektronendrehimpuls, gesamter 40
 —, Eigenwerte 40
 —, Quantenzahlen 40, 41
 Elektronenenergie zweiatomiger Mole-
 keln 4, 5, 7, 8
 — — —, *Schrödinger*-Gleichung 4
 Elektronenkonfiguration 100
 Elektronenschalen 6, 9, 10, 100
 Elektronenspin 38
 —, Eigenwerte 39
 —, Quantenzahlen 39
 Elektronenterme, abstoßende 10, 11
 —, bindende 7, 10
 —, mögliche 97
 Elektronenverteilung 9, 10, 84, 87
 Elektronenzustände mehratomiger Mo-
 lekeln 103
 — — —, Symmetriequantenzahlen 103
 — zweiatomiger Molekeln
 — — —, Eigenzustände 42
 — — —, Symmetrie 42
 Emissionskontinuum des H_2 90
 Entartung, *Kramers*sche 39, 40
 — infolge von Symmetrie 120
 — — von Eigenschwingungen 120
 — — von Elektronenzuständen 11, 42,
 47, 103
 Energie, gesamte, einer zweiatomigen
 Molekel
 — bei entkoppelten Teilbewegungen 47
 — bei gekoppelten Teilbewegungen 50

 Federkräfte, lineare 104
Fermi-Resonanz 138

- Fliehkraftdehnung der Hantel 15
 — des symmetrischen Kreisels 114
Fortrat-Parabel 58
Franck-Condon-Prinzip 64
 — in Bandenspektren 65
 — bei Prädissoziation 78
 Freiheitsgrade 104
 Frequenz der Dipolmomentsänderung 125
 — der Polarisierbarkeitsänderung 128
 — der Rotation 129, 132
 — der Schwingungen 25, 106
 Fundamentalschwingungsfrequenzen im Ramanspektrum 130
 — im Ultrarotspektrum 30, 119
- Gesamtzustände zweiatomiger Molekel**
 — mit Kernspins 139
 —, Parität 45, 47
 —, Symmetrie 46
 — bei entkoppelten Teilbewegungen 46
 — bei gekoppelten Teilbewegungen 49
 Gleichgewichtsabstand 3, 5, 8
 —, spektroskopische Bestimmung 18
 Grundschnwingungen siehe Fundamentalschwingungen
- Hamiltonfunktion**
 — für die Gesamtenergie 4
 — für die Kernbewegung 5
 — für die Rotationsbewegung 5
 — — der starren Hantel 13
 — — der unstarren Hantel 17
 — — eines Kreisels 105
 — — des symmetrischen Kreisels 51, 112
 — für die Schwingungsenergie 4
Hantel, starre 12
 —, —, Drehimpuls 13
 —, —, Eigenzustände 13
 —, —, -Operator 13
 —, —, Richtungsentartung 13
 —, —, Rotationsenergie 13
 —, —, Rotationskonstanten 17
 —, —, Rotationsquanten 13
 —, —, Rotationsterme 17
 —, —, Termschema 16
 —, —, Trägheitsmoment 13
Hantel, unstarre
 —, —, Dehnungskonstanten 17
 —, —, Fliehkraftdehnung 15
Hantel, unstarre, Operator 17
 —, —, Rotationsenergie 17
 —, —, Rotationskonstanten 17
 —, —, Rotationsterme 17
 —, —, Termschema 17
Hauptpolarisierbarkeiten 128
Heteropolare Bindung
 —, Absorptionsspektrum 83
 —, Beispiel: Alkalihalogenide 80
 —, —: Alkalihydride 84
 —, Potential 81
 —, Termkreuzung 81
Hochpolymere 1
Homöopolare Bindung 80
 —, Austauschkräfte 85
 — bei abgeschlossenen Elektronenschalen 96
 — von H₂ 86
 —, *Heitler-London*-Näherung 85
 —, *Hund-Mulliken*-Näherung 85
 —, korrespondenzmäßige Behandlung 90
 —, MO-Theorie 85
 — von schweren Atomen 92
 — von S-Zuständen 94
 —, zweite Näherung 94
Hundsche Kopplungsfälle 50
 — Entkopplung durch Rotation 54
 — —, Drehimpulsquantenzahlen 54
 — Fall a), starke Spinkopplung: siehe symmetrischer Kreisell
 — Fall b), schwache Spinkopplung 53
 — —, Drehimpulsquantenzahlen 54
 — —, Rotationsenergie 54
 — —, Vektorgerüstmodell 54
Hyperfeinstruktur 139
- Intensitäten in Bandenspektren**
 — bei Prädissoziation 77
 — der Rotationsstruktur 34, 36
 — der Schwingungsstruktur 69
Intensitätswechsel in einer Rotationsbande 146, 149
 — im Rotationsramanspektrum 137, 146, 148, 149
Interkombinationsverbot 57
Intervallregel in Multipletts 41
Ionenbindung 94

- Ionenmolekeln 80
 —, Absorptionsspektren 83
 —, Abstoßungspotential 81
 — der Alkalihalogenide 80
 —, Berührungsabstand 81
 —, *Coulomb*-Potential 81
 —, Termkreuzung 81
 —, Wechselwirkungspotential 81
 Ionenradius 81
 Ionisierungsarbeit 81
 Isotopieeffekt in Rotationssschwingungs-
 spektren 34
- Kernabstände, experimentelle Bestim-
 mung** 62
 — von Hydriden 62
 — des anharmonischen Oszillators 26
Kernabstandsvektor 5
Kernaustausch 140
Kernaustauschentartung 142
Kernbewegung, allgemeinste 110
 —, relative 105
 —, Rotation 7
 —, Schwingung 7
 —, Separation 4
 —, Translation 7
Kernmomente 139
Kernspin, gesamter 142
 —, spektroskopische Bestimmung 143
 — und Statistik 139
Kettenmolekeln 1
Knickschwingungen 121
Kombinationsschwingungsfrequenzen
 von CO₂ 138
 — im Ramanspektrum 130
 — im Ultrarotspektrum 30
**Konfigurationsraum der Eigenschwin-
 gungen** 108, 109
Konvergenz der Schwingungsterme 25
Koordinaten, reduzierte 111
 —, relative 6
Kopplung von Schwingungen 108
 — von Teildrehimpulsen 50
Kopplungstypen 46
Kovalente Bindung 80
Kraft, interatomare
 —, harmonische (lineare Näherung) 9,
 104
 —, mehratomiger Molekeln 104
 —, zweiatomiger Molekeln 6
- Kramers-Entartung des Bahndrehim-
 pulses** 39
 — — des Gesamtdrehimpulses 41
Kreisel 105
 —, asymmetrischer 105, 114, 115
 —, Kugelkreisel 105, 113, 115
 —, linear symmetrischer 105, 113, 115
 —, symmetrischer 50, 56, 105, 111, 114,
 115
Kugelkreisel, Rotationsramaneffekt 133
- Lebensdauer eines Elektronenterms** 64
 — eines Abstoßungsterms 79
 — gegen Prädissoziation 77
 — gegen Strahlung 75
**Linear-symmetrischer Kreisel, Rota-
 tionsramaneffekt** 133
Linienbreite bei Prädissoziation 75
- Magnetisches Moment der Elektronen-
 bewegung** 39, 40
Masse, reduzierte 7
Mehratomige Molekeln 103
 — —, Bandenspektrum 103
 — —, Elektronenzustände 103
 — —, Kernbewegung 104
 — —, Ramanspektren 127
 — —, Rotationsenergie 111
 — —, Schwingungsenergie 117
 — —, Struktur 103
 — —, Symmetrie 103, 104
 — —, Ultrarotspektren 118
Molekeln, hochmolekulare 1
 —, hochpolymere 1
 —, niedermolekulare 1
 —, polymere 1
Morsesche Formel 73, 90
Multiplet, Term-, 40
 —, Aufspaltung 40
 —, reguläres 41
 —, verkehrtes 41
Multiplizität 40
Multipol-Wechselwirkung 93
- Normalkoordinaten** 108, 109, 110
Nulllinien 33, 58, 148
Nullpunktsenergie 22, 118
Nutation des symmetrischen Kreisels 53
- Oberschwingungen mehratomiger Mo-
 lekeln** 119, 130

- Oberschwingungen des rotierenden Oszillators 30, 33
- Oberschwingungsfrequenzen von CO₂ 138
- im Ramanspektrum 130
- im Ultrarotspektrum 30, 119
- Orbitale 85
- bei H₂ 87
- Orthonormierung von Eigenschwingungen 107, 111
- Ortho-Wasserstoff 143, 145
- , spezifische Rotationswärme 145
- Ortho-Zustände 143, 145
- Oszillator, anharmonischer
- , —, Anharmonizitätsfaktor 25
- , —, Schwingungsenergie 25
- , —, Schwingungsterme 25
- Oszillator, harmonischer
- , —, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 23
- , —, Eigenwerte 22
- , —, Eigenzustände 23, 24
- , —, Nullpunktsenergie 22
- , —, Schrödinger-Gleichung 22
- , —, Schwingungsfrequenz 25
- , —, Schwingungskonstante 25
- , —, Schwingungsquanten 22
- , —, Schwingungsquantenzahl 22
- , —, Schwingungsterme 24
- , —, Termschema 23
- Oszillator, rotierender 27
- , —, Dehnungskonstanten 28
- , —, Rotationskonstanten 27
- , —, Rotationssschwingungsniveaus 28
- , —, Rotationssschwingungsspektrum 29
- , —, Rotationssschwingungsterme 29
- , —, Trägheitsmoment 27
- Para-Wasserstoff 143, 145
- , spezifische Rotationswärme 145
- Para-Zustände 143
- Parität von Eigenschwingungen 122, 125
- der Elektronenspinzustände 48
- der Elektronenzustände 45, 47, 48
- des Gesamtzustandes 45, 48
- der Kernspinzustände 48
- der Rotationszustände 48
- der Schwingungszustände 48
- Parität der Teilzustände 48
- Paritätsänderung bei elektrischer Dipolstrahlung 57, 147
- bei Raman-Streuung 136
- Paritätsauswahlregel 57, 136, 147
- Pauli-Prinzip 86, 91, 99, 101, 139
- Photodissoziation 70
- Polarisation von Dipolstrahlung 20
- einer Molekel 127
- Polarisationsbindung 80
- Polarisierbarkeit, elektrische 127
- , Ellipsoid 128
- , Entwicklung nach Normalkoordinaten 130
- , Frequenz 128
- , Modulation durch Kernbewegung 129
- , Tensor 128
- Polymerisationsgrad 1
- Polymere 1
- Potentialkurve 5, 6, 8
- im Elektronengrundzustand 8
- in angeregten Elektronenzuständen 8, 10, 63
- des H₂ 87, 90
- von Ionenmolekeln 81
- von *van der Waals*-Molekeln 95, 96
- Prädissoziation 75
- durch Rotation 78
- Prädissoziationsgrenze 77
- Punktsymmetrieelemente 103, 120, 121, 123
- Quadrupolmoment, elektrisches 94
- Raman-Aktivität der Rotation 132
- von Schwingungen 126, 132
- — bei Inversionssymmetrie 132
- Raman-Effekt 127
- , Auswahlregeln 135
- , klassische Behandlung 127, 132
- , quantentheoretische Behandlung 133
- der Rotation 132
- von Schwingungen 129
- Raman-Linien, Intensitäten 131, 135
- , — bei Atommolekeln 131
- , —, Beispiel: CO₂ 131
- , — bei Ionenmolekeln 131
- , — und Symmetrie 131

- Raman*-Spektrum 56
 —, Beispiel: CO_2 131, 136
 —, Intensitäten 129, 135
Rayleigh-Linie 129, 135
 Reduzierte Koordinaten 111
 — Masse 7
 Resonanzabsorption 119
 Rotations-Absorptionsspektrum
 — einer Hantel 17, 29
 — —, Drehimpulsauswahlregeln 18, 20
 — —, Beispiel HCl 19
 — —, Intensität 19
 — —, Polarisation 18, 20
 — eines schwingenden Rotators 29
 — mehratomiger Molekeln 114
 — —, Auswahlregel 115
 — —, Beispiele 116
 — — von symmetrischen Kreiseln 115
 Rotationseigenzustände, gesamte 139
 — der starren Hantel 7
 — des symmetrischen Kreisels 113
 Rotationsenergie siehe Rotationsterme
 Rotationskonstante der Hantel 17
 — des symmetrischen Kreisels 52
 — des schwingenden Rotators 27
 —, spektroskopische Bestimmung 30, 62
 Rotationsperiode 64
 Rotationsschwingungsbanden 56
 Rotationsschwingungsspektrum 29
 — zweiatomiger Molekeln
 — —, Auswahlregeln 29, 35
 — —, Bandenkonvergenz 31
 — —, Beispiel HCl 32
 — —, Intensität 34
 — —, Rotationskanten 31
 — —, Rotationsstruktur 31
 — —, reine Rotationsübergänge 29
 — —, Rotationszweige 31
 — —, reine Schwingungsübergänge 30
 — mehratomiger Molekeln 126
 Rotationsspektrum 56
 Rotationsstruktur
 — in Bandenspektren 57
 — bei gleichen Kernen
 — —, Absorptionsspektrum 147
 — —, Paritätserhaltung 147
 — —, Ramanspektrum 148
 — —, Symmetrienerhaltung 147
 — in Ramanspektren 136
 — von reinen Rotationsbanden 18
 Rotationsstruktur von Rotations-
 schwingungsbanden 31
 Rotationsterme (-energie)
 —, Entartung 15, 113, 114, 115
 — der starren Hantel 13
 — der unstarren Hantel 17
 — eines Kreisels 51
 — des asymmetrischen Kreisels 114
 — des Kugelkreisels 113
 — des symmetrischen Kreisels 51, 52, 112, 114
 — des unstarren Kreisels 114
 — linearer Molekeln 113
 — mehratomiger Molekeln 105
 — bei schwacher Spinkopplung 54
 Rotator, zweiatomiger
 —, schwingender 27
 —, starrer 12
 —, unstarrer 15
 Rotationszweige 31, 58, 136, 137, 147
 Schattierung von Rotationsbanden 60
Schrödinger-Gleichung
 — der starren Hantel 13
 — einer zweiatomigen Molekel 4
 — —, separierte 4, 5
 — des harmonischen Oszillators 22
 Schwerpunktort 6
 Schwingung 7, 106
 —, allgemeinste 106, 109
 —, *Hamilton*-Operator 110
 —, symmetrische 120
 —, totalsymmetrische 103, 122
 —, unsymmetrische 120
 Schwingungs-Absorptionsspektrum
 — mehratomiger Molekeln
 — —, Auswahlregel 118, 119
 — —, Einphonon-Übergänge 119
 — —, Mehrphononen-Übergänge 119
 — zweiatomiger Molekeln
 — — des anharmonischen Oszillators 30
 — — des harmonischen Oszillators 30
 — — des rotierenden Oszillators 30
 Schwingungsdauer 64
 Schwingungseigenzustände mehratomiger Molekeln 118
 — zweiatomiger Molekeln 7
 Schwingungsenergie siehe Schwingungs-
 terme

- Schwingungsfrequenzen
 — mehratomiger Molekeln 117
 — —, Beispiele 125
 — —, spektroskopische Bestimmung 126
 — zweiatomiger Molekeln 25, 30
 — —, Beispiele 62
 — —, spektroskopische Bestimmung 33, 62
- Schwingungspotential 7
- Schwingungsquantenzahlen 22, 118
- Schwingungsstruktur eines Bandensystems 64
- Schwingungsterme
 — des anharmonischen Oszillators 24
 — —, Konvergenz 25
 — des harmonischen Oszillators 24
 — mehratomiger Molekeln 117
 — —, Nullpunktenergie 118
 — —, Quantenzahlen 118
- Schwungradschwingung 122
- Separation von Kern- und Elektronenbewegung 3
- Spin-Bahn-Wechselwirkung der Elektronen 40, 50
 —, Multiplett-Aufspaltung 40
 — —, Kopplungskonstante 41, 50
 —, Wechselwirkungsenergie 40
- Statistisches Gewicht von Kernspinzuständen 143
- Stokes-Linie 129, 135
- Streuung von Photonen
 —, elastische 135
 —, unelastische 135
- Symmetrie
 — eines Atoms 37
 — der Gesamtzustände 46
 — — bei Vertauschung zweier Elektronen 88, 140
 — — bei Vertauschung zweier gleicher Kerne 140
 — einer mehratomigen Molekel 104
 — — der Elektronenzustände 103
 — — der Schwingungen 103, 120, 122
 — einer zweiatomigen Molekel 37
 — — der Elektroneneigenzustände 42, 43, 44
 — — von H_2 91
 — — bei gleichen Kernladungen 45
- Symmetrieentartung 120
- Symmetriecharakter 91
 — bei Vertauschung gleicher Teilchen 140
- Symmetriequantenzahlen einer Kristallzelle 103
 — mehratomiger Molekeln 103
 — zweiatomiger Molekeln 103
- Symmetriesymbole 91
- Symmetrischer Kreisel 50
 —, Bandenspektrum 56
 —, Eigenzustände 113
 —, \mathcal{H} -Operator 51, 112
 —, Vektorgerüstmodell 53, 112
 —, Drehimpulsquantenzahlen 50, 112
 —, Rotationskonstanten 52, 114
 —, Rotations-Raman-Effekt 133
 —, Rotationsterme 52, 112, 114
- Termkreuzung 61, 75
 — bei Ionenmolekeln 81, 83
 —, Vermeidung von 79, 88
- Termsymbole 40
- Trägheitsellipsoid 105
- Trägheitsmoment(e)
 — der Elektronen 51
 — der starren Hantel 13
 — —, spektroskopische Bestimmung 19
 — der unstarren Hantel 16
 — des rotierenden Oszillators 27
 — —, spektroskopische Bestimmung 33
 — eines Kreisels 105
 — des symmetrischen Kreisels 51, 112
- Trennarbeit 8
- Übergänge mit elektrischer Dipolstrahlung 18, 29, 56, 144
 —, strahlungslose 75
 — im Streuspektrum 134
 — infolge symmetrischer Wechselwirkungen 143
- Ultrarot-Aktivität der Rotation 19
 — von Schwingungen 29, 125
- Valenzschwingungen 121
- van der Waals-Bindung 80, 92
 —, Beispiele 96
 — bei abgeschlossenen Elektronenschalen 96
- van der Waals-Molekeln 80
- Vektorgerüstmodell des Bahndrehimpulses 38

- Vektorgerüstmodell des gesamten Elektronendrehimpulses 40
- des Elektronenspins 39
 - bei Entkopplung 54
 - der *Hundschen* Kopplungsfälle 51, 53
 - des symmetrischen Kreisels 51, 112
- Wasserstoff H_2
- , Emissionskontinuum 90
 - , Gesamspin 91
 - , *Heitler-London-Theorie* 86
 - , —, Abstoßungszustand 86
 - , —, Bindungszustand 86
 - , —, Elektronenverteilung 86
 - , —, Grundzustand 86
 - , —, Spin 86, 91
 - , MO-Näherung 87
 - , —, Elektronenkonfiguration 88
- Wasserstoff H_2 , Ortho- H_2 143, 145
- , Ortho-Para-Umwandlung 146
 - , Para- H_2 143, 145
 - , Potentialkurve 92
 - , Rotationstermschema 146
 - , spezifische Rotationswärme 145
 - , Spinzustände 91
 - , Symmetrie der Eigenzustände 91
- Wasserstoff D_2
- , Ortho- D_2 146
 - , Para- D_2 146
 - , Rotationstermschema 146
- Wasserstoff-Ion H_2^+ 92
- Zwei-Zentren-Problem 4, 37
- Zwei-Zentren-Feld 37, 97
- Zwischenniveau, virtuelles 134, 135

Konstanten der Atomphysik

Nach: Empfehlungen der CODATA-Kommission (1986)

Induktionskonstante	μ_0	$= 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ VsA}^{-1} \text{ m}^{-1} =$ $1,256637 \cdot 10^{-6} \text{ VsA}^{-1} \text{ m}^{-1}$
Influenzkonstante	ϵ_0	$= 1/\mu_0 c^2 \equiv$ $8,85418 \cdot 10^{-12} \text{ AsV}^{-1} \text{ m}^{-1}$
Lichtgeschwindigkeit	c	$= 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$
Loschmidt-Konstante	N_L	$= 6,02217 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Atomare Masseneinheit	m_0	$= 1,66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Boltzmann-Konstante	k	$= 1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$
Faraday-Konstante	F	$= 9,64853 \cdot 10^4 \text{ Cmol}^{-1}$
Elementarladung	e	$= 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Spezifische Elektronenladung	e/m_{e0}	$= 1,758819 \cdot 10^{11} \text{ Ckg}^{-1}$
Elektronenmasse	m_{e0}	$= 9,109389 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Protonenmasse	m_{p0}	$= 1,67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Wirkungsquantum	h	$= 6,626075 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
	\hbar	$= h/2\pi = 1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Rydberg-Konstante	\bar{R}_∞	$= 1,0973731 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$
Bohrscher Radius	a_H	$= 5,29177 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Bohrsches Magneton	μ_B	$= 1,16541 \cdot 10^{-29} \text{ Vsm}$
	μ_B^+	$= \mu_B/\mu_0 \equiv 9,27401 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$
Kernmagneton	μ_K	$= 6,34701 \cdot 10^{-33} \text{ Vsm}$
	μ_K^+	$= \mu_K/\mu_0 \equiv 5,05079 \cdot 10^{-27} \text{ Am}^2$
Compton-Wellenlänge	λ	$= 2,42631 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
Feinstruktur-Konstante	α	$= 7,29735 \cdot 10^{-3}$

Energie-Umrechnungstabelle*

	J	V	$s^{-1} = \text{Hz}$	cm^{-1}	K	kcal _{th}	kcal _{th} /kmol	$T \triangleq 10^4 \text{ G}$
1 J \triangleq	1	$6,24151 \cdot 10^{18}$	$1,50919 \cdot 10^{23}$	$5,03411 \cdot 10^{22}$	$7,24292 \cdot 10^{22}$	$2,39006 \cdot 10^{-4}$	$1,43933 \cdot 10^{23}$	$1,07828 \cdot 10^{23}$
1 V \triangleq	$1,60218 \cdot 10^{-19}$	1	$2,41799 \cdot 10^{14}$	$8,06554 \cdot 10^3$	$1,16045 \cdot 10^4$	$3,82931 \cdot 10^{-23}$	$2,30606 \cdot 10^4$	$1,72760 \cdot 10^4$
1 $s^{-1} = 1 \text{ Hz} \triangleq$	$6,62607 \cdot 10^{-34}$	$4,13567 \cdot 10^{-15}$	1	$3,33564 \cdot 10^{-11}$	$4,79922 \cdot 10^{-11}$	$1,58367 \cdot 10^{-27}$	$9,53708 \cdot 10^{-11}$	$7,14477 \cdot 10^{-11}$
1 $\text{cm}^{-1} \triangleq$	$1,98645 \cdot 10^{-23}$	$1,23984 \cdot 10^{-4}$	$2,99792 \cdot 10^{10}$	1	1,43877	$4,74763 \cdot 10^{-27}$	2,85910	2,14195
1 K \triangleq	$1,38066 \cdot 10^{-23}$	$8,61739 \cdot 10^{-5}$	$2,08367 \cdot 10^{10}$	$6,95039 \cdot 10^{-1}$	1	$3,29986 \cdot 10^{-27}$	1,98722	1,48874
1 kcal _{th} \triangleq	$4,18400 \cdot 10^3$	$2,61144 \cdot 10^{22}$	$6,31445 \cdot 10^{26}$	$2,10631 \cdot 10^{26}$	$3,03043 \cdot 10^{26}$	1	$6,02214 \cdot 10^{26}$	$4,51151 \cdot 10^{26}$
1 $\frac{\text{kcal}_{\text{th}}}{\text{kmol}}$ \triangleq	$6,94768 \cdot 10^{-24}$	$4,33640 \cdot 10^{-5}$	$1,04854 \cdot 10^{10}$	$3,49760 \cdot 10^{-1}$	$5,03216 \cdot 10^{-1}$	$1,66054 \cdot 10^{-27}$	1	$7,49153 \cdot 10^{-1}$
1 T $\triangleq 10^4 \text{ G} \triangleq$	$9,27402 \cdot 10^{-24}$	$5,78839 \cdot 10^{-5}$	$139963 \cdot 10^{10}$	$4,66864 \cdot 10^{-1}$	$6,71710 \cdot 10^{-1}$	$2,21655 \cdot 10^{-27}$	1,33484	1

* Abgerundete Zahlenwerte

Liste der häufiger verwendeten Symbole

<p>A Spin-Bahn-Kopplungskonstante</p> <p>B, B_e, B_0, B_v Rotationskonstanten</p> <p>C <i>Coulomb</i>-Integral</p> <p>C Rotationskonstante</p> <p>D_e, D_v, D_0 Dissoziationsarbeit</p> <p>D_e, D_J, D_{Jk}, D_k Dehnungskonstanten</p> <p>E_B Elektronenaffinität</p> <p>F Kraft</p> <p>$F(J)$ Rotationsterme</p> <p>g gerade Parität des Elektronenzustandes</p> <p>$G(v)$ Schwingungsterme</p> <p>$\hbar = \hbar/2\pi$ Plancksche Konstante</p> <p>\mathcal{H} <i>Hamilton</i>-Operator</p> <p>I Austausch-Integral</p> <p>I_A Ionisationsarbeit (eines Atoms)</p> <p>\mathbf{J} Gesamtdrehimpuls</p> <p>J, M, M_J Quantenzahlen zu \mathbf{J}</p> <p>$\mathbf{K} = \mathbf{L} + \mathbf{N}$ Drehimpuls</p> <p>K Quantenzahl zu \mathbf{K}</p> <p>k Federkraftkonstante</p> <p>k Drehimpulsquantenzahl</p> <p>L Bahn(drehimpuls)quantenzahl eines Atoms</p> <p>m_K Masse von Atomkernen</p> <p>M_L magnetische Bahndrehimpulsquantenzahl eines Atoms</p> <p>m_A, m_B Masse von Atomkernen</p> <p>m_e Elektronenmasse</p> <p>m reduzierte Masse</p> <p>M, M_J magnetische Gesamtdrehimpulsquantenzahl</p> <p>M_S magnetische Spinquantenzahl eines Atoms</p> <p>N Drehimpuls der Kernrotation</p> <p>N Elektronenzahl</p>	<p>N Atomzahl</p> <p>$n = 3N - 6(5)$ Anzahl der Eigenschwingungen</p> <p>$P(r) = W^{\text{el}}(r)$ Schwingungspotential</p> <p>\mathbf{P} Elektrisches Dipolmoment</p> <p>$\mathbf{p}_A, \mathbf{p}_B$ Impuls von Atomkernen</p> <p>\mathbf{p}_i Impuls von Elektronen</p> <p>Q_A Quadrupolmoment</p> <p>$q^{(s)}$ Normalkoordinate</p> <p>\mathbf{r}_S Schwerpunktsort</p> <p>$\mathbf{r}_{mn} = \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m$ Teilchenabstand</p> <p>$\mathbf{r}_{AB} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$ Kernabstand</p> <p>$r_{mn} = \mathbf{r}_{mn}$</p> <p>r_e Gleichgewichtsabstand</p> <p>$\langle r(v) \rangle$ mittlerer Kernabstand</p> <p>$\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$ Ortsvektoren von Atomkernen</p> <p>\mathbf{r}_i Ortsvektoren von Elektronen</p> <p>S Spinquantenzahl eines Atoms</p> <p>T Kinetische Energie</p> <p>T Gesamter Kernspindrehimpuls</p> <p>T Schwingungsdauer</p> <p>$T(v, J)$ Rotations-Schwingungs-Terme</p> <p>U Potentielle Energie</p> <p>u ungerade Parität des Elektronenzustandes</p> <p>v Schwingungsquantenzahl</p> <p>W Energie</p> <p>$W^{\text{el}}(r)$ Elektronenenergie</p> <p>W_{kin} kinetische Energie</p> <p>W_{pot} potentielle Energie</p> <p>W^S Elektronenspinenergie</p> <p>W^{trans} Translationsenergie</p> <p>W^T Kernspinenergie</p> <p>W^{rot} Rotationsenergie</p> <p>W^{vibr} Schwingungsenergie</p> <p>x_e Anharmonizitätskonstante</p>
--	---

Fortsetzung auf 3. Umschlagseite!
