

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Beschreibung der Strahlung	1
1.2. Allgemeine Gesetze der Wechselwirkung von Strahlung mit Molekülen	3
1.3. Eine Gesamtheit von Molekülen im Strahlungsfeld	4
1.4. Unterteilung des Gebietes der Molekül- spektroskopie	6
2. Magnetische Kernresonanz	7
2.1. Eigenschaften von Kernen	7
2.2. Kerne im Magnetfeld	10
2.3. Experimentelle Anordnungen zur Beobachtung der Kernresonanz	12
2.4. Das Magnetfeld am Ort der Kerne	14
2.5. Durch Bindungselektronen vermittelte Wechselwirkung zwischen Kernspins	16
2.6. Abhängigkeit der Kernresonanzspektren von der Bewegung der Moleküle	16
2.7. Quadrupoleffekte	18
2.8. Kernresonanzspektren in flüssiger Lösung	20
3. Elektronenspinresonanz	31
3.1. Freies Elektron im Magnetfeld	31
3.2. Experimentelles	32
3.3. Das Elektronenspinresonanz-Spektrum von atomarem Wasserstoff	35
3.4. Aromatische Radikationen	37
3.5. Alkyl-Radikale	45
4. Uebergänge zwischen Rotationszuständen	46
4.1. Das Rotationsspektrum von linearen Molekülen	46
4.2. Experimentelles	50
4.3. Rotationsspektren nicht linearer Moleküle	53
4.4. Auswertung von Rotationsspektren	55
5. Uebergänge zwischen Vibrationszuständen	57
5.1. Das Vibrationsspektrum eines zweiatomigen Moleküls	57
5.2. Experimentelles zur IR-Spektroskopie	59

5.3. Das Rotations-Schwingungsspektrum von zweiatomigen Molekülen	62
5.4. Infrarotspektren mehratomiger Moleküle	64
5.4.1. Normalschwingungen und Normalkoordinaten	64
5.4.2. Gruppenschwingungen	69
5.4.3. IR-Spektren in kondensierter Phase	73
5.5. Anwendungen in der IR-Spektroskopie	75
5.6. Raman-Spektren	76
6. Uebergänge zwischen Elektronenzuständen	79
6.1. Das Spektrum eines Elektrons im eindimensionalen Potentialkasten	79
6.2. Das Spektrum eines zweiatomigen Moleküls im Gaszustand	81
6.2.1. Das elektronische Uebergangsmoment	82
6.2.2. Der Franck-Condon-Faktor	84
6.2.3. Die Rotations-Auswahlregeln	86
6.3. Spektren von mehratomigen Molekülen in Lösung	86
6.4. Charakterisierung von Absorptionsbanden in Lösung	90
6.5. Beobachtungsmaterial und seine Deutung im Hückelmodell	92
6.6. Desaktivierung von Molekülen in Lösung	103
6.7. Induzierte Emission, Laser	108
7. Photoelektronen-Spektroskopie	110
7.1. Prinzip	110
7.2. Experimentelles	111
7.3. Photoelektronenspektren	113
7.4. Deutung von Photoelektronenspektren im MO-Modell	116
8. Röntgenfluoreszenz-Spektroskopie	119
8.1. Prinzip	119
8.2. Experimentelles	120
8.3. Anwendung der Röntgenfluoreszenz- Spektroskopie	122
Anhang I Zur quantenmechanischen Behandlung der Wechselwirkung von Strahlung mit Molekülen	125
Anhang II Berechnung von Uebergangsmomenten für zweiatomige Moleküle	129
Sachverzeichnis	135