

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	5
Vorwort zur englischen Ausgabe	6
1. Einleitung	11
1.1 Allgemeine Bemerkungen zur Molekülsymmetrie	11
1.2 Elektromagnetisches Spektrum und Born-Oppenheimer-Näherung	16
1.3 Normalschwingungen und Normalkoordinaten	19
2. Symmetrieelemente und Symmetrieoperationen	23
2.1 Drehachsen (C_n)	23
2.2 Spiegelebenen (σ)	24
2.3 Inversionszentrum (i)	26
2.4 Drehspiegelachsen (S_n)	27
2.5 Die Identität (I)	29
2.6 Korrelation der Schoenflies- und Hermann-Mauguin-Symbole für Symmetrieelemente	29
2.7 Multiplikation von Symmetrieoperationen und Symmetrieelementen	30
3. Punktgruppen	34
3.1 Punktgruppen C_n	35
3.2 Punktgruppen S_n	36
3.3 Punktgruppen C_{nv}	36
3.4 Punktgruppen D_n	39
3.5 Punktgruppen C_{nh}	40
3.6 Punktgruppen D_{nd}	42
3.7 Punktgruppen D_{nh}	44
3.8 Die Punktgruppen T_d und T	47
3.9 Die Punktgruppen O_h und O	48
3.10 Die Punktgruppe K_h	49
3.11 Methoden zur Bestimmung der Punktgruppen von Molekülen	50
3.12 Korrelation der Punktgruppensymbole nach Schoenflies und nach Hermann-Mauguin	52
3.13 Eigenschaften von Gruppen und Definitionen in der Gruppentheorie	53
3.13.1 Eigenschaften einer Gruppe	53
3.13.2 Abelsche und nicht-abelsche Gruppen	54
3.13.3 Ordnung einer Gruppe	54

3.13.4 Erzeugende Elemente einer Gruppe	55
3.13.5 Klassen von Elementen	56
3.13.6 Vergleich zwischen einer Punktgruppe und einer numerischen Gruppe	57
4. Charaktertafeln der Punktgruppen	59
4.1 Nicht-entartete Punktgruppen	59
4.2 Entartete Punktgruppen	84
4.3 Multiplikation von Symmetriespezies.	96
4.3.1 Multiplikation von zwei nicht-entarteten Symmetriespezies	96
4.3.2 Multiplikation einer nicht-entarteten mit einer entarteten Symmetriespezies	98
4.3.3 Multiplikation zweier entarteter Symmetriespezies.	99
4.4 Symmetriespezies von Rotationen und Translationen	106
5. Einfache Anwendungen der Molekülsymmetrie	110
5.1 Kernresonanzspektroskopie (NMR)	110
5.2 Dipolmoment	116
5.3 Optische Aktivität	118
5.4 Einfluß isotoper Substitution auf die Molekülsymmetrie	120
6. Einführung in die Molekülorbital-Methoden	121
6.1 Die LCAO-Methode	121
6.2 Hückel-Molekülorbitale	132
6.3 Molekülorbitaldiagramme nach Walsh	140
6.4 Rydberg-Orbitale	145
6.5 Kristallfeld- und Ligandenfeldtheorie	150
6.5.1 Kristallfeldtheorie	151
6.5.2 Ligandenfeldtheorie	155
6.6 Symmetrie von Elektronenzuständen	158
7. Weitere Anwendungen der Molekülsymmetrie	167
7.1 Woodward-Hoffmann-Regeln	167
7.2 Molekulare Auswahlregeln, die vom elektrischen Dipolmoment bestimmt werden	173
7.2.1 Elektronenübergänge zwischen nicht-entarteten Zuständen der gleichen Multiplizität	175
7.2.2 Elektronenübergänge zwischen Zuständen gleicher Multiplizität, von denen mindestens einer entartet ist	177
7.2.3 Elektronenübergänge zwischen Zuständen verschiedener Multiplizität	179
7.2.4 Übergänge zwischen Zuständen verschiedener Elektronen-anregungs- und Schwingungsenergie	185

7.2.5 Übergänge zwischen Schwingungszuständen	186
7.3 Atomare Auswahlregeln, die vom elektrischen Dipolmoment bestimmt werden	187
7.4 Auswahlregeln, die vom magnetischen Dipolmoment bestimmt werden	190
7.5 Auswahlregeln für den Schwingungs-Raman-Effekt	191
7.5.1 Nicht-entartete Punktgruppen	194
7.5.2 Entartete Punktgruppen	196
7.6 Zahl der Normalschwingungen in den einzelnen Symmetrieklassen	199
7.6.1 Nicht-entartete Schwingungen	201
7.6.2 Entartete Schwingungen	203
7.7 Kurven mit mehr als einem Minimum für die potentielle Energie	212
7.7.1 Inversionsschwingungen	212
7.7.2 Wasserstoff-Brückenbindungen	219
7.7.3 Energiekurven für Torsionsschwingungen	221
7.8 Grenzen für die Anwendung von Symmetriebetrachtungen	226
7.9 Lösungen zu den Übungsaufgaben	228
Sachregister	229