

Inhalt

<i>Zweck und Ziel der Sammlung</i>	V
<i>Geleitwort zur deutschen Ausgabe</i>	VI
<i>Aus dem Vorwort der Originalausgabe</i>	VII
I. Einleitung	1
1. Methoden zur Beobachtung der Spektren freier Radikale	3
2. Das Identifizierungsproblem: CH ₂ als Beispiel	9
II. Zweiatomige Radikale und Ionen	14
A. Energieniveaus und Eigenfunktionen	14
1. Rotation	15
2. Schwingung	17
3. Elektronenzustände und Elektroneneigenfunktionen	21
4. Kopplung von Rotation und Elektronenbewegung	33
B. Übergänge, Beispiele	42
1. Auswahlregeln	42
2. Rotationsspektren und damit verwandte Spektren	45
3. Rotationsschwingungsspektren	50
4. Elektronenübergänge	55
Schwingungsstruktur – Rotationsstruktur	55
III. Lineare mehratomige Radikale und Ionen	76
A. Schwingungen und Schwingungsniveaus	76
B. Rotationsniveaus, Wechselwirkung von Rotation und Schwingung . .	79
1. Nicht-entartete Schwingungsniveaus	79
2. Entartete Schwingungsniveaus	80
C. Wechselwirkung von Schwingung und Elektronenbewegung (vibronische Wechselwirkung)	81
1. Nicht-entartete Elektronenzustände	81
2. Entartete Elektronenzustände: Singuletts	82
3. Entartete Elektronenzustände: Dubletts	88

D. Übergänge, Beispiele	88
1. Rotations- und Rotationsschwingungsspektren	88
2. Elektronenübergänge: Auswahlregeln	89
3. Schwingungsstruktur von Elektronenübergängen	90
4. Rotationsstruktur von Elektronenübergängen	97
Singulettbanden – Dublettbanden – Tripletbanden	97
E. Elektronenkonfigurationen	101
Dihydride – Monohydride – Nicht-Hydride	101
 IV. Nicht-lineare mehratomige Radikale und Ionen	107
A. Elektronenzustände	107
1. Klassifizierung	107
2. Elektronenkonfigurationen	111
Angenäherte Reihenfolge der Orbitalenergien – Molekülwellenfunktionen und PAULI-Prinzip – Termmannigfaltigkeit, Stabilität und geometrische Struktur	111
B. Schwingungsniveaus: Vibronische Wechselwirkung	121
1. Nicht-entartete Elektronenzustände	121
2. Entartete Elektronenzustände	124
Vibronische Rassen – JAHN-TELLER-Theorem – Vibronische Energieniveaus	124
C. Rotationsniveaus: Ro-vibronische Wechselwirkungen	127
1. Symmetrische Kreiselmoleküle	128
Nicht-entartete Schwingungsniveaus in nicht-entarteten Singulett-Elektronenzuständen – Entartete Schwingungsniveaus in nicht-entarteten Singulett-Elektronenzuständen – Entartete Elektronenzustände – Multiplett-Elektronenzustände – Symmetrieeigenschaften von Rotationsniveaus – l -Verdoppelung	128
2. Asymmetrische Kreiselmoleküle	134
Allgemeine Rotationsenergie-Formeln – Symmetrieeigenschaften von Rotationsniveaus – Spinaufspaltung	134
3. Quasi-lineare Moleküle	138
D. Übergänge, Beispiele	141
1. Rotations- und Rotationsschwingungsspektren	141
2. Elektronenübergänge	142
Erlaubte Elektronenübergänge – Verbotene Elektronenübergänge .	142
3. Schwingungsstruktur von Elektronenübergängen	144
Übergänge zwischen nicht-entarteten Elektronenzuständen – Übergänge zwischen Elektronenzuständen, von denen mindestens einer entartet ist – Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedener Symmetrie der Gleichgewichtskonformation – Verbotene Übergänge – Isotopieeffekt	144

4. Rotationsstruktur von Elektronenübergängen	147
Symmetrische Kreiselmoleküle – Asymmetrische Kreiselmoleküle –	
Übergänge linear-gewinkelt	147
V. Dissoziation, Prädissoziation und Rekombination	159
A. Kontinuierliche Spektren	159
B. Diffuse Spektren: Prädissoziation und Präionisation	160
1. Auger-Prozesse	160
2. Prädissoziation	163
3. Prädissoziationstypen	165
4. Auswahlregeln für die Prädissoziation	166
5. Metastabile Ionen	169
6. Bestimmung von Dissoziationsenergien	170
7. Präionisation	171
C. Rekombination	172
<i>Literatur</i>	174
<i>Sachverzeichnis</i>	178