

## Inhaltsverzeichnis

<i>Zweck und Ziel der Sammlung</i>	v
<i>Motto</i>	vi
<i>Vorwort</i>	vi
<i>Danksagungen</i>	viii
<i>Vereinbarungen</i>	xvii
<i>Abkürzungsverzeichnis</i>	xviii
<b>0. Einleitung</b>	<b>1</b>

### 1. Teil: Kraftkonstantenberechnung aus experimentellen Daten nach klassischen und quantentheoretischen Methoden

#### 1. Abschnitt: Experimentelle Grundlagen der Schwingungsspektroskopie

<b>1. Molekülschwingungen</b>	<b>5</b>
1.1. Energien und Frequenzen der Elektronenanregungen, der Molekülschwingungen und der Rotationen	5
1.2. Zur Theorie der Messung der Molekülschwingungen	6
1.2.1. Ultrarotspektren	7
1.2.2. Aus der Raman-Spektroskopie	7
1.3. Zur Bestimmung infrarot- und Raman-inaktiver Schwingungen	9
1.4. Zuordnung der Schwingungsfrequenzen zu den Schwingungsformen	9
1.5. Zur Berechnung der harmonischen Schwingung aus der beobachteten Schwingung bei bekannter Oberschwingung	11
1.6. Zur Bestimmung der Gleichgewichtsabstände und der Valenzwinkel	12
1.6.1. Berechnung der Gleichgewichtsabstände 2-atomiger Moleküle aus den Rotationsspektren	13
1.6.2. Bestimmung der geometrischen Daten verschiedener mehratomiger Moleküle aus Rotationsspektren	14
1.6.3. Hinweis auf die Methoden der Röntgen-, Neutronen- und Elektronenbeugung	15

#### 2. Abschnitt: Zur Kraftkonstantenberechnung aus Schwingungsfrequenzen nach der klassischen Mechanik von Punktsystemen

##### 1. Unterabschnitt: Alleinige Verwendung der Schwingungsfrequenzen des Moleküls

2. Kraftkonstantenberechnung eines 2-Massensystems aus der Schwingungsfrequenz	16
2.1. Zur Aufstellung der Schwingungsgleichung – Definition und Berechnung der Kraftkonstanten	17
2.2. Beispiel: O <sub>2</sub>	20

2.3. Zur praktischen Berechnung der Eigenwerte aus Schwingungswellenzahlen . . . . .	20
2.4. Vergleich der Kraftkonstanten 2-atomiger Moleküle . . . . .	21
2.5. Korrektur der Kraftkonstanten bei bekannter Anharmonizität . . . . .	22
2.6. Zur Abschätzung der Kraftkonstanten größerer Moleküle nach dem 2-Massenmodell . . . . .	22
<b>3. Potentialfunktionen, Kraftfelder, Energiematrizen und Molekülmmodelle mehratomiger Moleküle . . . . .</b>	<b>23</b>
3.1. Allgemeines klassisches Molekülmodell . . . . .	24
3.1.1. Abriß der Theorie der kleinen Schwingungen – Potentialfunktion, Kraftkonstantenmatrix und Säkulargleichung . . . . .	24
3.1.1.1. Das Koordinatensystem . . . . .	24
3.1.1.2. Potentielle Energie – Konstanten der potentiellen Energie – Molekülkraftkonstanten . . . . .	24
3.1.1.3. Kinetische Energie – Konstanten der kinetischen Energie – $G^{-1}$ als Matrix der kinetischen Energie und deren Eigenschaften . . . . .	27
3.1.1.4. Zur Aufstellung der allgemeinen Schwingungsgleichung . . . . .	28
3.1.1.5. Die Säkulargleichung als Lösungsbedingung der Schwingungsgleichung . . . . .	29
3.1.1.6. Die allgemeine Lösung der Schwingungsgleichung . . . . .	33
3.1.2. Anmerkungen zu kubischen und biquadratischen Kraftkonstanten . . . . .	34
3.2. Spezielle Kraftfelder von Molekülen . . . . .	37
3.2.1. Allgemeines Valenzkraftfeld . . . . .	37
3.2.2. Urey-Bradley-Kraftfeld . . . . .	40
3.2.3. Valenzkraftfelder unter Einbeziehung quantentheoretischer Ergebnisse . . . . .	41
3.2.3.1. Orbital-Valenzkraftfeld . . . . .	41
3.2.3.2. Hybrid-Bindungskraftfeld . . . . .	41
3.2.4. Zentralkraftfelder . . . . .	41
3.3. Zur Berechnung von $G$ als der inversen Matrix der kinetischen Energie für das allgemeine Valenzkraftfeld nach der Matrixmethode von Wilson . . . . .	42
3.3.1. Herleitung . . . . .	42
3.3.2. Berechnung der $G$ -Matrix eines symmetrischen 3-atomigen Moleküls als Beispiel . . . . .	43
3.3.3. Zur Verwendung von kartesischen Koordinaten . . . . .	44
3.3.4. Formelsammlung zur Aufstellung der Matrix $G$ für nichtzyklische Moleküle nach Decius . . . . .	45
3.3.4.1. Beispiel: 3-atomiges Molekül XYZ ( $C_s$ ) . . . . .	47
3.3.5. Zur Berechnung der $G$ -Matrizen vielatomiger Moleküle mit Programmrechnern . . . . .	48
3.4. Unabhängige und überzählige innere Koordinaten . . . . .	48
3.4.1. Anzahl der geometrischen Elemente und inneren Koordinaten . . . . .	48
3.4.2. Redundanzbedingungen als Korrelationen der geometrischen Elemente . . . . .	50
3.4.2.1. Redundanzbedingungen planarer Molekülsysteme . . . . .	50
3.4.2.2. Anzahl der Redundanzbedingungen räumlicher, nichtzyklischer Molekülsysteme . . . . .	52
3.4.3. Anzahl der unabhängigen inneren Koordinaten für die Valenz-, Deformations-, Azimutal- und Torsionsschwingungen . . . . .	52
3.4.4. Beispiel: Molekültyp XY <sub>3</sub> (D <sub>3h</sub> ) . . . . .	53
3.4.5. Zur Vermeidung des Redundanzproblems . . . . .	54
<b>4. Aussagen und Vereinfachungen bei symmetrischen Molekülen . . . . .</b>	<b>54</b>
4.1. Gruppentheoretische Grundbegriffe . . . . .	54
4.2. Darstellung einer Gruppe, Charakter einer Darstellung und Sätze über Charaktere . . . . .	55

<b>4.3. Symmetrioperationen und -elemente – Symmetrie- oder Punktgruppen . . . . .</b>	<b>56</b>
4.3.1. Symmetrioperationen und Symmetrieelemente . . . . .	56
4.3.2. Symmetrie- oder Punktgruppen . . . . .	57
4.3.3. Zur Klassifikation der Moleküle nach Symmetriegruppen nach <i>Zeldin</i> . . . . .	57
<b>4.4. Reduzible und irreduzible Charaktere . . . . .</b>	<b>57</b>
4.4.1. Reduzible Charaktere . . . . .	59
4.4.2. Irreduzible Charaktere – Schwingungstypen . . . . .	61
<b>4.5. Zahl der Schwingungen eines Punktsystems . . . . .</b>	<b>63</b>
<b>4.6. Auswahlregeln für Ultrarot- und Raman-Spektren . . . . .</b>	<b>66</b>
4.6.1. Auswahlregeln für Ultrarotspektren . . . . .	66
4.6.2. Auswahlregeln für Raman-Spektren . . . . .	67
<b>4.7. Zur Aufstellung der Symmetriekoordinaten . . . . .</b>	<b>69</b>
4.7.1. Formel zur Berechnung von Symmetriekoordinaten bei Nichtentartung . . . . .	70
4.7.2. Zur Aufstellung von Symmetriekoordinaten bei Entartung . . . . .	72
<b>4.8. Faktorisierung der Säkulargleichung – Energiematrizen <math>G</math> und <math>F</math> für Symmetriekoordinaten . . . . .</b>	<b>73</b>
4.8.1. Herleitung . . . . .	73
4.8.2. Zur Aufstellung der Formelsätze für die Kraftkonstantenberechnung eines 3-atomigen Moleküls der Symmetriegruppe $C_{2v}$ . . . . .	74
<b>4.9. Zur Berechnung einzelner Elemente der Symmetrienergiematrizen <math>F</math> und <math>G</math> . . . . .</b>	<b>76</b>
4.9.1. Vereinfachte Aufstellung der Elemente der Symmetrienergie- matrizen für vollsymmetrische Schwingungstypen . . . . .	76
4.9.2. Weitere Regeln zur Aufstellung der Elemente von Symmetrienergiematrizen . . . . .	79
4.9.3. Symmetriekraftkonstanten als erweiterte Valenz- und Deformationskraftkonstanten . . . . .	79
<b>5. Molekülkraftkonstantenberechnung als inverses algebraisches Eigenwertproblem . . . . .</b>	<b>81</b>
<b>5.1. Die Berechnung der Kraftkonstantenmatrix <math>F</math> als eine Umkehrung des allgemeinen algebraischen Eigenwertproblems . . . . .</b>	<b>81</b>
<b>5.2. Eigenschaften der Kraftkonstantenmatrix <math>F</math> . . . . .</b>	<b>82</b>
<b>5.3. Fallunterscheidungen des allgemeinen inversen Eigenwertproblems . . . . .</b>	<b>85</b>
<b>6. Berechnung von <math>n</math> Kraftkonstanten aus der Säkulargleichung bei <math>n</math> gemessenen Frequenzen . . . . .</b>	<b>89</b>
<b>6.1. Zahl der Lösungen der Diagonalmatrix <math>F_{\text{diag}}</math> . . . . .</b>	<b>89</b>
<b>6.2. Analytische Berechnung von <math>F_{\text{diag}}</math> für <math>n = 2</math> . . . . .</b>	<b>90</b>
<b>6.3. Iterative Berechnung von <math>F_{\text{diag}}</math> für <math>n = 3</math> . . . . .</b>	<b>91</b>
6.3.1. Berechnung von $F_{\text{diag}}$ für $n = 3$ aus einer Gleichung 6. Grades – Variante von <i>Ruth</i> und <i>Philippe</i> . . . . .	91
6.3.2. Graphische Bestimmung von $F_{\text{diag}}$ für $n = 3$ nach <i>Heinrich</i> – Variante von <i>Mai</i> . . . . .	93
<b>6.4. Iterationsverfahren zur Berechnung von <math>F_{\text{diag}}</math> für <math>n \geq 4</math> . . . . .</b>	<b>94</b>
6.4.1. Verfahren von <i>Downing</i> und <i>Householder</i> . . . . .	95
6.4.2. Verfahren von <i>Uhlig</i> . . . . .	96
6.4.3. Verfahren von <i>E. Schmid</i> . . . . .	97
6.4.4. Verfahren von <i>Mann, Shimanouchi, Meal</i> und <i>Fano</i> . . . . .	98
6.4.5. Einfache Kopplungsstufenverfahren . . . . .	99
6.4.6. Verfahren von <i>Mai</i> . . . . .	100

7. Berechnung von $n(n+1)/2$ durch Extremalvorschriften festgelegten Kraftkonstanten . . . . .	102
7.1. Berechnung von $n(n+1)/2$ zu einer Ausgangslösung nächstgelegenen Kraftkonstanten . . . . .	102
7.1.1. Vorschlag von <i>Taylor</i> . . . . .	103
7.1.2. Verfahren von <i>Torkington</i> . . . . .	103
7.1.3. Einfaches Probier- oder Abtastverfahren . . . . .	103
7.1.4. Verfahren der nächsten Lösung – Entkopplungslösung als Ausgangs- oder Näherungslösung . . . . .	104
7.1.5. Newtonsches Iterationsverfahren – Kopplungsstufenverfahren . . . . .	108
7.1.6. Verfahren der Parameterdarstellung nach <i>Pulay</i> und <i>Török</i> . . . . .	113
7.2. Extremalvorschriften für die Kraftkonstantenmatrix $F$ . . . . .	116
7.2.1. Verfahren von <i>Strey</i> . . . . .	116
7.2.2. Extremalbeziehungen von <i>Strey</i> und <i>Klauss</i> . . . . .	117
7.2.3. Obere und untere Grenzen von Kraftkonstanten nach <i>Freeman</i> . . . . .	118
7.3. Extremalvorschriften bezüglich der inversen Matrix der kinetischen Energie $G$ . . . . .	119
7.3.1. Extremalverfahren von <i>Billes</i> . . . . .	119
7.4. Extremalvorschrift für Koordinatensysteme . . . . .	122
7.4.1. Extremalvorschrift für die dichteste Übertragung . . . . .	122
7.5. Extremalvorschriften für die Potentialfunktionen . . . . .	123
7.5.1. Spezielle Potentialenergieverteilungen nach <i>Becher</i> und <i>Ballein</i> . . . . .	123
7.5.2. Anmerkung zur Potentialenergieverteilung $V_1(F_{22}) = -2V_1(F_{12})$ von <i>Becher</i> und <i>Ballein</i> nach <i>Pfeiffer</i> . . . . .	124
7.5.3. Zusammenhänge und Verallgemeinerungen . . . . .	125
7.6. Extremalvorschriften für die Eigenvektormatrix $L$ . . . . .	126
7.6.1. Methode der charakteristischen Valenzkoordinatensätze nach <i>Herranz</i> und <i>Castaño</i> . . . . .	126
7.6.2. Verfahren von <i>Müller</i> . . . . .	127
7.6.3. $L^{(0)}$ -Methode von <i>Alix</i> . . . . .	131
7.7. Extremfall der Eigenwertmatrix . . . . .	132
7.8. Einige Vergleiche . . . . .	135
8. Einige Anwendungen . . . . .	136
8.1. Verwendung der Kraftkonstantenrechnung zur Frequenzzuordnung . . . . .	136
8.2. Zur Berechnung von Kraftkonstanten von Molekülkristallen . . . . .	137

## 2. Unterabschnitt: Zusätzliche Verwendung von Schwingungsfrequenzen isotoper Moleküle

9. Vollständige Berechnung aller $n(n+1)/2$ Kraftkonstanten für $n \geq 2$ durch zusätzliche Schwingungsspektren isotoper Moleküle . . . . .	139
9.1. Zur Gleichheit der Kraftkonstantenmatrizen isotoper Moleküle . . . . .	139
9.2. Relationen zwischen isotopen Molekülen . . . . .	141
9.2.1. Produktregel . . . . .	141
9.2.2. Eine Differenzenbeziehung . . . . .	141
9.2.3. Summenregeln . . . . .	142
9.2.4. Weitere Isotopenregeln . . . . .	143

<b>10. Vereinfachte Berechnung von Kraftkonstanten bei nichtsymmetrischen und symmetrischen Molekülen durch geeignete Isotopensubstitutionen</b>	144
10.1. Isotopenreduktionsverfahren	144
10.1.1. Verschiedene Schwierigkeiten bei der Berechnung der Kraftkonstanten größerer Moleküle	144
10.1.2. Reduktionsmethode mit geeigneten Isotopensubstitutionen	144
10.2. Vergleich mit der gruppentheoretischen Methode	146
10.3. Anwendungen	147
10.3.1. Vollständig linear lösbarer Fälle	147
10.3.2. Reduktion auf 2 Kraftkonstanten	147
10.3.3. Als Näherungsformel, Ausgangslösung, Auswahlregel und Zuordnungshilfe	149
<b>11. Allgemeine Rechenverfahren für Kraftkonstanten bei zusätzlichen Isotopenfrequenzsätzen</b>	149
11.1. Berechnung der Kraftkonstantenmatrizen für $n = 2$	149
11.1.1. 2 Lösungen bei Vorgabe eines zusätzlichen Isotopenfrequenzsatzes	149
11.1.1.1. Formelsatz	150
11.1.1.2. Fallunterscheidungen und Lösbarkeitsbedingungen	151
11.1.1.3. Der singuläre Fall $K_s = 0$	152
11.1.2. Zur Auswahl einer Kraftkonstantenmatrix	152
11.1.3. Eine Lösung bei Vorgabe von 2 zusätzlichen Isotopenfrequenzsätzen	154
11.2. Rechenverfahren für $n = 3$	155
11.2.1. Für 2 isotope Moleküle	155
11.2.1.1. Iterative Berechnung von $F$ nach Newton	156
11.2.1.2. Zur Aufstellung einer Ausgangslösung	158
11.2.2. Für 2 außenatomsubstituierte Moleküle $XYZ(C_s)$	158
11.2.2.1. Einfaches Iterationsverfahren für die 4 Kraftkonstanten $f_{11}, f_{22}, f_{33}$ und $f_{12}$ mit $f_{13} = f_{23} = 0$	158
11.2.2.2. $f_{11}f_{22}f_{33}$ als Funktion von $f_{33}$	159
11.2.2.3. Aufbaukonstruktionen von Kraftkonstanten	160
11.2.3. Für mehr als 2 isotope Moleküle	162
11.3. Zahl der Lösungen der Kraftkonstantenmatrix $F$	162
11.3.1. Allgemeine Darstellung	162
11.3.2. Für ein spezielles inverses Eigenwertproblem	163
11.4. Zur Auswahl der physikalischen Lösung von $F$	164
11.4.1. Exakte Auswahlregeln	164
11.4.2. Näherungsauswahlregeln	165
11.5. Iterationsverfahren für höhere Ordnungen	165
11.5.1. Die Kopplungsstufenverfahren	165
11.5.2. Frequenzgangverfahren	166
11.5.2.1. Zur Aufstellung einer Ausgangslösung	167
11.5.2.2. Auswahlregeln	169
11.5.2.3. Veranschaulichung und Anwendungsbeispiel	169
11.5.3. 3 Verfahren von Johansen	170
<b>3. Abschnitt: Zur Kraftkonstantenberechnung aus weiteren experimentellen Daten nach der Quantenmechanik</b>	
<b>12. Zentrifugaldehnungseffekt</b>	174
12.1. Zweiatomiges Molekül XY	174
12.2. Zur allgemeinen Theorie	176

12.3. Zur praktischen Berechnung der Zentrifugaldehnungskonstanten . . . . .	178
12.3.1. Formelsatz zur Berechnung der Matrix $t$ . . . . .	178
12.3.2. Beispiel $XY_2(C_{2v})$ . . . . .	180
12.3.3. Zahlenbeispiel $H_2O$ . . . . .	181
12.4. Die Energie eines nichtstarren Rotors im Zusammenhang mit den Zentrifugaldehnungs- und störungskonstanten . . . . .	181
12.5. Anwendungsbeispiel $XYZ(C_{\infty v})$ – Zahlenbeispiel OCS . . . . .	184
13. <i>Coriolis-Kopplung</i> . . . . .	187
13.1. Quantentheoretische Behandlung und allgemeine Ergebnisse . . . . .	187
13.1.1. Der Hamilton-Operator . . . . .	187
13.1.2. Coriolis-Wechselwirkung und 1-Aufspaltung . . . . .	188
13.1.3. Der symmetrische Rotator – Der sphärische Rotator . . . . .	189
13.2. Zur klassisch-physikalischen Matrixdarstellung der Coriolis-Konstanten . . . . .	190
13.3. Molekülbeispiel $XY_2(C_{2v})$ . . . . .	194
13.4. Zahlenbeispiele $NO_2$ , FCN und $SO_3$ . . . . .	195
14. <i>Schwingungsamplituden</i> . . . . .	197
14.1. Zur experimentellen Bestimmung . . . . .	197
14.2. Quantentheoretische Berechnung der mittleren Schwingungsamplitude eines 2-atomigen Moleküls . . . . .	197
14.3. Erweiterung auf vielatomige Moleküle . . . . .	199
14.4. Matrizendarstellung der Schwingungsamplituden – Zusammenhänge mit der Kraftkonstantenmatrix $F$ . . . . .	199
14.5. Isotopenregeln . . . . .	201
14.6. Zur Berechnung der Amplitudenmatrix . . . . .	202
14.7. Einige explizite Berechnungen und Zahlenbeispiele . . . . .	202
14.7.1. Typ $XY_2(C_{2v})$ – Zahlenbeispiel $NO_2$ . . . . .	202
14.7.2. Zur Kraftkonstantenberechnung aus Schwingungsamplituden, dargestellt am $XY_4(T_d)$ und $OsO_4$ . . . . .	205
15. <i>Trägheitsdefekt</i> . . . . .	206
15.1. Experimenteller Befund . . . . .	206
15.2. Theoretische Behandlung und Ergebnisse . . . . .	207
15.3. $XY_2(C_{2v})$ -Molekültyp als Beispiel . . . . .	208
15.3.1. Formelsatz . . . . .	208
15.3.2. Zusammenhang mit den Kraftkonstanten . . . . .	209
15.3.3. $H_2O$ -Molekül als Zahlenbeispiel . . . . .	209
16. <i>Raman-Intensitäten</i> . . . . .	210
16.1. Vorbemerkungen . . . . .	210
16.2. Aus der Theorie der Raman-Intensitäten . . . . .	210
16.3. Anwendungsbeispiel $XY_4(T_d)$ . . . . .	211
16.3.1. Formeln . . . . .	211
16.3.2. Zahlenbeispiel: $CCl_4(T_d)$ . . . . .	212
17. <i>Rechenverfahren mit weiteren Molekülgrößen</i> . . . . .	213
17.1. Der Fall der Ordnung $n = 2$ . . . . .	213
17.2. Verfahren für höhere Ordnungen von $n$ . . . . .	214
17.2.1. Methode von <i>Strey und Klauss</i> . . . . .	214
17.2.2. Methode von <i>Hüttner</i> . . . . .	214

17.2.3. Erweiterte Parameterdarstellung nach <i>Pulay</i> und <i>Török</i> . . . . .	214
17.2.4. Erweiterte Kopplungsstufenverfahren . . . . .	215
17.2.5. Verallgemeinertes Verfahren von <i>Mann</i> , <i>Shimanouchi</i> , <i>Meal</i> und <i>Fano</i> . . . . .	215

## 2. Teil: Kraftkonstantenberechnung aus physikalischen Konstanten nach der Quantenmechanik

18. Quantentheoretische Absolutberechnungen von Bindungsabständen, -winkeln, -energien und Kraftkonstanten . . . . .	216
18.1. Die Grundgleichungen der quantentheoretischen ab-initio-Berechnungen mit der <i>Schrödinger</i> -Gleichung und dem <i>Pauli</i> -Prinzip . . . . .	217
18.2. Zur Berechnung der Energiehyperflächen mit <i>Gauß</i> -Funktionen nach dem SCF-MO-LCGO-Verfahren . . . . .	220
18.3. Zur Berechnung von Gleichgewichtsabständen, Valenzwinkeln, Schwingungsfrequenzen, Kraftkonstanten und Bindungsenergien aus den Energiehyperflächen . . . . .	222
18.4. Zahlenbeispiele . . . . .	223
18.4.1. Das 2-atomige Ion OH <sup>-</sup> . . . . .	223
18.4.2. Zusammenstellung einiger Berechnungen . . . . .	225
18.5. Kräftemethode von <i>Pulay</i> . . . . .	225
18.5.1. Kartesische Kräfte . . . . .	225
18.5.2. Innere Kräfte . . . . .	228
18.5.3. Zur Berechnung der Gleichgewichtskonfiguration mit einer abgeschätzten Kraftkonstantenmatrix . . . . .	229
18.5.4. Zur praktischen Durchführung und Besonderheiten . . . . .	229
18.5.5. Zahlenbeispiele . . . . .	230

## 3. Teil: Nichttheoretische empirische Interpolationsrelationen zwischen Kraftkonstanten und verschiedenen Molekülgrößen

19. Empirische Zusammenhänge der Kraftkonstanten mit observablen Molekülgrößen . . . . .	231
19.1. Bindungsabstand – <i>Badger</i> -Regel . . . . .	231
19.2. Dissoziationsenergie . . . . .	232
19.3. Elektronegativität – <i>Gordy</i> -Regel . . . . .	233
19.4. Kovalente Radien und Zahl der Valenzelektronen – <i>Williams</i> -Regel . . . . .	234
20. Zur nähерungsweisen Bestimmung der Bindungsordnung als nichtobservabler Molekülgröße nach <i>Siebert</i> . . . . .	234
20.1. Empirische Formel zur Berechnung von Kraftkonstanten idealer Einfachbindungen aus Kernladungszahlen und Hauptquantenzahlen – <i>Siebertsche Produktregel</i> . . . . .	234
20.1.1. Erweiterung nach <i>Goubeau</i> . . . . .	236
20.2. Bindungsgradberechnungen nach <i>Siebert</i> . . . . .	237
20.3. Anwendungen und Ergebnisse . . . . .	239
20.3.1. Bindungsgrad der SO-Bindung von SO <sub>2</sub> . . . . .	239
20.3.2. Zusammenstellung einiger Bindungsgrade . . . . .	239
20.4. Einige allgemeine Ergebnisse . . . . .	240

## Anhang

<b>21. Formelzusammenstellung . . . . .</b>	<b>242</b>
21.1. Zusammenstellung der Formelsätze für die Kraftkonstantenberechnung einfacher Moleküle . . . . .	242
21.1.1. 2-atomige Moleküle . . . . .	242
21.1.2. 3-atomige Moleküle . . . . .	243
21.2. Literurnachweis zur Kraftkonstantenberechnung komplizierter Moleküle . . . . .	249
21.3. Formelsätze zur Kraftkonstantenberechnung einiger häufiger Molekülsysteme . . . . .	253
21.3.1. Probleme bis zur Ordnung $n = 2$ ( $X_4(T_d)$ , $X_2Y_2(D_{\infty h})$ , $XY_3(D_{3h})$ , $XY_3(C_{3v})$ , $XY_4(D_{4h})$ , $XY_4(T_d)$ , $XY_6(O_h)$ ) . . . . .	253
21.3.2. Probleme bis zur Ordnung $n = 3$ ( $Y_2XZ(C_{2v})$ , $ZXY_3(C_{3v})$ ) . . . . .	256
<b>22. Tabellen . . . . .</b>	<b>257</b>
22.1. Massen und reziproke Massen von Atomen und Isotopen . . . . .	257
22.2. Zur Umrechnung von Schwingungswellenzahlen in Eigenwerte . . . . .	262
22.3. Kraftkonstanten einfacher Moleküle bei hinreichend vielen Ausgangsdaten . . . . .	282
22.3.1. Ordnung $n = 1$ : $XX(D_{\infty h})$ , $XY(C_{\infty v})$ , $XY_2(D_{\infty h})$ , $X_4(T_d)$ . . . . .	282
22.3.2. Literatur zu den Ordnungen $n = 2$ und 3 . . . . .	284
22.3.3. Ordnung $n = 2$ : $XYZ(C_{\infty v})$ , $XY_2(C_{2v})$ , $YXXX(Y(D_{\infty h})$ , $XY_3(D_{3h})$ , $XY_3(C_{3v})$ , $XY_4(T_d)$ , $XY_6(O_h)$ . . . . .	287
22.3.4. Ordnung $n = 3$ : $XYZ(C_s)$ , $XY_2Z(C_{2v})$ , $ZXY_3(C_{3v})$ . . . . .	295
<b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>	<b>298</b>
<b>Substanzregister . . . . .</b>	<b>314</b>
<b>Systemregister . . . . .</b>	<b>316</b>
<b>Sachregister . . . . .</b>	<b>317</b>