

## Inhaltsverzeichnis

**Vorwort** *XI*

**Einleitung** *XV*

- 1 Übergang von der klassischen Physik zur Quantenmechanik** *1*
  - 1.1 Beschreibung von Licht als elektromagnetische Welle *2*
  - 1.2 Strahlung des Schwarzen Körpers *3*
  - 1.3 Der photoelektrische Effekt *6*
  - 1.4 Absorptions- und Emissionsspektren von Wasserstoffatomen *8*
  - 1.5 Molekülspektroskopie *11*
  - 1.6 Zusammenfassung *13*
    - Aufgaben *13*
    - Literatur *15*
  
- 2 Grundlagen der Quantenmechanik** *17*
  - 2.1 Postulate der Quantenmechanik *18*
  - 2.2 Die potenzielle Energie und Potenzialfunktionen *22*
  - 2.3 Demonstration der quantenmechanischen Prinzipien für ein einfaches, eindimensionales Ein-Elektronen-Modellsystem: Das Teilchen im Kasten *24*
  - 2.4 Das Teilchen in einem zweidimensionalen Kasten, das ungebundene Teilchen und das Teilchen in einem Kasten mit endlichen Energiebarrieren *31*
  - 2.5 Reale Teilchen im Kasten: Konjugierte Polyene, Quantenpunkte und Quantenkaskadenlaser *35*
    - Aufgaben *38*
    - Literatur *40*

VI | *Inhaltsverzeichnis*

- 3 Störung stationärer Zustände durch elektromagnetische Strahlung 41**
  - 3.1 Zeitabhängige Störungstheorie stationärer Zustände durch elektromagnetische Strahlung 41
  - 3.2 Dipolerlaubte Absorptions- und Emissionsübergänge und Auswahlregeln für das Teilchen im Kasten 45
  - 3.3 Einstein-Koeffizienten für die Absorption und Emission von Licht 47
  - 3.4 Laser 50
    - Aufgaben 52
    - Literatur 53
  
- 4 Der harmonische Oszillator, ein Modellsystem für die Schwingungen von zweiatomigen Molekülen 55**
  - 4.1 Klassische Beschreibung eines schwingenden zweiatomigen Modellsystems 55
  - 4.2 Die Schrödinger-Gleichung, Energieeigenwerte und Wellenfunktionen für den harmonischen Oszillator 57
  - 4.3 Übergangsmoment und Auswahlregeln für Absorption für den harmonischen Oszillator 63
  - 4.4 Der anharmonische Oszillator 66
  - 4.5 Schwingungsspektren von zweiatomigen Molekülen 69
  - 4.6 Zusammenfassung 72
    - Aufgaben 73
    - Literatur 74
  
- 5 Infrarot und Raman-Schwingungsspektroskopie mehratomiger Moleküle 75**
  - 5.1 Schwingungsenergie mehratomiger Moleküle: Normalkoordinaten und normale Schwingungsmoden 75
  - 5.2 Quantenmechanische Beschreibung molekularer Schwingungen in mehratomigen Molekülen 79
  - 5.3 Infrarotabsorptionsspektroskopie 82
    - 5.3.1 Symmetrieüberlegungen für dipolerlaubte Übergänge 83
    - 5.3.2 Bandenformen für Absorption und anomale Dispersion 84
  - 5.4 Raman-Spektroskopie 88
    - 5.4.1 Allgemeine Aspekte der Raman-Spektroskopie 88
    - 5.4.2 Makroskopische Beschreibung der Polarisierbarkeit 89
    - 5.4.3 Quantenmechanische Beschreibung der Polarisierbarkeit 90
  - 5.5 Auswahlregeln für IR- und Raman-Spektroskopie mehratomiger Moleküle 94
  - 5.6 Beziehung zwischen Infrarot- und Raman-Spektren: Chloroform 96
  - 5.7 Zusammenfassung: Molekulare Schwingungen in Wissenschaft und Technologie 98
    - Aufgaben 98
    - Literatur 100

<b>6</b>	<b>Rotation von Molekülen und Rotationsspektroskopie</b>	<b>101</b>
6.1	Klassische Rotationsenergie von zwei- und mehratomigen Molekülen	102
6.2	Quantenmechanische Beschreibung des Drehimpulsoperators	105
6.3	Die Schrödinger-Gleichung für Rotation, Eigenfunktionen und Energieeigenwerte	107
6.4	Auswahlregeln für Rotationsübergänge	112
6.5	Rotationsabsorptionsspektren (Mikrowellenspektren)	113
6.5.1	Starre zweiatomige und lineare Moleküle	113
6.5.2	Prolate und oblate symmetrische Kreisel	116
6.5.3	Asymmetrische Kreisel	118
6.6	Rotationsschwingungsübergänge	119
	Aufgaben	121
	Literatur	123
<b>7</b>	<b>Atomstruktur: Das Wasserstoffatom</b>	<b>125</b>
7.1	Die Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom	126
7.2	Lösungen der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom	128
7.3	Dipollaubte Übergänge für das Wasserstoffatom	134
7.4	Diskussion der Ergebnisse für das Wasserstoffatom	135
7.5	Elektronenspin	136
7.6	Räumliche Quantisierung des Drehimpulses	140
	Aufgaben	140
	Literatur	142
<b>8</b>	<b>Kernspinresonanzspektroskopie (Nuclear Magnetic Resonance, NMR)</b>	<b>143</b>
8.1	Allgemeine Bemerkungen	143
8.2	Rückblick auf Drehimpuls und Spindrehimpuls von Elektronen	144
8.3	Kernspin	146
8.4	Auswahlregeln, Übergangsenergien, Magnetisierung und Spinpopulationsanalyse	150
8.4.1	Auswahlregeln für den elektrischen Dipolübergang für ein Ein-Spin-Kern-System	150
8.4.2	Übergangsenergien	151
8.4.3	Magnetisierung	152
8.4.4	Analyse der Besetzung (Population) der Spinzustände	152
8.5	Chemische Verschiebung	153
8.6	Multispinsysteme	155
8.6.1	Nicht wechselwirkende Spins	155
8.6.2	Wechselwirkende Spins: Spin-Spin-Kopplung	157
8.6.3	Wechselwirkung mehrerer Spins	158
8.7	Puls-FT-NMR Spektroskopie	160
8.7.1	Allgemeine Bemerkungen	160
8.7.2	Beschreibung der NMR-Vorgänge durch die „Nettomagnetisierung“	161
	Aufgaben	162
	Literatur	163

VIII | *Inhaltsverzeichnis*

- 9 Atomstruktur: Mehr-Elektronen-Systeme 165**
  - 9.1 Der Zwei-Elektronen-Hamilton-Operator, die Abschirmung und die effektive Kernladung 165
  - 9.2 Das Pauli-Prinzip 167
  - 9.3 Das Aufbauprinzip 168
  - 9.4 Periodische Eigenschaften von Elementen 169
  - 9.5 Atomenergieniveaus 171
    - 9.5.1 Gute und schlechte Quantenzahlen und Termsymbole 171
    - 9.5.2 Auswahlregeln für atomare Übergänge 174
  - 9.6 Atomspektroskopie 175
  - 9.7 Atomspektroskopie in der analytischen Chemie 176
    - Aufgaben 177
    - Literatur 178
  
- 10 Elektronische Energieniveaus und Spektroskopie mehratomiger Moleküle 179**
  - 10.1 Molekülorbitale und chemische Bindung im  $H_2^+$ -Molekülion 180
  - 10.2 Molekülorbitaltheorie für homonukleare zweiatomige Moleküle 184
  - 10.3 Termsymbole und Auswahlregeln für homonukleare zweiatomige Moleküle 187
  - 10.4 Elektronische Spektren von zweiatomigen Molekülen 189
    - 10.4.1 Das vibronische Absorptionsspektrum von Sauerstoff 189
    - 10.4.2 Vibronische Übergänge und das Franck-Condon-Prinzip 192
  - 10.5 Qualitative Beschreibung elektronischer Spektren mehratomiger Moleküle 194
    - 10.5.1 Auswahlregeln für elektronische Übergänge 195
    - 10.5.2 Gängige elektronische Chromophore 195
  - 10.6 Fluoreszenzspektroskopie 199
    - 10.6.1 Diagramm der Fluoreszenzeniveaus (Jablonski-Diagramm) 199
    - 10.6.2 Interkombination (intersystem crossing) und Phosphoreszenz 200
    - 10.6.3 Zwei-Photonen-Fluoreszenz (Two-Photon Fluorescence, TPF) 201
    - 10.6.4 Zusammenfassung der Mechanismen für Raman-, Resonanz-Raman- und Fluoreszenzspektroskopie 201
  - 10.7 Optische Aktivität: elektronischer Zirkulardichroismus (ECD) und optische Rotation 203
    - 10.7.1 Zirkular polarisiertes Licht und Chiralität 203
    - 10.7.2 Manifestation der optischen Aktivität: optische Rotation, optische Rotationsdispersion und Zirkulardichroismus 204
    - 10.7.3 Optische Aktivität asymmetrischer Moleküle: das magnetische Übergangsmoment 206
    - 10.7.4 Optische Aktivität dissymmetrischer Moleküle: Übergangskopplung und Exzitonmodell 208
    - 10.7.5 Optische Aktivität in Molekülschwingungen 210
      - Aufgaben 211
      - Literatur 215

<b>11</b>	<b>Gruppentheorie und Symmetrie</b>	217
11.1	Symmetrioperationen und Symmetriegruppen	218
11.2	Darstellung einer Gruppe	222
11.3	Symmetriedarstellungen molekularer Schwingungen	230
11.4	Symmetriebasierte Auswahlregeln für dipolzulässige Prozesse	234
11.5	Auswahlregeln für die Raman-Streuung	236
11.6	Charaktertafeln von gängigen Punktgruppen	237
	Aufgaben	239
	Literatur	240
	<b>Lösungen zu den Aufgaben</b>	241
	<b>Anhang A Konstanten und Umrechnungsfaktoren</b>	285
	<b>Anhang B Näherungsmethoden: Variations- und Störungstheorie</b>	287
B.1	Allgemeine Bemerkungen	287
B.2	Variationsmethode	288
B.3	Zeitunabhängige Störungstheorie für nicht entartete Systeme	289
B.4	Detailliertes Beispiel für eine zeitunabhängige Störung: das Teilchen im Kasten mit geeigneter Potenzialfunktion	290
B.5	Zeitabhängige Störung molekularer Systeme durch elektromagnetische Strahlung	295
	Literatur	296
	<b>Anhang C Nicht lineare spektroskopische Methoden</b>	297
C.1	Allgemeine Formulierung nicht linearer Effekte	297
C.2	Nicht kohärente, nicht lineare Effekte: Hyper-Raman-Spektroskopie	298
C.3	Kohärente nicht lineare Effekte	300
C.3.1	Frequenzverdopplung	300
C.3.2	Kohärente Anti-Stokes-Raman-Streuung (CARS)	302
C.3.3	Stimulierte Raman-Streuung (SRS) und femtosekundenstimulierte Raman-Streuung (FSRS)	305
C.4	Nachbemerkung	306
	Literatur	307
	<b>Anhang D Fourier-Transformationsmethodik</b>	309
D.1	Einführung in die Fourier-Transformationspektroskopie	309
D.2	Datendarstellung in verschiedenen Domänen	310
D.3	Fourier-Serie	310
D.4	Fourier-Transformation	313
D.5	Diskrete und schnelle Fourier-Transformationsalgorithmen	315
D.6	FT-Implementierung in EXCEL oder MATLAB	316
	Literatur	317

x | *Inhaltsverzeichnis*

**Anhang E Beschreibung der Spinwellenfunktionen durch  
Pauli-Spinmatrizen 319**

- E.1 Die Formulierung der Spin-Eigenfunktionen  $\alpha$  und  $\beta$  als Vektoren 320
- E.2 Form der Pauli-Spinmatrizen 321
- E.3 Eigenwerte der Spinmatrizen 323
- Literatur 324

**Stichwortverzeichnis 325**