

# ELEKTRONENSPEKTREN ORGANISCHER MOLEKÜLE

VON

J. N. MURRELL  
PROFESSOR FÜR CHEMIE  
UNIVERSITÄT VON SUSSEX



BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT MANNHEIM  
HOCHSCHULTASCHENBÜCHER-VERLAG

# INHALTSÜBERSICHT

## KAPITEL 1

### *Einführung in die Theorie der Lichtabsorption*

|   |    |
|---|----|
| 1.1 Frühe Farbtheorien . . . . .                    | 15 |
| 1.2 Das Spektrum. . . . .                           | 16 |
| 1.3 Die Grundpostulate der Quantenmechanik. . . . . | 18 |
| 1.4 Die Absorption und Emission von Licht. . . . .  | 20 |
| 1.5 Quellen für experimentelle Daten. . . . .       | 24 |

## KAPITEL 2

### *Molekülwellenfunktionen*

|  |    |
|--|----|
| 2.1 Die Separierung von Elektronen- und Kernbewegung . . . . . | 26 |
| 2.2 Elektronenspin. . . . .                                    | 31 |
| 2.3 Orbitale und Slater-Determinanten . . . . .                | 35 |
| 2.4 Berechnung der Energien. . . . .                           | 39 |
| 2.5 Symmetrie. . . . .   | 42 |

## KAPITEL 3

### *Valenzstruktur- und Molekülorbitaltheorie*

|   |    |
|---|----|
| 3.1 Valenzstrukturtheorie. . . . .                                    | 46 |
| 3.2 Elektronengastheorie. . . . .                                     | 52 |
| 3.3 Die LCAO-Näherung . . . . .                                       | 57 |
| 3.4 Vergleich von Valenzstruktur- und Molekülorbitaltheorie . . . . . | 63 |

## KAPITEL 4

### *Die Absorptionsspektren von Äthylen und Acetylen*

|   |    |
|---|----|
| 4.1 Äthylen. . . . .  | 65 |
| 4.2 Zur Äthylengruppe isoelektronische Chromophore. . . . . | 77 |

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| 4.3 Acetylen . . . . .          | 79 |
| 4.4 Schlußbetrachtung . . . . . | 86 |

## KAPITEL 5

*Konjugierte Kohlenwasserstoffketten*

|  |     |
|--|-----|
| 5.1 Konjugation . . . . .                                  | 87  |
| 5.2 Lineare Polyene . . . . .                              | 89  |
| 5.3 Polyacetylene und Cumulene . . . . .                   | 98  |
| 5.4 Polymethinfarbstoffe . . . . .                         | 103 |
| 5.5 Zyklische Polyene und verwandte Verbindungen . . . . . | 108 |

## KAPITEL 6

*Benzol und kondensierte Aromaten*

|  |     |
|--|-----|
| 6.1 Allgemeine Kennzeichen der Spektren von Aromaten . . . . . | 112 |
| 6.2 Empirische Berechnung der Energieniveaus . . . . .         | 126 |
| 6.3 Schwingungsstruktur . . . . .                              | 145 |
| 6.4 Benzol . . . . .   | 149 |

## KAPITEL 7

*Schwach wechselwirkende Chromophore*

|  |     |
|--|-----|
| 7.1 Nichtkonjugierte Chromophore . . . . .   | 157 |
| 7.2 Konjugierte Chromophore mit schwacher Elektronen-<br>delokalisierung . . . . . | 170 |

## KAPITEL 8

*Übergänge nichtbindender Elektronen*

|  |     |
|--|-----|
| 8.1 Die Carbonylgruppe . . . . .               | 184 |
| 8.2 Dialdehyde, Diketone und Chinone . . . . . | 194 |
| 8.3 Säuren und Amide . . . . .                 | 200 |
| 8.4 Schwefel Verbindungen . . . . .            | 201 |
| 8.5 Die Stickstoff-Heterocyclen . . . . .      | 203 |
| 8.6 Die Azogruppe $\text{—N=N—}$ . . . . .     | 209 |
| 8.7 Stickstoff-Sauerstoff-Bindungen . . . . .  | 210 |

## KAPITEL 9

*Der induktive Effekt*

|   |     |
|---|-----|
| 9.1 Einführung in die Substituenteneffekte. . . . .   | 216 |
| 9.2 Heterokonjugierte Moleküle. . . . .               | 220 |
| 9.3 Der induktive Effekt eines Substituenten. . . . . | 227 |

## KAPITEL 10

*Der mesomere Effekt*

|   |     |
|---|-----|
| 10.1 Einführung. . . . .                | 240 |
| 10.2 Schwacher mesomere Effekt. . . . . | 247 |
| 10.3 Starker mesomere Effekt. . . . .   | 257 |

## KAPITEL 11

|                                   |     |
|-----------------------------------|-----|
| <i>Sterische Effekte.</i> . . . . | 269 |
|-----------------------------------|-----|

## KAPITEL 12

*Nichtalternierende Kohlenwasserstoffe, Kohlenwasserstoff-Radikale und -Ionen*

|   |     |
|---|-----|
| 12.1 Nichtalternierende Kohlenwasserstoffe. . . . . | 278 |
| 12.2 Kohlenwasserstoff-Radikale. . . . .            | 286 |
| 12.3 Carbeniat- und Carbonium-Ionen. . . . .        | 291 |

## KAPITEL 13

|   |     |
|---|-----|
| <i>Die Spektren von Molekülkomplexen.</i> . . . . | 303 |
|---|-----|

## KAPITEL 14

*Fluoreszenz und Phosphoreszenz*

|  |     |
|--|-----|
| 14.1 Wege der Anregung und der Emission. . . . . | 317 |
| 14.2 Spin-Entkopplung. . . . .                   | 328 |
| 14.3 Anwendungen der Emissionsspektren. . . . .  | 334 |

*Anhang 1*

|  |     |
|--|-----|
| Die Rückführung von Mehrelektronenintegralen auf Ein- und Zweielektronenintegrale. . . . . | 344 |
|--|-----|

*Anhang 2*

|  |     |
|--|-----|
| Matrixelemente des Hamilton-Operators zwischen den tiefsten Zuständen eines Moleküls mit abgeschlossener Schale. . . . . | 346 |
|--|-----|

*Anhang 3*

|  |     |
|--|-----|
| Störungsrechnung mit einem Satz nichtorthogonaler Funktionen | 347 |
|--|-----|

*Anhang 4*

|   |     |
|---|-----|
| Symbole für Symmetriegruppen und ihre Darstellungen . . . . . | 349 |
|---|-----|

*Anhang 5*

|  |     |
|--|-----|
| Berechnung der Energie der ${}^1L_a$ -Bande von Naphthalin nach dem P-Verfahren. . . . . | 350 |
|--|-----|

*Anhang 6*

|   |     |
|---|-----|
| Umwandlungstabelle für Energie und Wellenlänge. . . . . | 356 |
|---|-----|