

**Bücher Chemie**

Enbroich, Marburg  
Marburg  
Schweig

Chemie sollen in Form einzel-  
ner weiterführende Themen  
umfassen. Sie streben nicht  
auf eine umfangreiche Mo-  
nographie für Studenten der Chemie –  
sondern auf einen lebendigen Chemiker  
in rascher Entwicklung be-  
zogen. Die Bücher sind  
einfach, aber auch – da sie  
auf den Grundlagen beruhen – anstelle von  
kompliziertem, im Laufe der Zeit  
veralteten Lehrbüchern vorzu-  
zuziehen. Sie sind für Studenten anderer  
Fächer als exemplarische Darstel-

# Aufbau der Moleküle

Eine Einführung

Von Prof. Dr. rer. nat. Friedrich Engelke  
Fachhochschule Furtwangen

3. Auflage  
Mit 208 Figuren



B. G. Teubner Stuttgart 1996

Prof. Dr. rer. nat. Friedrich Engelke

Geboren 1943 in Prag, Studium in Freiburg i. Br. bei D. Beck und O. Osberghaus, Promotion 1974, anschließend 1974 bis 1976 Aufenthalt an der Columbia University in New York bei R. N. Zare, dann Assistent an der Universität Bielefeld, wissenschaftliche Tätigkeit 1979/80 an der Universität Paris-Süd in Orsay. 1980 Habilitation, 1981 und 1986 Aufenthalt an der Stanford University, 1982 und 1984 an der Yale University. Seit 1983 Professor an der Universität Bielefeld, seit 1988 an der FH Furtwangen.



Die Deutsche Bibliothek – CIP-Einheitsaufnahme

**Engelke, Friedrich:**

Aufbau der Moleküle : eine Einführung / von Friedrich Engelke. – 3. Aufl. – Stuttgart : Teubner, 1996  
(Teubner-Studienbücher : Chemie)

ISBN 3-519-23056-9

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Das gilt besonders für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

© B. G. Teubner, Stuttgart 1985

Printed in Germany

Satz: Druckerei zu Altenburg GmbH, Altenburg

Druck und Binden: Druckhaus Beltz, Hemsbach/Bergstraße

# Inhalt

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	9
<b>2</b>	<b>„Spaziergang Gruppentheorie“</b>	10
2.1	Gruppen	10
2.2	Symmetrieoperationen und Moleküle	13
2.3	Punktgruppen	16
2.4	Einordnung von Molekülen in Punktgruppen	25
2.5	Stereographische Projektionen	29
2.6	Matrizendarstellung einiger Symmetrieoperationen	33
2.7	Charaktere und Charaktertafeln	42
2.8	Zerlegung reduzibler Darstellungen und das direkte Produkt	55
<b>3</b>	<b>Schwingungen und ihre Spektroskopie</b>	58
3.1	Einleitung	58
3.2	Licht	59
3.3	Infrarot(IR)- und Raman-Spektren	61
3.4	Zweiatomige Moleküle	63
3.4.1	Der starre Rotator	63
3.4.2	Der harmonische Oszillator	66
3.4.3	Der anharmonische Oszillator	69
3.4.4	Die Beziehung zwischen der Kraftkonstante $k$ und der Bindungsenergie $D_0$	72
3.4.5	Die Besetzung von Energieniveaus	73
3.4.6	Analyse eines Schwingungs-Rotations-Spektrums: CO	75
3.5	Die Normalschwingungen vielatomiger Moleküle	82
3.5.1	Normalkoordinaten	84
3.5.2	H <sub>2</sub> O	87
3.5.3	CO <sub>2</sub>	91
3.5.4	XeF <sub>4</sub>	94
3.5.5	BCl <sub>3</sub>	96
3.5.6	B <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	97
3.6	Auswahlregeln und Polarisierung	99
3.6.1	Fundamentale Übergänge	99
3.6.2	Obertöne, Kombinations- und „heiße“ Banden	111
3.6.3	Konstruktion von Normalschwingungen	115

..... 9

“ ..... 10

..... 10

Moleküle ..... 13

..... 16

in Punktgruppen ..... 25

en ..... 29

Symmetrioperationen ..... 33

feln ..... 42

llungen und das direkte Produkt ..... 55

roskopie ..... 58

..... 58

..... 59

pektren ..... 61

..... 63

..... 63

llator ..... 66

szillator ..... 69

n der Kraftkonstante  $k$  und der Bindungs-  
..... 72

nergieniveaus ..... 73

ngs-Rotations-Spektrums: CO ..... 75

ielatomiger Moleküle ..... 82

..... 84

..... 87

..... 91

..... 94

..... 96

..... 97

tion ..... 99

änge ..... 99

ons- und „heiße“ Banden ..... 111

ormalschwingungen ..... 115

**4 „Neandertaler-Orbitaltheorie“** ..... 127

4.1 Einführung in die Quantenmechanik ..... 127

4.2 MO aus LCAO ..... 131

4.3 Anwendung: Zweiatomige Moleküle ..... 137

4.4 Ein „Orbital-Zirkus“ ..... 152

4.4.1 Das CO<sub>2</sub>-Molekül ..... 152

4.4.2 HCN ..... 162

4.4.3 Das Ethen-Molekül, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> ..... 164

4.4.4 Das Formaldehyd-Molekül, H<sub>2</sub>CO ..... 168

4.4.5 Das Methyl-Kation, CH<sub>3</sub><sup>+</sup> ..... 171

4.4.6 Das Diboran-Molekül, B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> ..... 177

**5 Elektronische Übergänge** ..... 182

5.1 Einleitung ..... 182

5.2 Grundlagen und Bezeichnungen ..... 187

5.2.1 Bandenursprung ( $\bar{\nu}_{00}$ ) ..... 187

5.2.2 Elektronenkonfiguration ..... 189

5.2.3 Stationäre Zustände ..... 190

5.3 Wellenfunktionen; Spin und Bahn ..... 193

5.3.1 Das Pauli-Prinzip ..... 193

5.3.2 Die Born-Oppenheimer-Näherung ..... 196

5.3.3 Spinentartung ..... 199

5.4 Symmetrie und Spin-Multiplizität ..... 203

5.5 Auswahlregeln ..... 209

5.5.1 Spin ..... 209

5.5.2 Bahn ..... 212

5.5.3 Schwingungskopplung ..... 213

5.6 Elektronische Prozesse in vielatomigen Molekülen ..... 218

5.6.1 Absorption ..... 218

5.6.2 Strahlungsloser Zerfall ..... 220

5.6.3 Emission ..... 223

5.7 Analyse von Spektren ..... 225

5.7.1 Kleine Moleküle ..... 226

5.7.2 Große Moleküle ..... 233

**6 Kernmagnetische Resonanz (NMR)** ..... 250

6.1 Einleitung ..... 250

6.2 NMR-Theorie ..... 250

6.3 Experiment und Messung ..... 258

6.4 Relaxationen ..... 260

6.4.1 Spin-Gitter-Relaxation ..... 262

6.4.2 Spin-Spin-Relaxation ..... 262

6.4.3	Linienbreiten	264
6.4.4	Spin-Echo-Technik	266
6.5	NMR-Spektren	266
6.5.1	Die chemische Verschiebung	267
6.5.2	Die Spin-Spin-Aufspaltung (Feinstruktur in NMR-Spektren)	273
6.5.3	Kopplung von Protonen mit anderen Kernen	279
6.6	NMR-Spektren anderer Kerne	281
6.7	Ausblick	283
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	286
A.1	Physikalische Konstanten	286
A.2	Energie-Umformungen (Konversionen)	287
A.3	Direkte Produkte	288
A.4	Charaktertafeln	291
A.5	Das $C_6H_6$ -Spektrum, Analyse der angeregten Singulett-Zustände	303
A.6	Die Hückel-Methode	306
A.7	Internationale Bezeichnung nach Hermann-Mauguin	316
A.8	Die Kabbalistik chemischer Formeln	317
	<b>Literatur</b>	323
	<b>Glossar</b>	328
	<b>Sachverzeichnis</b>	332