

Inhaltsverzeichnis

Vorwort zur 1. Auflage	6
Vorwort zur 2. Auflage	7
Einleitung	8
1. Wechselwirkung zwischen Licht und Materie	9
1.1. Innere und äußere Wechselwirkungen	9
1.2. Anregungsbedingungen	11
1.3. Einteilung der Spektralbereiche	13
1.4. Struktur der Absorptionsspektren	16
2. Maßsysteme der Spektroskopie	17
2.1. Die Absorptionsstelle	17
2.2. Die Absorptionsintensität	19
2.2.1. Anwendung des Lambert-Beerschen Gesetzes	21
2.3. Darstellung der Spektren	22
3. Grundsätzlicher apparativer Aufbau zur Aufnahme von Absorptionsspektren	25
3.1. Blockschema und gebräuchliche Kombination der Bauelemente	25
3.2. Kurze Beschreibung eines vollautomatischen Absorptionsspektralphotometers	28
4. Die Rotationsspektroskopie	31
4.1. Theoretische Grundlagen	31
4.2. Apparativer Aufbau und Präparation	36
4.3. Anwendungen der Rotationsspektroskopie	38
4.3.1. Analytische Anwendung	38
4.3.2. Bestimmung von Atomabständen und Valenzwinkeln	39
4.3.3. Bestimmung von Dipolmomenten	40
4.3.4. Kernquadrupolkopplung	41
4.3.5. Behinderung der freien Drehbarkeit	42
5. Die Infrarot- und Ramanspektroskopie	43
5.1. Theoretische Grundlagen	44
5.1.1. Entstehung der Rotations-Schwingungsspektren . .	44

5.1.2.	Eigenschwingungen von Molekülen	51
5.1.3.	Anregung der Eigenschwingungen	54
5.1.3.1.	Anregung der <i>IR</i> -Strahlungabsorption	54
5.1.3.2.	Anregung durch den Ramaneffekt	54
5.1.4.	Schwingungszuordnung	58
5.2.	Technik der <i>IR</i> - und Ramanspektroskopie	64
5.2.1.	Die <i>IR</i> -Spektroskopie	64
5.2.1.1.	Aufnahmetechnik	64
5.2.1.2.	Präparationsmethoden	66
5.2.2.	Die Ramanspektroskopie	70
5.2.2.1.	Aufnahmetechnik	70
5.2.2.2.	Präparationsmethoden	71
5.3.	Anwendung der Infrarot-Spektroskopie	72
5.3.1.	Konstitutionsaufklärung	73
5.3.1.1.	Die charakteristischen Frequenzen	73
5.3.1.2.	Beeinflussung der Lage der charakteristischen Frequenzen	77
	Einfluß des Aggregatzustandes 78 — Wasserstoffbrückenbindung 79 — Masseneffekte 81 — Elektronische Wechselwirkung 82 — Einfluß der Ringspannung 84 — Einflüsse der Konformation 86	
5.3.1.3.	Spektrenauswertung	87
5.3.1.4.	Intensitätsspektroskopie	94
5.3.2.	Qualitative Analyse	96
5.3.3.	Quantitative Infrarot-Analyse	97
5.3.4.	Spektroskopie im nahen Infrarot	101
5.4.	Anwendung der Ramanspektroskopie	103
6.	Absorptionsspektroskopie im Sichtbaren und Ultravioletten	106
6.1.	Meßmethoden	106
6.2.	Theoretische Grundlagen der Lichtabsorption	108
6.2.1.	Klassifizierung der Elektronenübergänge	108
6.2.2.	Theoretische Berechnung von Elektronenübergängen	110
6.2.3.	Feinstruktur der Absorptionsbanden	111
6.2.4.	Das FRANCK-CONDON-Prinzip	112
6.2.5.	Absorptionsintensität und Übergangswahrscheinlichkeit	116
6.2.6.	Die chemische Farbtheorie	117
6.3.	Elektronenspektren und chemische Struktur	118
6.3.1.	Substanzen mit σ -Elektronen	119
6.3.2.	Substanzen mit n -Elektronen	119

Inhaltsverzeichnis	5
6.3.3. Substanzen mit isolierten π -Elektronen	120
Olefine und andere Substanzen mit einer isolierten Doppelbindung 120 — Acetylene 121 — Substanzen mit mehreren isolierten Chromophoren 122	
6.3.4. Substanzen mit konjuguierten π -Elektronensystemen	123
α, β -ungesättigte Ketone 125 — Derivate α, β -unge- sättigter Ketone 127 — Aldehyde 128 — Diene 129 — Polyene 130 — Enine 133 — Polyne 133 — Ionoide Farbstoffe 134 — Polymethinfarbstoffe 134 — Diphenylmethan- und Triphenylmethanfarbstoffe 136 — Merocyanine 140 — Aromatische Systeme 141 — Benzol 141 — Substitutionsprodukte des Benzols 143 — Kondensierte aromatische Ring- systeme 146 — Heterocyclische Verbindungen 148	
6.4. Lichtabsorption und sterische Effekte.	149
6.5. Lösungsmittelleinfluß, Assoziation und Komplexbil- dung in Lösung	152
6.6. Quantitative Analysenmethoden	155
6.7. Tautomerie und Absorptionsspektrum	157
7. Literatur	158
7.1. Spektrendokumentation	158
7.1. Bibliographien.	161
Anhang	165
Übersetzung wichtiger Fachtermini in die englische, fran- zösische und russische Sprache	172
Sachverzeichnis	178