

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