

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1-1
1.1 Allgemeine Vorbemerkungen	1-1
1.2 Übersichtsartikel und Tabellen	1-1
1.3 Anordnung der Tabellen, der Substanzen und der Parameter	1-1
1.4 Auswahl der Daten	1-2
1.5 Abkürzungen für die Methoden der Messung und der Berechnung	1-2
1.6 Ausgewählte Grundkonstanten und Umrechnungsfaktoren	1-3
1.7 Literatur	1-4
2 Konstanten diamagnetischer Moleküle	2-1
2.1 Übersicht	2-1
2.2 Zweiatomige Moleküle: Rotationskonstanten, Dunham-Energiekoeffizienten, Zentrifugalaufweitungskonstanten, Rotations-Schwingungswechselwirkungskonstanten, Isotopenmassenverhältnisse und Gleichgewichtskernabstände (R. TISCHER)	2-1
2.2.1 Vorbemerkungen	2-1
2.2.2 Daten	2-5
2.3 Lineare Moleküle: Rotationskonstanten, Zentrifugalaufweitungskonstanten, Rotations-Schwingungswechselwirkungskonstanten, <i>l</i>-Verdopplungskonstanten, Isotopenmassen, Fermiresonanz-Wechselwirkungskonstanten und Literaturnachweise für Strukturdaten (J. DEMAISON)	2-38
2.3.1 Vorbemerkungen	2-38
2.3.2 Daten	2-40
2.4 Symmetrische Kreiselmoleküle: Rotationskonstanten, Zentrifugalaufweitungskonstanten, Rotations-Schwingungswechselwirkungskonstanten, Isotopenmassen, <i>l</i>-Verdopplungskonstanten, Coriolis-Kopplungskonstanten und Literaturnachweise für Strukturdaten (J. DEMAISON)	2-55
2.4.1 Vorbemerkungen	2-55
2.4.2 Daten	2-58
a) Pyramidenförmige Moleküle, XY ₃	2-58
b) Fünfatomige Moleküle, XY ₄ und XY ₃ Z, X=C, Si, Ge, Sn	2-60
c) Weitere fünfatomige Moleküle, XYZ ₃	2-67
d) XY ₃ -Derivate linearer Moleküle, X=C, Si, Ge	2-68
e) Trimethylverbindungen	2-72
f) Symmetrische Zweikreiselmoleküle	2-74
g) Sonstige symmetrische Kreiselmoleküle	2-77
2.5 Asymmetrische Kreiselmoleküle: Rotationskonstanten, Zentrifugalaufweitungskonstanten, Rotations-Schwingungswechselwirkungskonstanten, Coriolis-Kopplungskonstanten, Gleichgewichtsstruktur und Literaturnachweise für Strukturdaten (B. STARCK)	2-82
2.5.1 Vorbemerkungen	2-82
2.5.2 Daten	2-86
a) Anorganische Moleküle	2-86
b) Methan-, Äthan-, Propan-, Butan-Derivate	2-116
c) Aliphatische Moleküle mit Doppel- und Dreifach-C-Bindungen	2-154
d) Moleküle mit zwei oder drei Kreiseln	2-183
e) Elementorganische Verbindungen	2-191
f) Gesättigte zyklische Verbindungen	2-202
g) Ungesättigte zyklische und aromatische Verbindungen	2-228
2.6 Dipolmomente	2-260
2.6.1 Zweiatomige Moleküle (R. TISCHER)	2-260
2.6.1.1 Vorbemerkungen	2-260
2.6.1.2 Daten	2-262
2.6.2 Lineare Moleküle und symmetrische Kreiselmoleküle (J. DEMAISON)	2-272
2.6.2.1 Vorbemerkungen	2-272
2.6.2.2 Daten	2-273
2.6.3 Asymmetrische Kreiselmoleküle (B. STARCK)	2-277
2.6.3.1 Vorbemerkungen	2-277
2.6.3.2 Daten	2-278

Table of contents

1	Introduction	1-1
1.1	General remarks	1-1
1.2	Review articles and tables	1-1
1.3	Arrangement of tables, substances and parameters	1-1
1.4	Selection of data	1-2
1.5	Abbreviations used for experimental and computation methods.	1-2
1.6	Selected fundamental constants and conversion factors	1-3
1.7	References	1-4
2	Constants of diamagnetic molecules	2-1
2.1	Survey	2-1
2.2	Diatomc molecules: Rotational constants, Dunham energy coefficients, centrifugal distortion constants, rotation-vibration interaction constants, isotopic mass ratios, and equilibrium internuclear separations (R. TISCHER)	2-1
2.2.1	Preliminary remarks	2-1
2.2.2	Data	2-5
2.3	Linear molecules: Rotational constants, centrifugal distortion constants, rotation-vibration interaction constants, <i>l</i> -type doubling constants, isotopic masses, Fermi resonance interaction constants, and references for structure data (J. DEMAISON)	2-38
2.3.1	Preliminary remarks	2-38
2.3.2	Data	2-40
2.4	Symmetric top molecules: Rotational constants, centrifugal distortion constants, rotation-vibration interaction constants, isotopic masses, <i>l</i> -type doubling constants, Coriolis coupling constants, and references for structure data (J. DEMAISON)	2-55
2.4.1	Preliminary remarks	2-55
2.4.2	Data	2-58
a)	Pyramidal molecules, XY_3	2-58
b)	Five atom molecules, XY_4 and XY_3Z , $X = C, Si, Ge, Sn$	2-60
c)	Other five atom molecules, XYZ_3	2-67
d)	XY_3 derivatives of linear molecules, $X = C, Si, Ge$	2-68
e)	Trimethyl compounds	2-72
f)	Symmetric two top molecules	2-74
g)	Miscellaneous symmetric top molecules	2-77
2.5	Asymmetric top molecules: Rotational constants, centrifugal distortion constants, rotation-vibration interaction constants, Coriolis coupling constants, equilibrium structure, and references for structure data (B. STARCK)	2-82
2.5.1	Preliminary remarks	2-82
2.5.2	Data	2-86
a)	Inorganic molecules	2-86
b)	Methane, ethane, propane, butane derivatives	2-116
c)	Aliphatic molecules with double and triple carbon bonds	2-154
d)	Molecules with two or three internal rotors	2-183
e)	Elemento-organic compounds	2-191
f)	Saturated cyclic compounds	2-202
g)	Unsaturated cyclic and aromatic compounds	2-228
2.6	Dipole moments	2-260
2.6.1	Diatomc molecules (R. TISCHER)	2-260
2.6.1.1	Preliminary remarks	2-260
2.6.1.2	Data	2-262
2.6.2	Linear and symmetric top molecules (J. DEMAISON)	2-272
2.6.2.1	Preliminary remarks	2-272
2.6.2.2	Data	2-273
2.6.3	Asymmetric top molecules (B. STARCK)	2-277
2.6.3.1	Preliminary remarks	2-277
2.6.3.2	Data	2-278

2.7 Quadrupolkopplungskonstanten	2-305
2.7.1 Zweiatomige Moleküle (R. TISCHER)	2-305
2.7.1.1 Vorbemerkungen	2-305
2.7.1.2 Daten	2-307
2.7.2 Lineare Moleküle und symmetrische Kreiselmoleküle (J. DEMAISON, W. HÜTTNER)	2-320
2.7.2.1 Vorbemerkungen	2-320
2.7.2.2 Daten	2-322
2.7.3 Asymmetrische Kreiselmoleküle (W. HÜTTNER, B. STARCK)	2-329
2.7.3.1 Vorbemerkungen	2-329
2.7.3.2 Daten	2-331
2.8 Gehinderte Rotation (B. STARCK)	2-360
2.8.1 Vorbemerkungen	2-360
2.8.2 Daten	2-362
a) C—C-Bindungen	2-362
b) C—Si-, C—Ge-, C—Sn-Bindungen	2-374
c) C—N-, C—P-, C—As-Bindungen	2-375
d) C—O-, C—S-, C—Se-Bindungen	2-378
e) Andere Bindungen	2-382
2.9 Magnetische Konstanten	2-383
2.9.1 Zweiatomige Moleküle: Spin-Rotationskonstanten, Kern-Spin-Spin-Kopplungskonstanten, g_J -Faktoren aus der Rotationsbewegung, magnetische Suszeptibilitäten, magnetische Abschirmungskonstanten und Molekelquadrupolmomente (R. TISCHER)	2-383
2.9.1.1 Vorbemerkungen	2-383
2.9.1.2 Daten	2-387
2.9.2 Lineare Moleküle und symmetrische Kreiselmoleküle: Rotationsinduzierte g-Faktoren, magnetische Suszeptibilitäten und Anisotropien, paramagnetische und diamagnetische Anteile, molekulare Quadrupolmomente, Elektronenladungsverteilung, Spin-Rotations- und Spin-Spin-Kopplungsparameter, Kern-g-Faktoren aus dem Rotations-Zeeman-Effekt und kernmagnetische Abschirmungsparameter aus dem Rotations-Zeeman-Effekt (W. HÜTTNER)	2-402
2.9.2.1 Vorbemerkungen	2-402
2.9.2.2 Daten	2-407
a) lineare Moleküle	2-407
b) symmetrische Kreiselmoleküle	2-412
2.9.3 Asymmetrische Kreiselmoleküle: Rotationsinduzierte g-Faktoren, magnetische Suszeptibilitäten und Anisotropien, paramagnetische und diamagnetische Anteile, molekulare Quadrupolmomente, Elektronenladungsverteilung, Spin-Rotations- und Spin-Spin-Kopplungsparameter, Kern-g-Faktoren aus dem Rotations-Zeeman-Effekt und kernmagnetische Abschirmungsparameter aus dem Rotations-Zeeman-Effekt (W. HÜTTNER)	2-423
2.9.3.1 Vorbemerkungen	2-423
2.9.3.2 Daten	2-424
3 Abbildungen (I. BUCK)	3-1
4 Literatur zu 2 und 3 (I. BUCK, B. STARCK, R. TISCHER)	4-1
5 Konstanten der Radikale	5-1
5.1 Zweiatomige Radikale (R. TISCHER)	5-1
5.1.1 Vorbemerkungen	5-1
5.1.2 Der ${}^2\Sigma$ -Elektronenzustand	5-6
5.1.2.1 Vorbemerkungen	5-6
5.1.2.2 Daten und Literatur	5-7
5.1.3 Der ${}^3\Sigma$ -Elektronenzustand	5-14
5.1.3.1 Vorbemerkungen	5-14
5.1.3.2 Daten und Literatur	5-16
5.1.4 Der ${}^1\Pi$ -Elektronenzustand	5-27
5.1.4.1 Vorbemerkungen	5-27
5.1.4.2 Daten und Literatur	5-28
5.1.5 Der ${}^2\Pi$ -Elektronenzustand	5-30
5.1.5.1 Vorbemerkungen	5-30
5.1.5.2 Daten und Literatur	5-33
5.1.6 Der ${}^3\Pi$ -Elektronenzustand	5-72
5.1.6.1 Vorbemerkungen	5-72
5.1.6.2 Daten und Literatur	5-73
5.1.7 Der ${}^1\Delta$ -Elektronenzustand	5-86
5.1.7.1 Vorbemerkungen	5-86
5.1.7.2 Daten und Literatur	5-87

2.7 Quadrupole coupling constants	2-305
2.7.1 Diatomic molecules (R. TISCHER)	2-305
2.7.1.1 Preliminary remarks	2-305
2.7.1.2 Data	2-307
2.7.2 Linear and symmetric top molecules (J. DEMAISON, W. HÜTTNER)	2-320
2.7.2.1 Preliminary remarks	2-320
2.7.2.2 Data	2-322
2.7.3 Asymmetric top molecules (W. HÜTTNER, B. STARCK)	2-329
2.7.3.1 Preliminary remarks	2-329
2.7.3.2 Data	2-331
2.8 Hindered rotation (B. STARCK)	2-360
2.8.1 Preliminary remarks	2-360
2.8.2 Data	2-362
a) C—C bonds	2-362
b) C—Si, C—Ge, C—Sn bonds	2-374
c) C—N, C—P, C—As bonds	2-375
d) C—O, C—S, C—Se bonds	2-378
e) Other bonds	2-382
2.9 Magnetic constants	2-383
2.9.1 Diatomic molecules: Spin-rotational constants, nuclear spin-spin coupling constants, rotational g_J -factors, magnetic susceptibilities, magnetic shielding constants, and molecular quadrupole moments (R. TISCHER)	2-383
2.9.1.1 Preliminary remarks	2-383
2.9.1.2 Data	2-387
2.9.2 Linear and symmetric top molecules: Rotational g -values, magnetic susceptibilities and anisotropies, paramagnetic and diamagnetic contributions, molecular quadrupole moments, electronic charge distributions, spin-rotation and spin-spin coupling parameters, nuclear g -values from the rotational Zeeman effect and nuclear magnetic shielding parameters from the rotational Zeeman effect (W. HÜTTNER)	2-402
2.9.2.1 Preliminary remarks	2-402
2.9.2.2 Data	2-407
a) linear molecules	2-407
b) symmetric top molecules	2-412
2.9.3 Asymmetric top molecules: Rotational g -values, magnetic susceptibilities and anisotropies, paramagnetic and diamagnetic contributions, molecular quadrupole moments, electronic charge distributions, spin-rotation and spin-spin coupling parameters, nuclear g -values from the rotational Zeeman effect and nuclear magnetic shielding parameters from the rotational Zeeman effect (W. HÜTTNER)	2-423
2.9.3.1 Preliminary remarks	2-423
2.9.3.2 Data	2-424
3 Figures (I. BUCK)	3-1
4 References for 2 and 3 (I. BUCK, B. STARCK, R. TISCHER)	4-1
5 Constants of radicals	5-1
5.1 Diatomic radicals (R. TISCHER)	5-1
5.1.1 Preliminary remarks	5-1
5.1.2 The ${}^2\Sigma$ electronic state	5-6
5.1.2.1 Preliminary remarks	5-6
5.1.2.2 Data and references	5-7
5.1.3 The ${}^3\Sigma$ electronic state	5-14
5.1.3.1 Preliminary remarks	5-14
5.1.3.2 Data and references	5-16
5.1.4 The ${}^1\Pi$ electronic state	5-27
5.1.4.1 Preliminary remarks	5-27
5.1.4.2 Data and references	5-28
5.1.5 The ${}^2\Pi$ electronic state	5-30
5.1.5.1 Preliminary remarks	5-30
5.1.5.2 Data and references	5-33
5.1.6 The ${}^3\Pi$ electronic state	5-72
5.1.6.1 Preliminary remarks	5-72
5.1.6.2 Data and references	5-73
5.1.7 The ${}^1\Delta$ electronic state	5-86
5.1.7.1 Preliminary remarks	5-86
5.1.7.2 Data and references	5-87

5.2 Dreiatomige Radikale (M. WINNEWISSE)	5-91
5.2.0 Einleitung	5-91
5.2.1 Lineare dreiatomige Radikale im Elektronengrundzustand $^2\Pi$	5-91
5.2.1.1 Vorbemerkungen	5-91
5.2.1.2 Daten und Literatur	5-94
5.2.2 Gewinkelte dreiatomige Radikale	5-98
5.2.2.1 Vorbemerkungen	5-98
5.2.2.2 Daten und Literatur	5-102
6 Nachtrag	6-1
7 Substanzenverzeichnis für Band II/4 und II/6 (B. STARCK)	7-1

Table of contents

XIII

5.2 Triatomic radicals (M. WINNEWISER)	5-91
5.2.0 Introduction	5-91
5.2.1 Linear triatomic radicals possessing a $^2\Pi$ electronic ground state	5-91
5.2.1.1 Preliminary remarks	5-91
5.2.1.2 Data and references	5-94
5.2.2 Bent triatomic radicals	5-98
5.2.2.1 Preliminary remarks	5-98
5.2.2.2 Data and references	5-102
6 Appendix	6-1
7 Index of substances for volume II/4 and II/6 (B. STARCK)	7-1

Erratum

(Received after printing)

CH₃—N=ND, Nr. 28a in Table 2.6.3, p. 2-282.
 $\mu = (0.67 \pm 0.10)$ D; $\mu_a = (0.45 \pm 0.02)$ D; $\mu_b = (0.50 \pm 0.10)$ D.
 Steinmetz, W.: J. Chem. Phys. **59** (1973) 3872.