

Objektyp: **ReferenceList**

Zeitschrift: **Bulletin de la Société Fribourgeoise des Sciences Naturelles =
Bulletin der Naturforschenden Gesellschaft Freiburg**

Band (Jahr): **54 (1964)**

PDF erstellt am: **30.06.2024**

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

(73)

$$\begin{aligned}
\rho(A) &= \frac{n}{N} (a_0 n_a + a_1 (n_a - 1) \Delta_{ab} + a_2 n_a \Delta_{bc} + a_3 n_a \Delta_{cd} + \dots + a_j n_a \Delta_{gh}) \\
\rho(B) &= \frac{n}{N} (a_0 n_b + a_1 (n_b - 1) \Delta_{ab} + a_2 (n_b - 1) \Delta_{bc} + a_3 n_b \Delta_{cd} + \dots + a_j n_b \Delta_{gh}) \\
\rho(C) &= \frac{n}{N} (a_0 n_c + a_1 n_c \Delta_{ab} + a_2 (n_c - 1) \Delta_{bc} + a_3 (n_c - 1) \Delta_{cd} + a_4 n_c \Delta_{de} + \dots \\
&\quad \dots + a_j n_c \Delta_{gh}) \\
\rho(AB) &= \frac{n}{N} \cdot 2a_1 \Delta_{ab} \qquad \rho(BC) = \frac{n}{N} 2a_2 \Delta_{bc}, \dots
\end{aligned}$$

Der Normierungsfaktor ist hier

$$N = n(a_0 + a_1 \Delta_{ab} + a_2 \Delta_{bc} + \dots + a_j \Delta_{gh}) \quad (74)$$

Da die Atomindizes in (73) für eine offene Kette von Atomen gelten, kommt der Faktor $(n_a - 1)$ in $\rho(A)$ nur einmal vor, während man in $\rho(B)$ und $\rho(C)$ die entsprechenden $(n_b - 1)$ bzw. $(n_c - 1)$ je zweimal vorfindet. Wollte man die Kette auf das Atom A schließen, so würden in (68) weitere Zeilen hinzukommen, die dem Austausch δ_{ha} entsprechen und damit würde auch in $\rho(A)$ ein zweiter Faktor $(n_a - 1)$ auftreten.

Literatur für Kapitel I

- A. EUCKEN, Lehrbuch der chemischen Physik, 2. Aufl., Bd. I, Leipzig 1938.
H. EYRING, J. WALTER und G. E. KIMBALL, Quantum Chemistry, New York 1944.
S. GLASSTONE, Theoretical Chemistry, New York 1944.
P. GOMBÁS, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Basel 1950.
H. HARTMANN, Theorie der chemischen Bindung, Berlin 1954.
W. HEITLER, Elementare Wellenmechanik, Braunschweig 1961.
H. HELLMANN, Einführung in die Quantenchemie, Leipzig 1937.
K. JELLINEK, Verständliche Elemente der Wellenmechanik, Basel 1951.
L. PAULING und E. B. WILSON, Introduction to Quantum Mechanics, New York 1935.
B. und A. PULLMAN, Les théories électroniques de la chimie organique, Paris 1952.
C. SCHAEFER, Einführung in die theoretische Physik, Bd. III/2, Berlin 1951.
G. W. WHELAND, Resonance in Organic Chemistry, New York 1955.