

Spis treści

Przedmowa	7
Rozdział 1. Krótki zarys teorii grup	9
1.1. Grupy	9
1.2. Operacje symetrii cząsteczek	11
1.3. Punktowe grupy symetrii	14
1.4. Przedstawienie operacji symetrii za pomocą macierzy	18
1.5. Reprezentacje grupy	21
1.6. Charaktery reprezentacji	27
1.7. Przekształcenia funkcji falowych	32
1.8. Zastosowania teorii grup w mechanice kwantowej	35
1.9. Iloczyn prosty reprezentacji	44
Rozdział 2. Rozdzielenie ruchu jąder i elektronów w cząsteczce	48
Rozdział 3. Struktura elektronowa cząsteczki	54
3.1. Dwuatomowe cząsteczki homojądrowe	57
3.1.1. Postać orbitali molekularnych	57
3.1.2. Kolejność energetyczna orbitali molekularnych	65
3.1.3. Stany elektronowe cząsteczek	74
3.1.4. Energie stanów elektronowych	80
3.2. Dwuatomowe cząsteczki heterojądrowe	83
3.2.1. Postać orbitali molekularnych	83
3.2.2. Kolejność energetyczna orbitali molekularnych i stany elektronowe cząsteczek	87
3.3. Cząsteczki liniowe	92
3.4. Cząsteczki wieloatomowe	97
3.4.1. Cząsteczka H_2O	97
3.4.2. Cząsteczki węglowodorów	104
3.4.3. Cząsteczka benzenu	107
3.4.4. Cząsteczki polienów	115
Rozdział 4. Ruch jąder w cząsteczce — oscylacje i rotacje	119
4.1. Cząsteczki dwuatomowe	119
4.1.1. Oscylacje jąder	123

4.1.2. Rotacja cząsteczki	128
4.1.3. Struktura energetyczna cząsteczki dwuatomowej	133
4.2. Cząsteczki wieloatomowe: energia rotacyjna	135
4.3. Cząsteczki wieloatomowe: energia oscylacyjna	143
4.3.1. Opis klasyczny	143
4.3.2. Drgania cząsteczek symetrycznych	152
4.3.3. Opis kwantowy	156
4.3.4. Powierzchnie potencjalne z wieloma minimami	162
4.3.5. Oddziaływanie Coriolisa	165
Rozdział 5. Widma cząsteczkowe	167
5.1. Widma rotacyjne	169
5.2. Widma oscylacyjne	177
5.2.1. Zmiana poziomu oscylacyjnego	177
5.2.2. Przejścia oscylacyjno-rotacyjne	183
5.3. Przejścia elektronowe	187
5.4. Zanik wzbudzenia w cząsteczce	193
5.5. Widma ramanowskie	195
Literatura	203
Literatura uzupełniająca	203
Skorowidz	204