6. Spektroskopia elektronowa

6.1. Cząsteczki dwuatomowe

$\lambda = |m_e| = 0, 1, \ldots, e$

$\sigma, \pi, \delta, \varphi, \ldots$

$\sigma_g, \sigma_u, \pi_g, \pi_u, \ldots$

$\sigma^*, \pi^*, \ldots$

$\sigma_g 1s, \pi_g 2p, \ldots$

$\psi = \sum_i c_i \psi_i$ (LCAO)

$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 \pm \psi_2)$

$L_z = \pm \Lambda \hbar \qquad \Lambda = \left|\sum_i \lambda_i\right|$

$\Lambda = 0, 1, 2, \ldots$

$\Sigma \; \Pi \; \Delta$

$\Sigma_g^+, \Sigma_u^-, \Pi_g$

$S_z = \Sigma \hbar \qquad \Sigma = S, S-1, \ldots, -S$

$\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ (2S+1) stanów

$^{2S+1}\Lambda_\Omega$

— reguły wyboru dla przejść $\Delta S = 0$

$\Delta S = 0$

$\Delta \Lambda = 0, \pm 1 \qquad \bar{\Sigma} \leftrightarrow \bar{\Sigma}, \; \Sigma \leftrightarrow \bar{\Pi}$

$\Sigma^+ \to \Sigma^+ \qquad \Sigma^- \to \Sigma^-$

$g \leftrightarrow u$

$\Gamma(\psi_e') \times \Gamma(\psi_e'') \supset \Gamma(T_i)$

$i = x, y, z$

$D_{\infty h}$

$\Gamma(T_z) = \bar{\Sigma}_u^+, \quad \Gamma(T_x) = \Gamma(T_y) = \bar{\Pi}_u$

$C_{\infty v}$

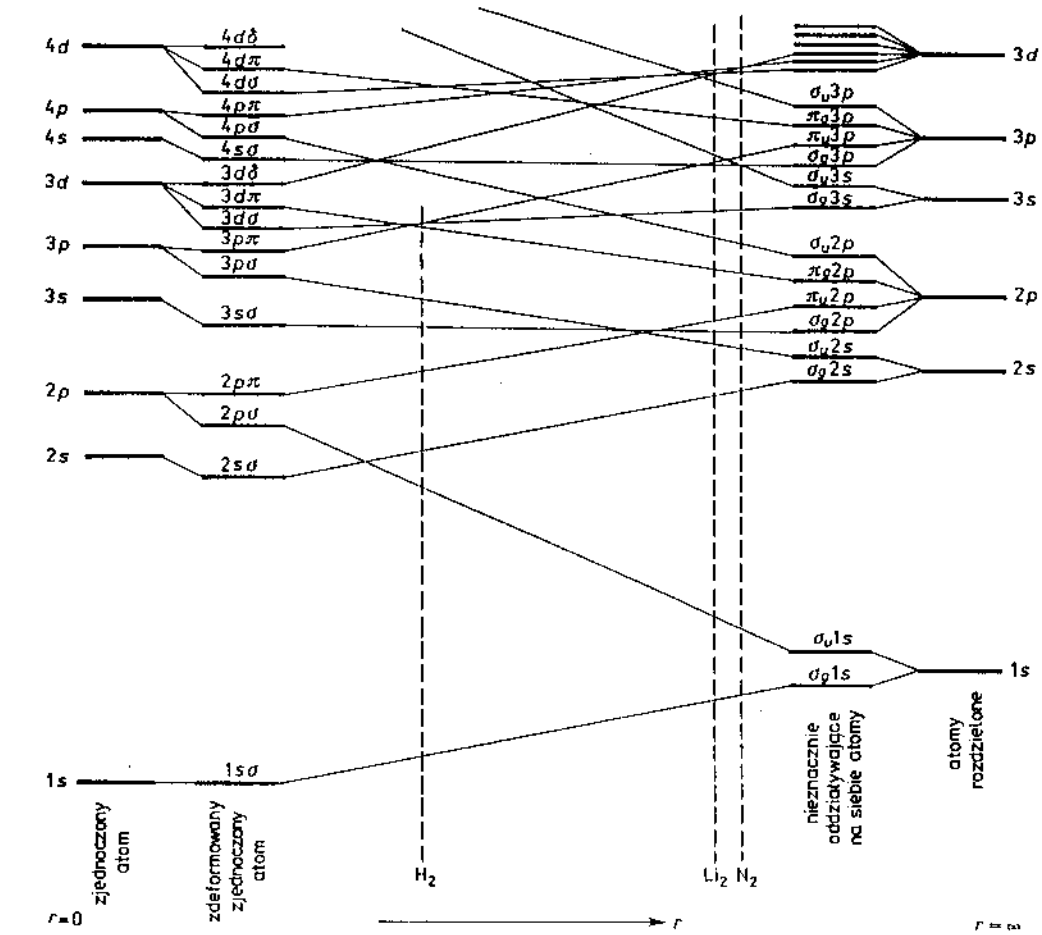
$\Gamma(T_z) = \bar{\Sigma}^+, \quad \Gamma(T_x) = \Gamma(T_y) = \bar{\Pi}$

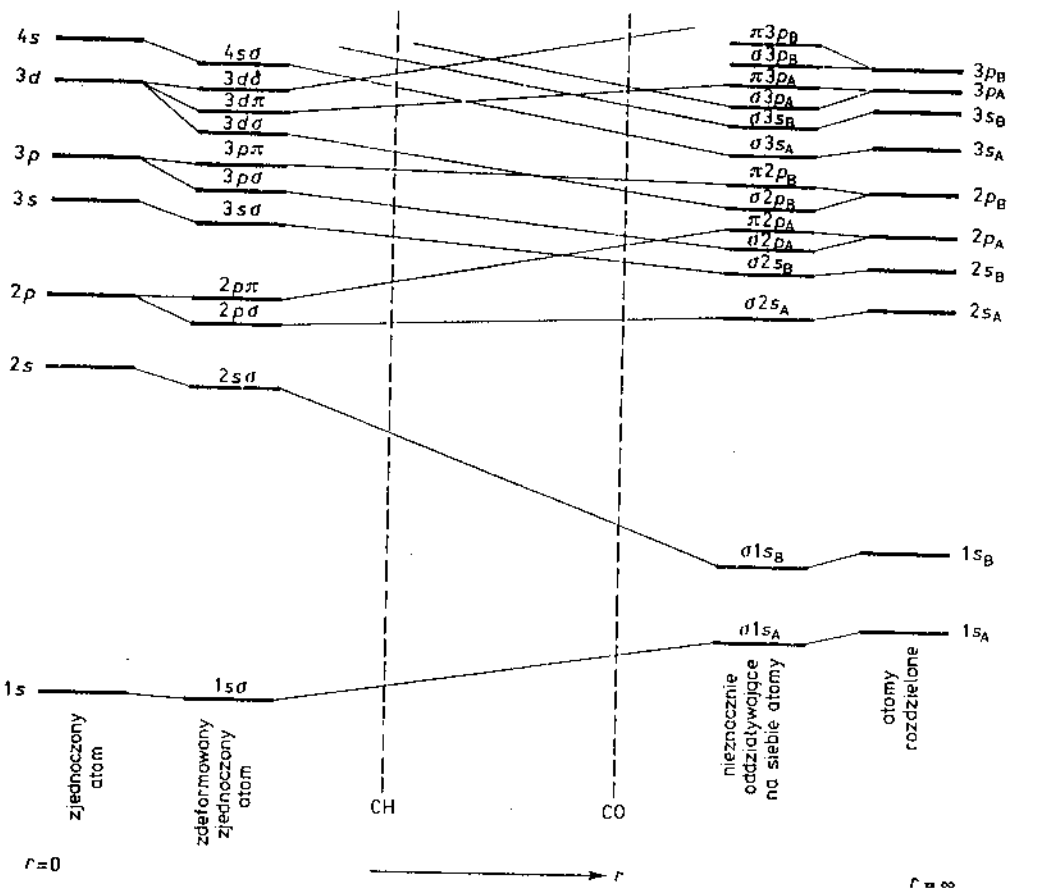
$\Delta_g \times \bar{\Pi}_u = \bar{\Pi}_u + \phi_u$

$\Delta S = \pm 1$

N_2

$A^3\Sigma_u^+ \to X^1\Sigma_g^+$ Vegarda-Kaplana


4d
4p
4s
3d
3p
3s
2p
2s
1s
4dδ
4dπ
4dσ
4pπ
4pσ
4sσ
3dδ
3dπ
3dσ
3pπ
3pσ
3sσ
2pπ
2pσ
2sσ
1sσ
3d
3p
3s
2p
2s
1s
σu3p
πg3p
πu3p
σg3p
σu3s
σg3s
σu2p
πg2p
πu2p
σg2p
σu2s
σg2s
σu1s
σg1s
zjednoczony atom
zdeformowany zjednoczony atom
H2
Li2 N2
nieznacznie oddziaływające na siebie atomy
atomy rozdzielone
r=0
r


4s
3d
3p
3s
2p
2s
1s
4sσ
3dδ
3dπ
3dσ
3pπ
3pσ
3sσ
2pπ
2pσ
2sσ
1sσ
π3pB
σ3pB
π3pA
σ3pA
σ3sB
σ3sA
π2pB
σ2pB
π2pA
σ2pA
σ2sB
σ2sA
σ1sB
σ1sA
3pB
3pA
3sB
3sA
2pB
2pA
2sB
2sA
1sB
1sA
zjednoczony atom
zdeformowany zjednoczony atom
CH
CO
nieznacznie oddziaływające na siebie atomy
atomy rozdzielone
r=0
r