

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Введение	9

Часть I

ГЕОМЕТРИЯ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ

Глава 1. Равновесная конфигурация молекулы	20
Общие свойства и количественная характеристика равновесной конфигурации молекулы	21
Основные представления о расположении атомов в молекуле	22
Свободное вращение и взаимное расположение частей молекулы	31
Методы определения расстояний между атомами в молекулах	33
Формы молекул и численные значения расстояний между атомами и углов между связями	35
Выводы о форме молекул на основании свойств колебаний	43
Математическая характеристика равновесной конфигурации молекул	43
Глава 2. Симметрия равновесной конфигурации	47
Общие понятия теории групп и точечные группы симметрии	49
Классификация групп симметрии	61
Классификация эквивалентных расстояний и углов	82
Глава 3. Колебательные координаты	87
Введение естественных колебательных координат	87
Классификация колебаний молекул	90
Выражения естественных координат q и γ через смещения атомов	99
Вывод дополнительных соотношений между естественными координатами	101
Выражения естественных координат p и χ через смещения атомов	104
Глава 4. Симметрия колебаний	111
Эквивалентные естественные координаты	111
Координаты симметрии	114
Типы колебаний и координаты симметрии для простейших групп	125
Типы колебаний и координаты симметрии для групп с выделенной осью симметрии порядка не ниже третьего	132
Типы колебаний и координаты симметрии для групп с несколькими осями симметрии порядка не ниже третьего	153
Координаты симметрии для других видов естественных координат	159
Неприводимые представления групп симметрии и типы симметрии колебаний	160
Определение коэффициентов симметрии	176

Часть II

МЕХАНИКА КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ

Глава 5. Уравнения движения и вековое уравнение для колебаний многоатомной молекулы	179
Кoeffициенты взаимодействия	182
Свойства инвариантности коэффициентов взаимодействия	185
Нормальные координаты	189
Учёт свойств симметрии при решении колебательной задачи	194
Доказательство основной формулы (5.84)	201
Основные этапы решения задачи о колебаниях	204
Глава 6. Определение коэффициентов взаимодействия	205
Метод определения кинематических коэффициентов	205
Кoeffициенты кинематического взаимодействия естественных координат q и γ	208
Таблицы коэффициентов кинематического взаимодействия	211
Кинематические коэффициенты для неплоских и вращательных колебаний	221
Определение динамических коэффициентов и два основных типа задач	223
Число постоянных потенциальной энергии и возможность их определения из известных значений частот колебаний	224
Классификация динамических коэффициентов	226
Учёт дополнительных соотношений между координатами	230
Глава 7. Составление вековых уравнений	233
Учёт свойств симметрии для коэффициентов полного взаимодействия	235
Учёт свойств симметрии для коэффициентов кинематического и динамического взаимодействия	247
Учёт дополнительных соотношений между координатами	254
Составление и свойства вековых уравнений для изотопических молекул	269
Глава 8. Решение вековых уравнений и определение формы колебаний	271
Упрощение векового уравнения путём преобразования координат	271
Метод последовательной диагонализации	279
Определение формы нормальных колебаний	294
Методы итерации	297
Метод Гопштейна	299
Метод Маянца	303
Зависимость частот и формы колебаний от различных параметров	319
Нормировка и амплитуды нормальных колебаний	324
Размерность коэффициентов и применяемая система единиц	326
Глава 9. Методы определения постоянных потенциальной энергии	331
Число постоянных и число частот	331
Основные гипотезы	335
Принципы расчёта	340
Обзор работ по расчёту постоянных	341

Глава 10. Постоянные потенциальной энергии и спектры метана и этана	346
Вековые уравнения метана и его дейтеропроизводных	346
Определение постоянных	350
Форма колебаний молекулы метана	353
Постоянные потенциальной энергии этана	359
Вековое уравнение этана	363
Расчёт постоянных этана	367
Глава 11. Постоянные потенциальной энергии и спектры производных метана и этана	372
Галоидопроизводные метана	372
Смешанные галоидопроизводные метана	385
Изотопический эффект в CCl_4 и CH_3Cl	394
Метиловый спирт	400
Меркаптан	405
Аммиак	406
Туннельный эффект в молекуле аммиака	410
Метиламин	416
Глава 12. Постоянные потенциальной энергии и спектр этилена	418
Вековые уравнения	418
Определение постоянных	422
Глава 13. Методика быстрого расчёта частот сложных молекул	430
Таблицы полных коэффициентов взаимодействия для быстрого составления вековых уравнений	430
Упрощение вековых уравнений сложных молекул путём использования приближённой симметрии	441
Учёт периодичности в строении молекулы	447
Приближённые методы расчёта частот	451
Таблицы для составления приближённых вековых уравнений в координатах приближённой симметрии	453
Приближённый расчёт спектра бутана	468
Глава 14. Расчёт и интерпретация спектров сложных молекул	476
Пропан	476
Бутан	480
Пентан	483
Поворотные изомеры нормальных парафинов	487
Изобутан	495
Изопентан	500
Тетраметилметан	506
Частоты групп CH_3 , CH_2 и CH	508
Галоидозамещённые этана	514
Глава 15. Силовая модель молекулы	532
Модели валентных и центральных сил	532
Вычисление постоянных галоидометанов для модели центральных сил	534
Зависимость частот колебаний от величины постоянных взаимодействия	536

Влияние постоянных взаимодействий на величину полных коэффициентов	548
Глава 16. Квантовомеханическая теория колебаний и учёт ангармоничности	552
Решение квантовомеханической задачи для гармонических колебаний двухатомной молекулы	553
Учёт ангармоничности для колебаний двухатомной молекулы	558
Задача о колебаниях большой амплитуды.	566
Решение квантовомеханической задачи для гармонических колебаний многоатомных молекул	572
Учёт ангармоничности для колебаний многоатомной молекулы	578
Резонансное расщепление	592