

Spis treści

Rozdział 1. Ogólne podstawy spektroskopii	11
1.1. Natura promieniowania elektromagnetycznego	11
1.2. Cechy promieniowania i jego widmo	13
1.3. Energia molekuł	15
1.3.1. Formy energii molekuł	15
1.4. Kwantowanie energii	18
1.5. Rozkład energii w stanie równowagi termicznej	20
1.6. Prawdopodobieństwo absorpcji i emisji promieniowania	24
1.7. Czynniki determinujące kształt i szerokość konturu pasma	27
1.8. Parametry pasma spektralnego	30
1.9. Rodzaje spektroskopii	34
1.10. Zastosowanie transformacji Fouriera w spektroskopii	34
Rozdział 2. Widmo rotacyjne	38
2.1. Energia rotacji molekuł	38
2.2. Oddziaływanie promieniowania z rotującymi molekułami	43
2.3. Aparatura do rejestracji widma rotacyjnego	44
2.4. Badania struktury molekuł na podstawie widma rotacyjnego	45
2.4.1. Molekuły dwuatomowe	46
2.4.2. Molekuły wieloatomowe liniowe	48
2.4.3. Molekuły wieloatomowe nieliniowe	50
2.5. Zastosowania mikrofalowej spektroskopii rotacyjnej	55
Rozdział 3. Widmo oscylacyjne	56
3.1. Model oscylatora harmonicznego	56
3.2. Energia oscylacji molekuł	59
3.2.1. Molekuła jako oscylator anharmoniczny	60
3.3. Częstości oscylacji a struktura molekuły	66
3.3.1. Molekuły dwuatomowe	66
3.3.2. Współrzędne wewnętrzne w molekułach wieloatomowych	68
3.3.3. Obliczanie stałych siłowych i częstości drgań	71
3.3.4. Współrzędne normalne	74
3.3.5. Rodzaje drgań normalnych	78
3.3.6. Rodzaje przejść między energetycznymi poziomami oscylatorów	79
3.3.7. Sprzężenia oscylatorów i rezonanse drgań	80

3.4.	Oddziaływanie promieniowania z oscylującymi molekułami	84
3.4.1.	Prawdopodobieństwo absorpcji promieniowania przez oscylatory molekularne	84
3.4.2.	Intensywność pasm absorpcyjnych	87
3.4.3.	Rozpraszanie promieniowania	92
3.4.4.	Widmo Ramana	94
3.4.5.	Intensywność rozproszenia ramanowskiego	99
3.4.6.	Polaryzacja promieniowania rozproszonego	103
3.4.7.	Zastosowanie teorii grup w określaniu reguł wyboru	107
3.5.	Aparatura do rejestracji widm oscylacyjnych	126
3.5.1.	Spektrometry podczerwieni	126
3.5.2.	Metodyka spektroskopii podczerwieni	130
3.5.3.	Spektrometry podczerwieni z transformacją Fouriera	134
3.5.4.	Spektrometry ramanowskie	138
3.5.5.	Metodyka spektroskopii Ramana	140
3.6.	Zastosowania spektroskopii oscylacyjnej	143
3.6.1.	Charakterystyczność częstości i intensywności pasm	143
3.6.2.	Przejawy oddziaływań wewnątrzmolekularnych w widmach oscylacyjnych	147
3.6.3.	Przejawy oddziaływań międzymolekularnych w widmach oscylacyjnych	148
3.6.4.	Analiza składu mieszanin za pomocą widm oscylacyjnych	152
Rozdział 4. Widmo oscylacyjno-rotacyjne		156
4.1.	Oscylacyjno-rotacyjne poziomy energetyczne	157
4.2.	Reguły wyboru	159
4.3.	Zastosowania spektroskopii oscylacyjno-rotacyjnej	160
Rozdział 5. Widmo elektronowe		162
5.1.	Charakterystyka stanów elektronowych	162
5.1.1.	Kwantowanie momentu pędu	163
5.1.2.	Spin elektronu	164
5.1.3.	Wektorowy model atomu	164
5.1.4.	Funkcje falowe stanów elektronowych w atomach	166
5.1.5.	Stany elektronowe w molekułach	168
5.2.	Energia stanów elektronowych	170
5.3.	Oddziaływanie promieniowania ze stanami elektronowymi	179
5.3.1.	Reguły wyboru przejść elektronowych	180
5.3.2.	Intensywność pasm elektronowych	180
5.4.	Aparatura do rejestracji widm elektronowych	182
5.4.1.	Spektrofotometr do rejestracji widm w obszarze widzialnym i w bliskim nadfiolecie	183
5.4.2.	Metodyka spektroskopii obszaru widzialnego i nadfioletu	184
5.5.	Zastosowania spektroskopii elektronowej	185
5.5.1.	Proste molekuły w stanie gazowym	185
5.5.2.	Molekuły wieloatomowe. Typy chromoforów	188
5.5.3.	Przejścia z przeniesieniem ładunku	192
5.5.4.	Przejścia typu $d-d$	193
5.5.5.	Przejawy oddziaływań wewnątrz- i międzymolekularnych w widmie elektronowym	197
5.5.6.	Analiza składu mieszanin za pomocą widma elektronowego	199
5.6.	Fluorescencja i fosforescencja	201
Rozdział 6. Widma fotoelektronów		205
6.1.	Bilans energetyczny przejść fotoelektronowych	205
6.2.	Zasady działania spektrometru fotoelektronowego	206

6.3. Spektroskopia fotoelektronów UV	207
6.4. Spektroskopia fotoelektronów rentgenowskich	209
6.5. Spektroskopia elektronów Augera	213
6.6. Spektroskopia fotoelektronów z powierzchni ciał stałych	214
Rozdział 7. Spektrometria mas	216
7.1. Zasady działania aparatury	216
7.1.1. Jonowy rezonans cyklotronowy	220
7.2. Metody jonizacji badanych substancji	221
7.2.1. Bombardowanie elektronami	221
7.2.2. Jonizacja chemiczna	222
7.2.3. Bombardowanie szybkimi atomami (FAB)	222
7.2.4. Bombardowanie jonami	223
7.2.5. Jonizacja przez desorpcję polem	223
7.2.6. Desorpcja przez promieniowanie laserowe	223
7.3. Wprowadzanie próbek do komory jonizacyjnej	224
7.4. Wpływ obecności izotopów na widmo mas	224
7.5. Określenie zdolności rozdzielczej spektrometru	226
7.6. Drogi fragmentacji jonów	227
Rozdział 8. Działanie pola magnetycznego na substancje	231
8.1. Moment pędu i moment magnetyczny elektronów	233
8.2. Moment pędu i moment magnetyczny jąder	236
8.3. Rezonans magnetyczny	239
8.4. Obsadzenie spinowych poziomów energetycznych	242
Rozdział 9. Jądrowy rezonans magnetyczny	243
9.1. Ekranowanie jądra i przesunięcie chemiczne	243
9.2. Sprzężenie spinowo-spinowe	251
9.3. Procesy relaksacji	264
9.3.1. Przebieg relaksacji	268
9.4. Aparatura NMR o wysokiej zdolności rozdzielczej	272
9.4.1. Rejestracja widm NMR metodą fali ciągłej	274
9.4.2. Rejestracja widm NMR metodą impulsową	274
9.5. Metodyka badań widm NMR	276
9.6. Wpływ efektów dynamicznych na widmo NMR	278
9.6.1. Wiązanie wodorowe i chemiczna wymiana protonów	279
9.6.2. Wewnętrzna rotacja	283
9.6.3. Rezonans protonów związanych z atomem azotu	284
9.7. Spektroskopia ^{13}C NMR	285
9.7.1. Jądrowy efekt Overhausera (NOE)	286
9.7.2. Charakterystyka spektroskopii ^{13}C NMR	287
9.8. Rezonans innych jąder	288
9.9. NMR o wysokiej zdolności rozdzielczej w ciałach stałych	291
9.10. Zastosowanie NMR w biologii i medycynie	294
Rozdział 10. Elektronowy rezonans paramagnetyczny	297
10.1 Rodzaje centrów paramagnetycznych	297
10.2. Aparatura do rejestracji widm EPR	298
10.2.1. Metodyka badań widm EPR	299
10.3. Anizotropia współczynnika rozszczepienia spektroskopowego	304
10.4. Sprzężenia spinowo-spinowe	305
10.4.1. Struktura nadsubtelna sygnałów EPR	307

10.4.2. Struktura subtelna sygnałów EPR	311
10.5. Procesy relaksacji	313
10.6. Przesunięcia kontaktowe sygnałów NMR w układach paramagnetycznych	316
10.7. Zastosowania EPR w chemii	319
Stale fizyczne	323
Podręczniki i monografie	325
Skorowidz rzeczowy	327
Skorowidz związków chemicznych	335