

SPIS TREŚCI

1. Wstęp	5
2. Podstawy komputerowego opracowania widm elektronowych	7
2.1. Transformacja wielkości spektralnych	9
2.2. Numeryczne wygładzanie krzywych spektralnych	12
2.3. Określanie położenia pasm absorpcyjnych	15
3. Metody rozkładu widm na pasma składowe	18
3.1. Kształt i analiza pasm w elektronowych widmach absorpcyj- nych	31
3.2. Zagadnienie niejednoznaczności rozkładu widm absorpcyj- nych	43
4. Metoda określenia parametrów pasm w elektronowych widmach ab- sorpcyjnych	45
4.1. Interpretacja widm związków kompleksowych pierwiastków d ^q -elektronowych: q = 2,3,5,7,8,	46
5. Opisy programów	65
5.1. Rozkład widm absorpcyjnych metodą najmniejszych kwadratów	65
5.2. Obliczanie parametrów pola ligandów Dq, B, C, Ds, Dt dla określonych konfiguracji d ^q -elektronowych związków kom- pleksowych o symetrii O _h i D _{4h}	67
Literatura	69