

A. 53- 200
T.2 EX.1

SPECTROSCOPIE ATOMIQUE ET MOLÉCULAIRE

par

P. BARCHEWITZ

Professeur à la Faculté des Sciences
de Paris



A.53-200 T.2 EX.1

TOME II

SPECTROSCOPIE MOLÉCULAIRE

MASSON et C^{ie} - Éditeurs
120, bd Saint-Germain - Paris VI^e

1971

TABLE DES MATIÈRES

AVANT-PROPOS.....	V
-------------------	---

TROISIÈME PARTIE

Énergies et fonctions d'état

CHAPITRE PREMIER. — <i>Symétrie moléculaire. Théorie des groupes</i>	3
Généralités	3
Opérations de symétrie (3); Groupes de symétrie (5); Principaux groupes de symétrie moléculaire (6).	
Représentation d'un groupe	9
Les représentations irréductibles. Théorie des caractères (10).	
Tableaux de caractères d'un groupe ponctuel	13
CHAPITRE II. — <i>Hamiltonien moléculaire</i>	18
Hypothèse de Born et Oppenheimer.....	18
Valeurs propres et fonctions propres de l'opérateur H (18); symétrie de la fonction d'état totale Ψ (21).	
Rotation et vibrations moléculaires	25
CHAPITRE III. — <i>Rotation moléculaire</i>	28
Étude du rotateur rigide.....	28
Hamiltonien de rotation (28); Angles d'Euler (30); Opérateurs M_x et M_y (33).	
Énergie des niveaux de rotation	39
Cas des toupies sphériques (40); Cas des toupies symétriques (40); Cas des toupies asymétriques (43); Cas des molécules linéaires (45).	
CHAPITRE IV. — <i>Vibrations moléculaires</i>	48
Étude des vibrations moléculaires en mécanique classique	48
Coordonnées cartésiennes (48); Coordonnées internes (52).	
Vibrations moléculaires en mécanique quantique	55
Coordonnées normales (55); Passage en mécanique quantique. Oscillateur à une dimension (59); Cas de l'oscillateur anharmonique à une dimension (64); Oscillateur harmonique à deux dimensions (ou doublement dégénéré) (67); Oscillateur harmonique à trois dimensions (ou triplement dégénéré) (72).	

Dénombrement des vibrations moléculaires fondamentales	77
Action d'une opération sur les coordonnées normales (77); Dénombrement des vibrations moléculaires (79); Levée de dégénérescence d'un niveau dégénéré (84).	
CHAPITRE V. — <i>Vibration-rotation moléculaire</i>	86
Hamiltonien de vibration-rotation	86
Énergies et fonctions d'état rovibrationnelles	91
Molécules toupies symétriques (91); Fonctions d'état rovibrationnelles des molécules linéaires (96).	
QUATRIÈME PARTIE	
<i>Types de symétrie des fonctions d'état. Règles de sélection. Intensité</i>	
CHAPITRE PREMIER. — <i>Propriétés de symétrie des fonctions d'état vibrationnelles</i>	103
Généralités	103
Types de symétrie moléculaire et notations spectroscopiques (105).	
Propriétés de symétrie et types de symétrie des fonctions d'état vibrationnelles	106
Oscillateur non dégénéré (106); Oscillateur doublement dégénéré (108); Cas général (112); Produit direct (117); Effet tunnel (119).	
CHAPITRE II. — <i>Propriétés et types de symétrie des fonctions rotationnelles</i> ...	124
Généralités	124
Transformation des angles d'Euler (125).	
Propriétés de symétrie des fonctions d'état rotationnelles	127
Propriétés de symétrie des fonctions rotationnelles des toupies symétriques (127); Propriétés de symétrie des fonctions rotationnelles des molécules linéaires (131).	
CHAPITRE III. — <i>Propriétés et types de symétrie des niveaux rovibrationnels</i> ...	134
Toupies symétriques	134
Propriétés de symétrie des fonctions rovibrationnelles des toupies symétriques (134); Types de symétrie des niveaux énergétiques rovibrationnels des toupies symétriques (135);	
Type de symétrie des niveaux rovibrationnels de la molécule NH_3 (C_{3v}) dans le cas d'inversion (D_{3h})	139
Molécules linéaires (groupe $C_{\infty v}$, $D_{\infty h}$)	142
Dédoublement l (146).	
Poids statistique (degré de dégénérescence de spin) des niveaux rovibrationnels. Fonctions d'état totales	148
Cas des toupies symétriques (149); Cas des molécules linéaires (157).	
CHAPITRE IV. — <i>Règles de sélection. Spectres</i>	158
Généralités	158
Types de symétrie de μ_A (158).	
Règles de sélection rotationnelles	161
Éléments matriciels des opérateurs Φ_{Ax} (164); Transitions rotationnelles (173).	

Spectres de rotation pure	176
Règles de sélection vibrationnelles	177
Cas de la molécule H_2O (C_{2v}) (178); Cas des molécules toupies symétriques (179); Cas des molécules linéaires (181); Harmonicité et anharmonicité mécanique et électrique (184).	
Règles de sélection rovibrationnelles	190
Toupies symétriques	190
Molécules linéaires	200
Transitions rovibrationnelles des molécules linéaires (200); Spectres de vibration-rotation des molécules linéaires (203).	
CHAPITRE V. — <i>Intensité des raies</i>	214
Généralités	214
Intensité d'une bande d'absorption et intensité des raies (214).	
Calcul des moments de transition	220
Cas des toupies symétriques (220); Cas des molécules linéaires (228).	
Intensité des raies	229
Cas des molécules diatomiques (230).	

CINQUIÈME PARTIE

Électronique

CHAPITRE PREMIER. — <i>Molécule diatomique à un seul électron</i>	235
Ion moléculaire H_2^+	235
CHAPITRE II. — <i>Molécule diatomique à plusieurs électrons</i>	249
Molécule H_2	259
Configuration électronique et orbitale moléculaire	253
Symétrie des orbitales moléculaires (255); Diagramme de corrélation des molécules diatomiques (259).	
État électronique et configuration électronique	261
Corrélation entre les états électroniques moléculaires et les états atomiques (263); États électroniques d'une molécule diatomique. Multiplicité (266).	
CHAPITRE III. — <i>Équation de Schrodinger d'une molécule diatomique</i>	270
Énergies et fonctions d'état	270
Hamiltonien rotationnel d'une molécule excitée électroniquement (272); Énergie rotationnelle (273); Fonctions d'état rovibroniques (274).	
Types de symétrie des fonctions orbitales moléculaires	276
États rovibroniques des molécules diatomiques	279
Couplage entre le mouvement électronique et la rotation de la molécule compte tenu du spin (279); Caractères de symétrie des niveaux rotationnels de quelques états électroniques (282).	
Ouvrages recommandés	299
Index alphabétique des matières	301