

目 录

导 论	1
第一篇 分子对称性与分子光谱	9
第一章 综论	11
§1 分子点群	12
§2 CNPI 群和 MS 群	14
第二章 分子的 Hamiltonian 群	19
§1 分子的 Hamiltonian	19
§2 Hamiltonian 群	20
§3 Hamiltonian 群的表示	24
§4 基函数	25
§5 H ₂ 和 D ₂	26
§6 NH ₃ 和 ND ₃	28
第三章 CNPI 和 MS 群	31
§1 CNPI 群和分子点群	31
§2 等价平衡构型	32
§3 MS 群	33
§4 CNPI 群和 MS 群的关系	36
§5 相关表	39
第四章 非刚性分子的光谱举例	42
§1 CH ₃ BF ₂ 分子及其光谱	42
§2 CH ₃ -CH ₃ 分子及其光谱	48
§3 N ₂ H ₄ 分子及其光谱	51
第二篇 多原子分子振转光谱的量子化学计算	55
第五章 多原子分子振转动能算符的表达式	57
§1 Eckart 条件下分子振转动能算符的表达式	57
§2 多原子分子振转动能算符的严格量子力学表达式	65
§3 三原子分子振转动能算符的统一表达式	70
第六章 三原子分子振转高激发态的理论研究	79
§1 三原子分子的势能函数	79
§2 确定振转高激发态能级和波函数的 SCF-CI 方法	82
§3 求解振转问题的 SCF-CI 方法	90

第三篇 李代数方法在分子振转光谱研究中的应用	101
第七章 综论	103
§1 用李代数方法求解振转光谱的实例	103
§2 李代数方法在分子光谱研究中的应用	107
§3 动力学对称性简介	108
第八章 振子模型理论方法在分子振转光谱研究中的应用	112
§1 振子模型理论方法在双原子分子振转光谱研究中的应用	112
§2 振子模型理论方法在三原子分子振转光谱研究中的应用	117
第九章 李代数方法在多原子分子振转光谱研究中的应用	128
§1 n 个耦合非谐性振子模型及其应用	128
§2 局域模李代数方法在分子振转光谱中的应用	131
第四篇 红外光谱与 Raman 光谱	143
第十章 红外光谱	145
§1 红外光谱发展的历史回顾	145
§2 色散型与 Fourier 变换红外光谱仪器的比较.....	149
§3 Fourier 变换红外光谱仪的基本原理	150
§4 Fourier 变换红外光谱的特点	153
§5 Fourier 变换红外光谱仪的基本组成与功能	158
§6 FTIR 反射光谱及其应用	163
§7 表面增强红外光谱	191
§8 红外光谱在分子组装体系中的应用	194
第十一章 Raman 光谱学	209
§1 Raman 光谱学的历史	209
§2 Raman 光谱的基本原理	211
§3 Raman 光谱法的特点	217
§4 Raman 光谱仪器及样品装置	218
§5 Raman 光谱若干分析应用技术	222
第十二章 表面增强 Raman 散射及其在化学中的应用	236
§1 综论	236
§2 增强基底的制备	237
§3 SERS 的理论模型	240
§4 SERS 的主要应用	244
§5 表面增强超 Raman 效应	264
第五篇 纳米材料与二维有序薄膜体系的分子光谱研究	271
第十三章 纳米结构材料的光谱学研究	273

§ 1 综论	273
§ 2 无机半导体中的激子	275
§ 3 纳米晶(零维系统)的电子能级与光谱	277
§ 4 限域条件下的量子行为	285
§ 5 纳米有序组装体系	293
§ 6 纳米结构材料线性与非线性光学	297
第十四章 二维有序薄膜体系的分子光谱研究	304
§ 1 综论	304
§ 2 磷脂双分子膜的构型与构象分析	305
§ 3 磷脂双分子膜的相变特性	313
§ 4 磷脂类双分子膜脂链构象分布的定量研究	316
§ 5 金属离子对磷脂双分子膜的影响	322
第十五章 近场扫描光谱学	332
§ 1 远场光学的空间分辨极限	332
§ 2 近场扫描光谱技术	336
§ 3 应用	346
第六篇 辐射与原子分子体系相互作用	357
第十六章 辐射与原子分子体系相互作用的理论基础	359
§ 1 电磁场的经典理论	359
§ 2 辐射场的量子化	364
§ 3 辐射场与原子分子体系间的相互作用	366
§ 4 处理辐射问题的密度算子理论	367
§ 5 原子分子体系中电子对辐射的吸收与发射	372
§ 6 黑体辐射	381
§ 7 电四极矩与磁偶极矩跃迁	382
§ 8 散射的 Kramers 理论	384
后 记	399