

## Rozdział

### 1. Ogólne podstawy spektroskopii

- 1.1. Natura promieniowania elektromagnetycznego
- 1.2. Cechy promieniowania i jego widma
- 1.3. Energia molekuł
  - 1.3.1. Formy energii molekuł
- 1.4. Kwantowanie energii
- 1.5. Rozkład energii w stanie równowagi termicznej
- 1.6. Prawdopodobieństwo absorpcji i emisji promieniowania
- 1.7. Czynniki determinujące kształt i szerokość konturu pasma
- 1.8. Parametry pasma spektralnego
- 1.9. Rodzaje spektroskopii
- 1.10. Zastosowanie transformacji Fouriera w spektroskopii

## Rozdział

### 2. Widmo rotacyjne

- 2.1. Energia rotacji molekuł
- 2.2. Oddziaływanie promieniowania z rotującymi molekułami
- 2.3. Aparatura do rejestracji widma rotacyjnego
- 2.4. Badania struktury molekuł na podstawie widma rotacyjnego
  - 2.4.1. Molekuły dwuatomowe
  - 2.4.2. Molekuły wieloatomowe liniowe
  - 2.4.3. Molekuły wieloatomowe nieliniowe
- 2.5. Zastosowania mikrofalowej spektroskopii rotacyjnej

## Rozdział

### 3. Widmo oscylacyjne

- 3.1. Model oscylatora harmonicznego
- 3.2. Energia oscylacji molekuł
  - 3.2.1. Molekuła jako oscylator anharmoniczny
- 3.3. Częstości oscylacji a struktura molekuły
  - 3.3.1. Molekuły dwuatomowe
  - 3.3.2. Współrzędne wewnętrzne w molekułach wieloatomowych
  - 3.3.3. Obliczanie stałych siłowych i częstości drgań
  - 3.3.4. Współrzędne normalne
  - 3.3.5. Rodzaje drgań normalnych
  - 3.3.6. Rodzaje przejść między energetycznymi poziomami oscylatorów
  - 3.3.7. Sprzężenia oscylatorów i rezonanse drgań
- 3.4. Oddziaływanie promieniowania z oscylującymi molekułami
  - 3.4.1. Prawdopodobieństwo absorpcji promieniowania przez oscylatory molekularne
  - 3.4.2. Intensywność pasm absorpcyjnych
  - 3.4.3. Rozpraszanie promieniowania
  - 3.4.4. Widmo Ramana
  - 3.4.5. Intensywność rozproszenia ramanowskiego
  - 3.4.6. Polaryzacja promieniowania rozproszonego
  - 3.4.7. Zastosowanie teorii grup w określaniu reguł wyboru
- 3.5. Aparatura do rejestracji widm oscylacyjnych
  - 3.5.1. Spektrometry podczerwieni
  - 3.5.2. Metodyka spektroskopii podczerwieni
  - 3.5.3. Spektrometry podczerwieni z transformacją Fouriera
  - 3.5.4. Spektrometry ramanowskie
  - 3.5.5. Metodyka spektroskopii Ramana
- 3.6. Zastosowania spektroskopii oscylacyjnej
  - 3.6.1. Charakterystyczność częstości i intensywności pasm
  - 3.6.2. Przejawy oddziaływań wewnątrz-molekularnych w widmach oscylacyjnych
  - 3.6.3. Przejawy oddziaływań międzymolekularnych w widmach oscylacyjnych
  - 3.6.4. Analiza składu mieszanin za pomocą widm oscylacyjnych

## Rozdział

### 4. Widmo oscylacyjno-rotacyjne

- 4.1. Oscylacyjno-rotacyjne poziomy energetyczne
- 4.2. Reguły wyboru
- 4.3. Zastosowania spektroskopii oscylacyjno-rotacyjnej

## Rozdział

### 5. Widmo elektronowe

- 5.1. Charakterystyka stanów elektronowych
  - 5.1.1. Kwantowanie momentu pędu
  - 5.1.2. Spin elektronu
  - 5.1.3. Wektorowy model atomu
  - 5.1.4. Funkcje falowe stanów elektronowych w atomach
  - 5.1.5. Stany elektronowe w molekułach
- 5.2. Energia stanów elektronowych
- 5.3. Oddziaływanie promieniowania ze stanami elektronowymi
  - 5.3.1. Reguły wyboru przejść elektronowych
  - 5.3.2. Intensywność pasm elektronowych
- 5.4. Aparatura do rejestracji widm elektronowych
  - 5.4.1. Spektrofotometr do rejestracji widm w obszarze widzialnym i w bliskim nadfiolecie
  - 5.4.2. Metodyka spektroskopii obszaru widzialnego i nadfioletu
- 5.5. Zastosowania spektroskopii elektronowej
  - 5.5.1. Proste molekuly w stanie gazowym
  - 5.5.2. Molekuly wieloatomowe. Typy chromoforów
  - 5.5.3. Przejścia z przeniesieniem ładunku
  - 5.5.4. Przejścia typu d-d
  - 5.5.5. Przejawy oddziaływań wewnątrz- i międzymolekularnych w widmie elektronowym
  - 5.5.6. Analiza składu mieszanin za pomocą widma elektronowego

## Rozdział

### 6. Widma fotoelektronów

- 6.1. Bilans energetyczny przejść fotoelektronowych
- 6.2. Zasady działania spektrometru fotoelektronowego
- 6.3. Spektroskopia fotoelektronów UV
- 6.4. Spektroskopia fotoelektronów rentgenowskich
- 6.5. Spektroskopia elektronów Augera
- 6.6. Spektroskopia fotoelektronów z powierzchni ciał stałych

## Rozdział

### 7. Spektrometria mas

- 7.1. Zasady działania aparatury
  - 7.1.1. Jonowy rezonans cyklotronowy
- 7.2. Metody jonizacji badanych substancji
  - 7.2.1. Bombardowanie elektronami
  - 7.2.2. Jonizacja chemiczna
  - 7.2.3. Bombardowanie szybkimi atomami (FAB)
  - 7.2.4. Bombardowanie jonami
  - 7.2.5. Jonizacja przez desorpcję polem
  - 7.2.6. Desorpcja przez promieniowanie laserowe
- 7.3. Wprowadzanie próbek do komory jonizacyjnej
- 7.4. Wpływ obecności izotopów na widmo mas
- 7.5. Określenie zdolności rozdzielczej spektrometru
- 7.6. Drogi fragmentacji jonów

## Rozdział

### 8. Działanie pola magnetycznego na substancje

- 8.1. Moment pędu i moment magnetyczny elektronów
- 8.2. Moment pędu i moment magnetyczny jąder
- 8.3. Rezonans magnetyczny
- 8.4. Obsadzenie spinowych poziomów energetycznych

## Rozdział

### 9. Jądrowy rezonans magnetyczny

- 9.1. Ekranowanie jądra i przesunięcie chemiczne
- 9.2. Sprzężenie spinowo-spinowe
- 9.3. Procesy relaksacji
  - 9.3.1. Przebieg relaksacji
- 9.4. Aparatura NMR o wysokiej zdolności rozdzielczej
  - 9.4.1. Rejestracja widm NMR metodą fali ciągłej
  - 9.4.2. Rejestracja widm NMR metodą impulsową

- 9.5. Metodyka badań widm NMR
- 9.6. Wpływ efektów dynamicznych na widmo NMR
  - 9.6.1. Wiązanie wodorowe i chemiczna wymiana protonów
  - 9.6.2. Wewnętrzna rotacja
  - 9.6.3. Rezonans protonów związanych z atomem azotu
- 9.7. Spektroskopia  $^{13}\text{C}$  NMR
  - 9.7.1. Jądrowy efekt Overhausera (NOE)
  - 9.7.2. Charakterystyka spektroskopii  $^{13}\text{C}$  NMR
- 9.8. Rezonans innych jąder
- 9.9. NMR o wysokiej zdolności rozdzielczej w ciałach stałych
- 9.10. Zastosowanie NMR w biologii i medycynie

## Rozdział

- 10. Elektronowy rezonans paramagnetyczny
  - 10.1. Rodzaje centrów paramagnetycznych
  - 10.2. Aparatura do rejestracji widm EPR
    - 10.2.1. Metodyka badań widm EPR
  - 10.3. Anizotropia współczynnika rozszczepiania spektroskopowego
  - 10.4. Sprzężenia spinowo-spinowe
    - 10.4.1. Struktura nadsubtelna sygnałów EPR
    - 10.4.2. Struktura subtelna sygnałów EPR
  - 10.5. Procesy relaksacji
  - 10.6. Przesunięcia kontaktowe sygnałów NMR w układach paramagnetycznych
  - 10.7. Zastosowania EPR w chemii

Stałe fizyczne

Podręczniki i monografie

Skorowidz rzeczowy

Skorowidz związków chemicznych