

## INDICE

### Capitolo I : Teoria dei gruppi

1.1	I gruppi: definizioni e proprietà	
1.1.1	La teoria dei gruppi e la spettroscopia molecolare	pag. 1
1.1.2	Definizioni e proprietà	pag. 2
1.1.3	Gruppi astratti e tabella di moltiplicazione	pag. 7
1.1.4	Scomposizione di un gruppo	pag. 10
1.1.5	Classe, sottogruppo coniugato, sottogruppo invariante, gruppo fattore	pag. 13
1.2	Rappresentazioni	
1.2.1	Spazio vettoriale	pag. 17
1.2.2	Mapping	pag. 23
1.2.3	Trasformazioni di similarità	pag. 25
1.2.4	Matrice metrica	pag. 28
1.2.5	Trasformazioni unitarie	pag. 31
1.3	Gruppi di simmetria	
1.3.1	Point group operations	pag. 32
1.3.2	Descrizione dei gruppi	pag. 38
1.4	Rappresentazione dei gruppi puntuali	pag. 42
1.5	Rappresentazioni riducibili ed irriducibile	
1.5.1	Somma diretta	pag. 47
1.5.2	Numero delle rappresentazioni irriducibili	pag. 49
1.6	Relazioni di ortogonalità	
1.6.1	Lemma di Schur	pag. 53
1.6.2	Conseguenze delle relazioni di ortogonalità	pag. 58

### Capitolo II : Meccanica quantistica

2.1	Elementi fondamentali	
2.1.1	Introduzione	pag. 63
2.1.2	Natura ondulatoria e natura corpuscolare: interferenza	pag. 64
2.1.3	Il principio della decomposizione spettrale	pag. 69
2.1.4	Ampiezza di probabilità	pag. 71
2.1.5	Principio di indeterminazione di Heisenberg	pag. 74
2.2	Stati, ampiezze ed operatori	
2.2.1	Stati discreti	pag. 75
2.2.2	Operatori e cambiamenti di stato	pag. 77
2.2.3	Autostati ed autovalori di un operatore	pag. 79
2.2.4	Hamiltoniano	pag. 81

2.2.5	Stati stazionari	pag. 83
2.3	Oscillatore armonico quantistico monodimensionale	
2.3.1	Funzione di potenziale	pag. 85
2.3.2	Commutatore ed autovalori	pag. 88
2.3.3	Funzioni d'onda	pag. 91

### Capitolo III : Spettroscopia vibrazionale

3.1	I livelli energetici di una molecola	pag. 95
3.2	Spettroscopia vibrazionale	
3.2.1	Separazione tra le traslazioni, rotazioni e vibrazioni	pag. 99
3.2.2	Trattazione classica	pag. 100
3.2.3	Coordinate normali	pag. 104
3.2.4	Modi normali di vibrazione	pag. 106
3.2.5	Coordinate interne	pag. 108
3.2.6	L'equazione secolare in coordinate interne	pag. 112
3.3	Trattazione quantistica	
3.3.1	Molecole poliatomiche	pag. 115
3.3.2	Transizioni e spettri	pag. 117
3.4	Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo	pag. 122
3.5	L'effetto Raman	pag. 128
3.6	Regole di selezione di simmetria	pag. 137

### Capitolo IV : Applicazione della teoria dei gruppi

4.1	Simmetria molecolare e tabella dei caratteri	pag. 140
4.2	Uso delle coordinate interne	pag. 152
4.3	Coordinate di simmetria	pag. 157
4.4	Simmetria delle autofunzioni	pag. 165
4.5	Frequenze di gruppo	pag. 170

## Capitolo V : Spettroscopia rotazionale

5.1	Il rotore rigido	pag. 175
5.2	Soluzione quantistica del rotore rigido	pag. 179
5.3	Regole di selezione	pag. 182
5.4	Il rotore non rigido	pag. 184
5.5	Intensità e popolazione dei livelli rotazionali	pag. 185
5.6	Molecole poliatomiche lineari	pag. 189
5.7	Molecole poliatomiche	pag. 190
5.8	Spettri rotovibrazionali	pag. 193

## Capitolo V I : Spettroscopia elettronica

6.1	Gli spettri elettronici	pag.198
6.2	Regole di selezione	pag.201
6.3	Struttura delle bande di assorbimento	
	Il principio di Franck-Condon	pag.207
6.4	Spettri di fluorescenza	pag.211

## Appendici

A)	Riepilogo di calcolo matriciale
B)	Parte sperimentale