

Klasifikace elektronových hladin

Klasifikace stavů dvouatomových molekul

Stacionární stavy molekul lze klasifikovat s pomocí vlastních čísel operátorů, které komutují s celkovým hamiltoniánem H . Vzhledem k tomu, že dvouatomová molekula je symetrická vůči rotaci okolo spojnice jader (osa z), platí:

$$[M_z, H] = 0 \quad (0.1)$$

kde M_z označuje z -ovou komponentu operátoru celkového momentu hybnosti elektronů. Pro stavy s určitou vlastní hodnotou M_z (v jednotkách \hbar) se používá toto značení:

<i>stav</i>	M_z
Σ	0
Π	1
Δ	2
Φ	3
Γ	4
...	...

Pro homonukleární dvouatomové molekuly lze navíc klasifikovat stavy molekul podle symetrie vlnových funkcí vzhledem k inverzi I vůči středu molekuly. Pokud jsou vlnové funkce sudé, označujeme je písmenem g (gerade), a pokud při inverzi mění znaménko, označují se písmenem u (ungerade). Symboly $+$ nebo $-$ souvisí pouze s homonukleárními molekulami a udávají, s jakým znaménkem se transformuje elektronová vlnová funkce při zrcadlení vzhledem k rovině procházející spojnici jader.

Spinový stav molekuly se označuje multiplicitou $2S + 1$, kde S označuje celkový spin elektronů v molekule. Stav s nejnižší energií má obvykle nejvyšší symetrii. Například základní stav molekuly vodíku je $^1\Sigma_g^+$ a excitovaný stav je $^3\Sigma_u^+$. Tento excitovaný stav je nevázaný (křivka celkové energie nemá minimum při konečné vzdálenosti jader). Některé z dalších excitovaných stavů mají opět minimum celkové energie při vzdálenostech větších, než je rovnovážná vzdálenost jader v základním stavu.

Pro složitější molekuly se používá klasifikace stavů podle ireducibilních reprezentací příslušné grupy symetrie molekuly. Viz příložené pdfko z přednášky Rozptylové metody profesora Baumruka.