

ния можно построить, переводя электрон с наименее связанный орбитали  $B_2$ , на любую из незанятых орбиталей  $A_1$  и  $B_2$ ; при этом образуются состояния, имеющие в первом случае симметрию  $B_2$ , а во втором — симметрию  $A_2$  (табл. 13.2). За счет электрических дипольных переходов может возбуждаться только первое из этих состояний, поскольку, согласно табл. 13.1, векторное представление не содержит  $A_2$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Eyring H., Walter J., Kimball G. E., *Quantum Chemistry*, Wiley, New York, 1944.
- Более специализированные книги:
2. Murrell J. N., Kettle S. F., Tedder J. M., *Valence Theory*. Wiley, New York, 1970.
3. Murrell J. N., Harget A. J., *Semi-empirical Self-consistent Field Molecular-orbital Theory of Molecules*, Wiley, New York, 1972.

## ЗАДАЧА

- 13.1.** Молекула метана состоит из четырех атомов водорода, расположенных в вершинах правильного тетраэдра, и атома углерода — в его центре (группа симметрии  $T_d$ ). Показать, что четыре атомные  $1s$ -орбитали атомов водорода дают синглетную и тройплетную молекулярные орбитали. Заметим, что атомные  $2s$ - и  $2p$ -орбитали атома углерода также дают синглет и тройплет с теми же симметриями и, следовательно, эти состояния могут смешиваться, образуя связывающие состояния.