

Программа курса "Молекулярная спектроскопия"

Осенний семестр 5 курса

1. Энергетический спектр и физические свойства двухатомной молекулы

- 1.1. Строение двухатомной молекулы и химическая связь.
 - Электронная, колебательная и вращательная энергия молекулы.
 - Типы молекулярных фотопереходов. Линейчатый, полосатый и непрерывный спектры.
- 1.2. Основные представления теории молекул.
 - Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера.
 - Электронные и ядерные волновые функции двухатомной молекулы.
 - Классические и квантовые функции распределения координат и импульсов.
 - Кривые потенциальной энергии и электронные термы (связанные и отталкивательные).
- 1.3. Простейшие молекулярные системы.
 - Методы валентных связей и молекулярных орбиталей.
 - Молекула водорода H_2 .
- 1.4. Симметрия и классификация электронных термов гетероядерной и гомоядерной молекулы.
 - Σ -, Π - термы, мультиплетность, четность и знак термов.
 - Связь молекулярных термов с атомными.
 - Пересечение и квазипересечение термов
- 1.5. Структура колебательно-вращательных уровней энергии.
 - Приближение гармонического осциллятора и жесткого ротатора.
 - Эффекты ангармонизма колебаний и взаимодействия колебаний с вращением, Λ -удвоение.
 - Колебательно-вращательный квазиконтинуум.
- 1.6. Орто- и пара-водород.
- 1.7. Термодинамические свойства двухатомного газа. Статистическая сумма молекулы из одинаковых и различных атомов.
 - Вклады электронного и колебательно-вращательного движения. Анализ предельных случаев.
 - Закон действующих масс для равновесного распределения атомов в связанном (молекулярном) и свободном состояниях.
- 1.8. Неадиабатические переходы между электронными термами молекулы
 - Теория Ландау-Зинера.

2. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомной молекулы

- 2.1. Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах.
 - Матричные элементы перехода для аксиально-симметричных систем.
 - Правила отбора для электронных, колебательных и вращательных переходов.

- Факторы Франка-Кондона в приближении Борна-Оппенгеймера.
 - P -, Q -, R -ветви.
- 2.2. Вероятности, коэффициенты Эйнштейна, силы осцилляторов и сечения колебательно-вращательных и электронных переходов.
- 2.3. Распределение интенсивностей в электронно-колебательно-вращательных спектрах.

Программу составили

доктор физ.-мат. наук
кандидат физ.-мат. наук

/В.С. Лебедев/
/А.А. Нарич/

Список литературы

1. У. Фано, Л. Фано, *Физика атомов и молекул* (Наука, Москва, 1980).
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1974).
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1976).
4. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика* (Наука, Москва, 1980).
5. А.А. Радциг, Б.М. Смирнов, *Справочник по атомной и молекулярной физике* (Атомиздат, Москва, 1980).
6. П. Гомбаш, *Проблема многих частиц в квантовой механике* (Изд-во Иностранной литературы, Москва, 1953). Гл. IV – Молекулы.
7. Н.Е. Кузьменко, Л.А. Кузнецова, Ю.Я. Кузяков, *Проблемы описания интенсивностей электронных спектров двухатомных молекул в адиабатическом приближении*, УФН **140**, сс. 75-96 (1983).
8. В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган, *Задачи по квантовой механике* (Наука, Москва, 1981).
9. Е.Е. Никитин, С.Я. Уманский, *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях* (Атомиздат, Москва, 1979).