**Шуркус, Андрей Антонович.**

## Теоретическое исследование потенциальных функций и спектроскопических постоянных малых молекул : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.02. - Вильнюс, 1985. - 146 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Шуркус, Андрей Антонович

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СОКРАЩЕНИЙ.

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ФОРМ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ФУНКЦИЙ

ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ.

§1.1. Аналитические потенциальные функции

§ I.?, Новые обобщенные потенциальные функции.

§ I. Применение новых потенциальных функций для сА ,эспроизведения хода потенциальных кривых

§ 1,4. Определение энергии диссоциации двухатомных . молекул с помощью простых эмпирических соотношений.

ГЛАВА 2. НОВАЯ СХЕМА ВЫЧИСЛЕНИЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ

АНАЛИЗА ДАНХЭМА.

§ 2.1. Анализ Данхэма и способы его выполнения

§ 2.2. Определение погрешностей анализа Данхэма

§ 2.3. Новая схема вычисления спектроскопических характеристик.

ГЛАВА 3. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ

ИОНОВ, СОДЕРЖАЩИХ АТОМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ.

§ 3.1. Неэмпирические расчеты некоторых молекулярных ионов фторидов инертных газов.

§ 3.2. Неэмпирические расчеты некоторых молекулярных ионов гидридов инертных газов.

ВЫВОДЫ.