**Смирнов, Михаил Борисович.**

## Методы построения колебательных потенциальных функций молекул и кристаллических решеток : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Ленинград, 1984. - 164 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Смирнов, Михаил Борисович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. МОДЕЛИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИИ В ТЕОРИИ

КОЛЕБАНИИ МОЛЕКУЛ.

§ 1.1. Обзор модельных концепций.

§ 1.2. Колебательная потенциальная функция многоатомной молекулы в пространстве зависимых координат. Внутренние натяжения

§ 1.3. Анализ некоторых моделей. Молекула

ГЛАВА П. ПРШЛЕНЕНИЕ ПРЯМЫХ КВАНТОВОМЕХШИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ В ИССЛЕДОВАНИИ ПФ МНОГОАТОМНЫХ

МОЛЕКУЛ.

§ 2.1. Квантовомеханические расчеты силовых постоянных (обзор литературы)

§ 2.2. Оптимизация'молекулярной геометрии методом переменной метрики с использованием внутренних "естественных" координат

§ 2.3. Применение ПФ, рассчитанных методом ШЩ1/2, в исследовании колебательных спектров и молекулярной структуры ненасыщенных простых эфиров.

ГЛАВА Ш. ПРОБЛЕМА РАЗДЕЛЕНИЯ БЛИЗКОДЕЙСТВШ И ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ

КРИСТАЖШЕСКИХ РЕШЕТОК.

§ 3.1. Динамические модели кристаллических решеток обзор).

§ 3.2. Принципы построения динамических моделей ионно-ковалентных кристаллов.

§ 3.3. Динамические свойства кристалла карбида кремния со структурой цинковой обманки.

ЗШЮЧЕШЕ.