**Лободенко, Елена Ивановна.**
Создание теоретических моделей для обработки спектров высокого разрешения молекул аксиальной симметрии : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.05. - Томск, 1999. - 163 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Лободенко, Елена Ивановна

Оглавление

Введение

Глава I. Введение в теорию молекулярных спектров

1.1. Квантовое описание состояний молекул

1.1.1. Уравнение Шредингера

1.1.2. Колебательно - вращательный гамильтониан

1.1.3. Метод контактных преобразований

1.1.4. Неоднозначность эффективных операторов

1.2. Глобальное описание колебательно - вращательных спектров

1.3. Симметрия молекул

1.3.1. Симметрия молекул

1.3.2. Симметрия нормальных колебаний

1.4. Интенсивность линий и правила отбора в молекулярных спектрах

1.4.1. Момент перехода

1.4.2. Интенсивности линий поглощения и спонтанного комбинационного рассеяния

1.4.3. Правила отбора

1.5. Нестационарная активная спектроскопия комбинационного рассеяния света

Глава II. Редуцированные модели эффективных гамильтонианов для

молекул аксиальной симметрии

2.1. Эффективные колебательно - вращательные гамильтонианы для

молекул симметрии Сзк

2.2. Неоднозначность эффективного гамильтониана

2.3. Редуцированная модель гамильтониана для молекул симметрии С3и

2.3.1. Изолированное дважды вырожденное колебательное

состояние V, (Е)

2.3.2. Взаимодействующие фундаментальные колебательные

состояния ул(А)и уг(Е)

2.3.2.1. Случай слабого резонанса

2.3.3. Анализ спектроскопических параметров, соответствующих диаде взаимодействующих состояний, полученные

различными авторами

2.3.4. Триада взаимодействующих состояний 2v„, v„+vi и 2v,

2.3.5. Пентада взаимодействующих состояний v„., vt, и 2v„,

v« . 2vi

2.4. Колбательно - вращательный гамильтониан "глобально"

описывающий спектр молекулы ацетилена

2.4.1. Эффективный колебательно - вращательный гамильтониан молекулы ацетилена

2.4.2. Неоднозначность эффективного гамильтониана молекулы С2Н2

Глава III. Операторы эффективного дипольного момента и тензора

поляризуемости

3.1. Фактор Германа - Уоллиса для молекул типа симметричного волчка

3.1.1. Спектры поглощения

3.1.1.1. Оператор эффективного дипольного момента

3.1.1.2. Свойства симметрии параметров

3.1.1.3. Фактор Германа - Уоллиса

3.1.2. Спектры комбинационного рассеяния молекул симметрии С3и

3.1.2.1. Параллельная полоса vn

3.1.2.2. Перпендикулярная полоса v,

3.2. Параметризация матричных элементов в случае линейных молекул

3.2.1. Молекула С02

3.2.2. Молекула N20

3.3. Функция дипольного момента для молекулы N20

Глава IV. Спектры нестационарной активной спектроскопии

комбинационного рассеяния

4.1. Основные соотношения нестационарной активной спектроскопии

4.2. Энергия антистоксова импульса

4.3. Анализ экспериментальных данных по нестационарной АСКР

газообразного аммиака

Заключение

Литература

Приложения