**Эгенберг, Фаина Леонидовна.**
Особенности вибронных спектров азотсодержащих гетероароматических соединений : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.05. - Москва, 1985. - 203 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Эгенберг, Фаина Леонидовна

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА I. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЬШТОДЫ

В СПЕКТРОСКОПИИ 1лНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

1.1. Квантовохимические методы расчета электронных спектров многоатомных молекул

1.2. Некоторые вопросы теории колебательных спектров многоатомных молекул . ;

1.3. Проявление различных механизмов электронно-колебательных взаимодействии в вибронных спектрах многоатомных молекул

ГЛАВА 2. ПУТИ СФОРМИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛОС В

СПЕКТРАХ поглощений РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ АТС и

ИХ АУ АНАЛОГОВ.

2.1. Объекты исследования . 2S

2.2. Спектры поглощения АГС и АУ аналогов при комнатной температуре

2.3. Квантовохимический расчет электронных спектров поглощения АГС и их АУ аналогов

2.4. Анализ путей формирования электронны:: полос в спектрах поглощения АГС и их АУ аналогов

ГЛАВА 3. ТОНКОСТРУКТУРНЫЕ СПЕКТРЫ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ И ФОСФОРЕСЦЕНЩШ И СПЕКТРЫ ИХ П0ГЛ0ЩЗНШ ФЕНАНТРЕНА И ЕГО АЗОТЗАМЕЩЕШЫХ.

3.1. Методика эксперимента

3.2. Интерпретация колебательной структуры низкотемпературных спектров флуоресценции и фосфоресценции фенантрена и его азотзаме-щенных.

3.3. Спектры ИК поглощения фенантрена и его азотзамещенных

ГЛАВА 4. РАСЧЕТ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ФЕНАНТРЕНА И

ЕГО АЗОТЗАМЕЩЕННЫХ.

4.1. Общая характеристика колебаний молекулы фенантрена.

4.2. Потенциальное поле молекулн фенантрена

4.3. СилоЕое поле и расчет нормальных колебаний АТС фенантренового ряда.

ГЛАВА 5. ВЛИЯНИЕ ВЫСШИХ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ

СОСТОЯНИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ ВЙЕРОШЫХ СПЕКТРОВ АТС.

5.1. Отнесение колебаний, проявляющихся в спектрах флуоресценции и фосфоресценции фенантрена, по симметрии и форме

5.2. Отнесение колебаний, проявляющихся в спектрах флуоресценции и фосфоресценции азотзамещенных атомов фенантрена, по симметрии и сгорме.

5.3. Изучение распределения интенсивности полос е Еибронных спектрах и вычисление параметров ЭКВ е молекуле фенантрена и его азотзамещенных

5.4. Особенности вибронного взаимодействия в молекуле фенантрена и его азотзамещенных для энергетических уровней различной мультиплетности

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ К ВЫВОДЫ