**Никитин, Андрей.**

## Метод неприводимых тензорных операторов в молекулярной спектроскопии : Развитие алгоритмов и приложение к изучению спектра молекулы СНЗД : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.05. - Дижон, [19--?]. - 164 с.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Никитин, Андрей

Содержание

Введение

1 Колебательно - вращательные операторы в тензорном формализме

1.1 Колебательная часть

1.1.1 Правила построения симметризованных степеней представлений точечных групп

1.1.2 Алгебраические операции с симметризованными степенями

1.1.3 Алгоритм вычисления редуцированных матричных элементов и коммутаторов

1.1.4 Дополнения

1.2 Вращательная часть для Сз„ группы

1.2.1 Редукция ¿'Оз в С3„

1.3 Колебательно-вращательные операторы

1.3.1 Колебательно-вращательный гамильтониан

1.3.2 Генераторы унитарных преобразований гамильтониана

1.3.3 Операторы эффективного дипольного момента

1.3.4 Базисные колебательно-вращательные волновые функции

1.4 Основные соотношения формализма

1.4.1 Основные соотношения формализма для группы БОз

1.4.2 Тензорный формализм для простых точечных групп

1.4.3 Г - символ и К - символ. Цепочка групп 0(3) — Те,

1.4.4 Расчет колебательно - вращательных коммутаторов

1.4.5 Вспомогательные формулы

1.5 Переход от Та к Сз„

1.5.1 Формальный переход

1.5.2 Переход параметров и собственных функций

1.5.3 Пример перехода от к СзУ

1.6 Сравнение с традиционными формализмами

1.6.1 Соответствие с традиционным Тд формализмом [ЬРИВ]

1.6.2 Соответствие с традиционным Сз„ формализмом

2 Анализ спектров СНЗИ

2.1 Молекула СН3Б и ее инфракрасные спектры

2.2 Интенсивности линий, ядерные статистические веса и статистические суммы

2.3 Основное состояние

2.4 Инфракрасный спектр СН^И в диапазоне 900 - 1700 ст."1

2.5 Нонада и2, 2щ, и3 + Щ, 2г/3, и5 + щ, г/3 + г/5, 2и5,

2.5.1 Особенности построения эффективного гамильтониана нонады

2.5.2 Анализ нонады

2.5.3 Анализ интенсивностей

2.5.4 Идентификация А\ и А2 уровней с одинаковыми К

2.5.5 Дополнение. Параметры нонады

2.5.6 Дополнение. Параметры дипольного момента нонады

2.6 Состояния выше нонады

2.6.1 Дополнение. Комбинационные разности

3 Неоднозначность параметров эффективного гамильтониана

3.1 Редукция эффективного гамильтониана

3.2 Преобразование параметров эффективного гамильтониана

3.2.1 Преобразования в ограниченном пространстве операторов

3.3 Примеры поворотов гамильтониана

3.4 Инвариантные параметры

3.4.1 Инвариантные параметры для диады СН4 (группа Т<г)

3.4.2 Инвариантные параметры для триады СНгО (группа С3у)

3.5 Редукция эффективного гамильтониана СН3В

4 Программы

4.1 Программы для подгонки параметров эффективного гамильтониана и параметров дипольного момента

4.1.1 Расположение файлов

4.1.2 Создание модели молекулы

4.1.3 Создание файлов параметров, базовых функций, генераторов контактных преобразований, параметров дипольного момента, и их формат

4.1.4 Создание файлов матричных элементов

4.1.5 Создание файлов собственных векторов

4.1.6 Создание файла интенсивностей ИК переходов

4.1.7 Создание файла предсказания

4.1.8 Вычисление коммутаторов

4.2 Программы для нахождения и записи идентификации

4.2.1 Манипулятор с файлом линий ( Line manager )

4.2.2 Программа для нахождения положения линий (PeakList)

4.2.3 Сравнение предсказания с экспериментом (Compare prediction with experiment)

4.2.4 Комбинационные разности (Combinations differences)

4.3 Дополнение. Проблема поиска глобального минимума

4.3.1 Экстраполяция на большие J и использование экстраполяции для

оценки качества модели

Заключение и перспективы

Список таблиц

1 Правила построения симметризованных степеней двумерных представлений

для групп Td-, Oh, C3v

2 Коэффициенты с\ и с2 для Tj, Oh, C3v групп

3 Правила построения симметризованных степеней трехмерных представлений для групп Td, Oh

4 Коэффициент G, редукции 0(3) на C3v

5 Относительные распространеннось и масса четырех изотопов метана

6 Ядерные статистические веса для четырех изотопов метана

7 Статсумма С H3D

8 Параметры основного состояния СH3D

9 Определение блоков нонады

10 Статистика нонады

11 Матрица смешивания колебательных подуровней для J=5,10,12

12 Три полосы CH3D в диапазоне спектра 3200 - 4800 cm-1

13 Параметры эффективного гамильтониана для состояний + Щ и + v3

14 Типичные величины некоторых колебательно - вращательных параметров CH3D

15 Коммутаторы генераторов

16 Проверка инвариантности

17 Три набора параметров

18 Стандартные отклонения для некоторых значений J в зависимости от начальной точки

Список рисунков

1 Графическая иллюстрация пересвязывания двух тензоров

2 Примеры схем связи колебательных мод

3 Графическая схема выражения X через У

4 Поворот системы координат

5 Диаграммы уровней энергии

6 Экспериментальный спектр СНв диапазоне 800-2800 сггГ1

7 Экспериментальный спектр СН^О в диапазоне 2000-5000 стГ1

8 Колебательные блоки

9 Уровни энергии нонады до 1=6

10 Полоса

11 Полоса 2и6

12 Полоса + и6

13 Полоса 21/3

14 Полоса 1У5 + ту&

15 Полоса + " 5

16 Полоса 2г/5

17 Полоса

18 Полоса г/4

19 Уровни энергии нонады до ^11

20 Уровни энергии нонады до 1=11 (Продолжение)

21 Уровни энергии нонады до ^11 (Продолжение)

22 Уровни энергии нонады до 1=11 (Окончание)

23 Экспериментальные спектры СН^Б в диапазоне 3200-4800 сггГ1

24 Полоса + ^з

25 Примеры преобразования гамильтониана

26 Диалоги