

# МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ «ВОЗМУЩЕННЫХ» СОСТОЯНИЙ.

Пазюк Е. А.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Химический факультет

Современная молекулярная спектроскопия двухатомных частиц (молекул, радикалов в газовой фазе) – это, в первую очередь, исследования электронно-возбужденных состояний. Причем определение и прогнозирование энергетических и радиационных характеристик электронно-возбужденных молекул для физико-химических приложений необходимо сегодня на спектроскопическом уровне точности.

При больших энергиях электронного возбуждения положения ровибронных уровней энергии и интенсивности ровибронных переходов невозможно описать в рамках адиабатического (Борн-Оппенгеймеровского) приближения. Внутримолекулярные взаимодействия приводят в данном случае к существенному искажению («возмущению») не только регулярной структуры уровней энергии, но и осцилляционной (узловой) структуры волновой функции. Решение прямой и обратной спектроскопической задачи в данных случаях базируется на решении систем связанных уравнений Шредингера, полученных в рамках квантовохимических моделей взаимодействующих электронных состояний. Успешная реализация такого подхода возможна только при совместном использовании прецизионных экспериментальных данных о частотах и интенсивностях ровибронных переходов и результатов высокоточных квантовохимических расчетов, в первую очередь, электронных матричных элементов неадиабатических взаимодействий.

На примере гомо- и гетероядерных димеров щелочных металлов будет продемонстрирована возможность построения неадиабатических моделей описания «возмущенных» электронно-возбужденных состояний на экспериментальном (спектроскопическом) уровне точности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 16-03-00529 и 17-53-18006).