

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Специальность 1-31 04 01 Физика (по направлениям)
Направление специальности 1-31 04 01-01 Физика (научно-исследовательская
деятельность)
Специализация 1-31 04 01-01 05 Лазерная физика и спектроскопия

Электронные спектры двухатомных молекул. Колебательная структура электронного спектра двухатомной молекулы. Система полос Деландера. Кривые потенциальной энергии верхнего и нижнего электронных состояний. Интенсивность колебательных полос. Принцип Франка-Кондона. Классический и квантово-механический варианты принципа Франка-Кондона. Расчет интенсивности электронно-колебательного перехода.

Химическая связь в двухатомной молекуле. σ - и π - связи в молекуле. Молекулярные электронные оболочки σ - связи в молекулах H_2 и He_2 . σ - и π - связи в многоэлектронных молекулах O_2 , N_2 , F_2 и др.

Метод молекулярных орбиталей (МО). Составление молекулярной орбитали из атомных орбиталей (МО = ЛКАО). Связывающие и разрыхляющие орбитали. Интегралы перекрывания. Энергия устойчивого состояния на примере молекулы водорода. Классификация электронных состояний двухатомной молекулы. Орбитальное квантовое число и мультиплетность электронных состояний. Молекулярные электронные оболочки, σ - и π - электроны. Электронно - колебательно - вращательные спектры двухатомных молекул. Вращательные ветви электронно-колебательных полос (O-, P-, Q-, R-, S – ветви). Правила отбора в электронных спектрах двухатомных молекул. Различные типы связи вращательного движения с электронным. Примеры электронных спектров.

Электронные спектры поглощения многоатомных молекул. Формирование спектра многоатомной молекулы. Различные подходы для классификации электронных состояний. Сплошные, полосатые и дискретные спектры молекул. Химические связи в многоатомных молекулах. Гибридизация атомных орбиталей в многоатомных молекулах. Метод МО (ЛКАО). Молекулярные орбитали в молекулах бензола и воды. Симметрия молекулярных орбиталей.. Систематика электронных состояний в молекулах бензола и воды.

Принцип Франка-Кондона для многоатомной молекулы. Адиабатическое приближение. Отклонение от адиабатического приближения. Эффект Герцберга-Теллера. Электронные спектры молекул в кристаллических матрицах. Эффект Шпольского. Электрон-фононные взаимодействия. Электронные спектры поглощения ароматических молекул (бензол, нафталин, антрацен) в газовой фазе. Примеры и применения.

Электронные спектры поглощения растворов. Влияние межмолекулярных взаимодействий на спектры молекул. Универсальные и специфические взаимодействия в растворах. Модель Онзагера и эффективное поле, действующее на молекулу в среде.

Электронные спектры поглощения молекулярных кристаллов. Общие сведения о молекулярных кристаллах. Модель ориентированного газа. Расщепление электронных переходов в кристаллах бензола, нафталина и антрацена. Эффект Давыдова.

Понятие об экситоне. Экситон-фононные и виброн-фононные взаимодействия. Влияние температуры на электронные спектры поглощения.

Электронные спектры активированных кристаллов. Активированные кристаллы. Ионы активаторы с незаполненными d- и f- оболочками. Влияние кристаллического поля на величину расщепления d- и f- оболочек. Систематика электронных состояний ионов-активаторов.. Спектры поглощения рубина и алюмо-иттриевого граната. Применение указанных кристаллов в квантовой электронике.

Электронные спектры поглощения полупроводниковых кристаллов. Энергетические зоны в полупроводниках. Спектры поглощения полупроводников при комнатной и низкой температурах. Экситоны Ванье-Мотта. Экситонное поглощение в полупроводниках.. Экситон-фононное взаимодействие. Оптические и акустические фононы. Прямозонные и непрямозонные переходы.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Изд. ФМЛ, 1962
2. Г.Герцберг. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М. «Мир», 1969
3. А.И.Комяк. Молекулярная спектроскопия. Мн., Из-во БГУ, 2005
4. К.Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. М. «Мир», 1985.

Дополнительная

1. Спектры поглощения молекулярных кристаллов, Киев. Изд. «Наукова думка», 1965
2. Спектроскопия и динамика возбуждений в конденсированных молекулярных системах. (Под ред. Аграновича В.М. и Хохштрассера Р.М) М., Изд. «Наука», 1987
3. Н.А.Борисевич. Возбужденные состояния сложных молекул в газовой фазе. Мн., Изд. «Наука и техника», 1967
4. В.П.Грибковский. Теория поглощения и испускания света в полупроводниках. Мн., Изд «Наука и техника», 1975.