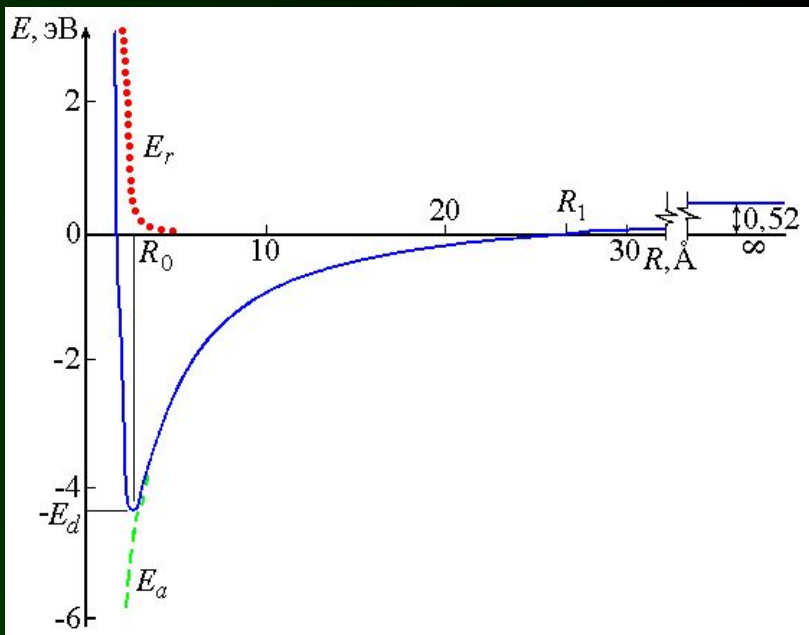
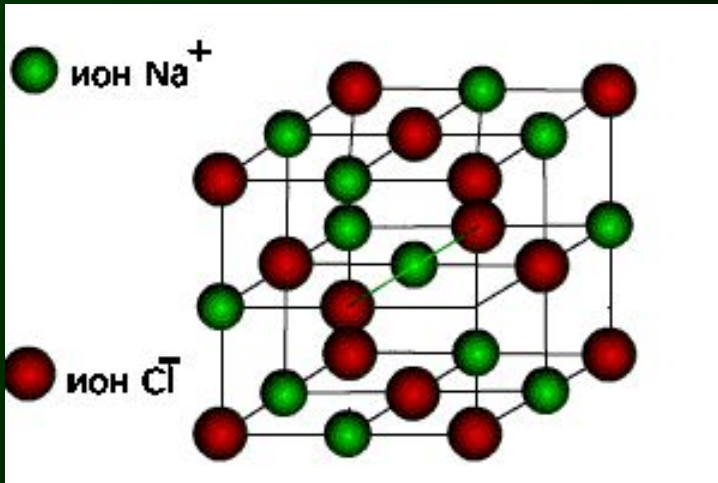


Ионная связь

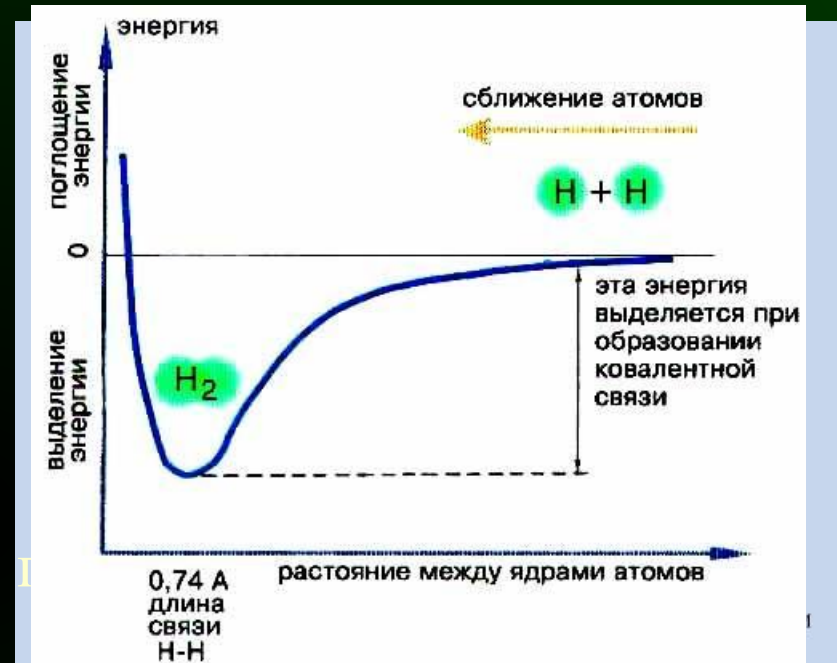
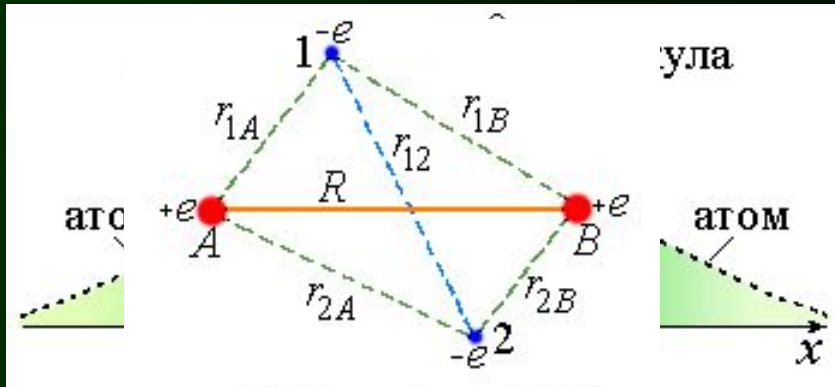


$$E_a = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

$$E_r \propto \frac{1}{R^N}$$

Ковалентная связь

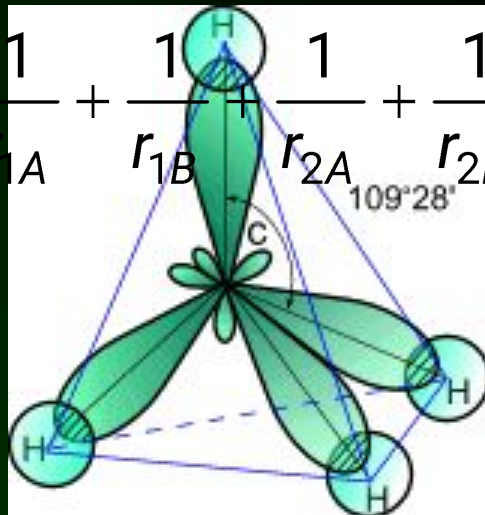
Молекула водорода



Модель Гайтлера–Лондона, 1927

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{1A}} + \frac{1}{r_{1B}} + \frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{r_{2B}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right)$$

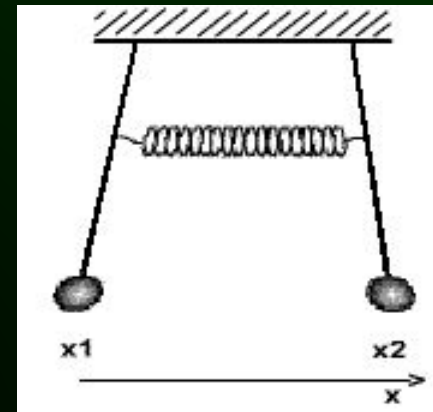
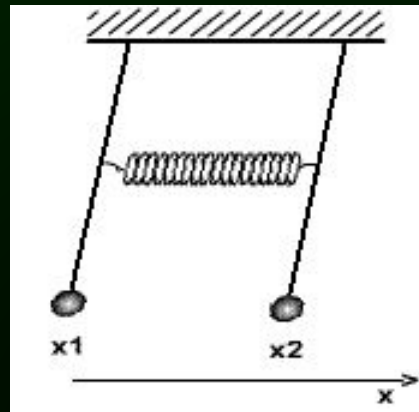
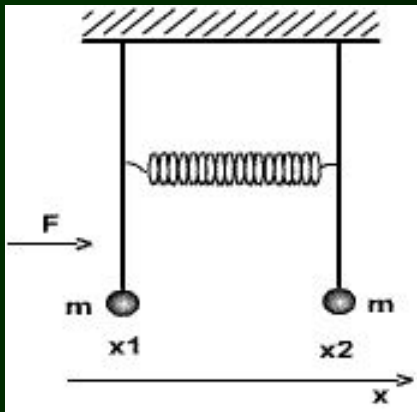
Метан



Насыщаемость

Направленность

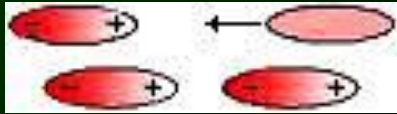
Силы Ван-дер-Ваальса



$$\omega_1 = \sqrt{\frac{g}{l}}$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{g}{l} + \frac{2kb^2}{ml^2}}$$

Силы Ван-дер-Ваальса



$$U_{12} = -\frac{p_1 p_2}{4\pi\epsilon_0 R^3} = -\frac{e^2 x_1 x_2}{4\pi\epsilon_0 R^3}$$

$$U_{1,2} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \left(x_1^2 + x_2^2 \right) / \sqrt{2} + U_{12} \quad U = \frac{1}{2} m \omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2} m \omega_2^2 q_2^2$$

$$\omega_{1,2}^2 = \omega_0^2 \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m R^3}$$

$$\omega_{1,2} = \omega_0 \left(1 \pm \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m R^3 \omega_0^2} - \frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m R^6 \omega_0^4} \right)$$

$$E = \hbar \omega_0 - \frac{\hbar e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m R^6 \omega_0^3}$$

$$F = -\frac{\partial E}{\partial R} \approx \frac{\hbar}{R^7}$$

Адиабатическое приближение

$$E = E_e + E_v + E_r$$

Колебательная энергия

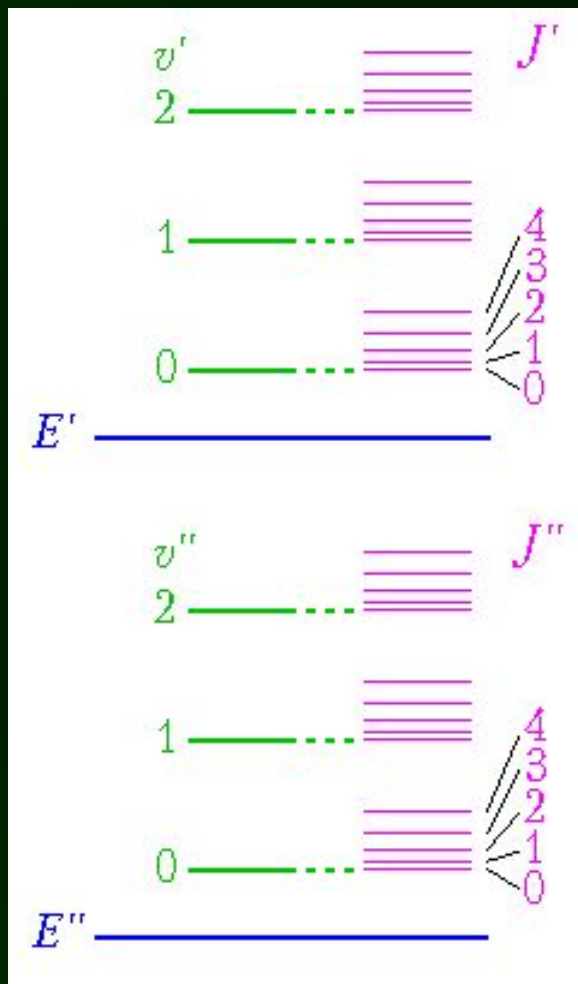
$$E_v = (v + 1/2) \hbar \omega_v \quad \frac{E_v}{E_e} \approx \sqrt{\frac{m_e}{M}}$$

Вращательная энергия

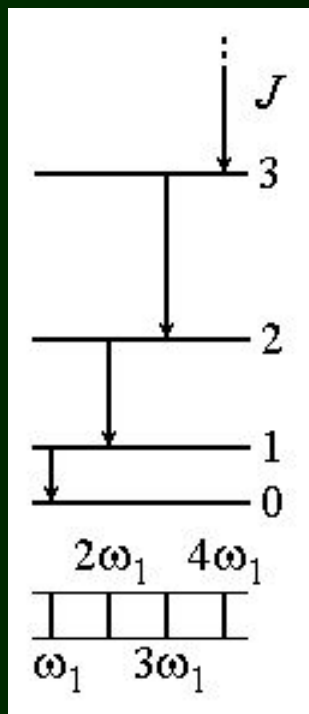
$$E_r = \frac{I \omega_r^2}{2} = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} = \hbar^2 B J(J+1) \quad \frac{E_r}{E_e} \approx \frac{m_e}{M}$$

$$E = E_e + (v + 1/2) \hbar \omega_v + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} \quad E_r \ll E_v \ll E_e$$

Энергетические уровни молекулы

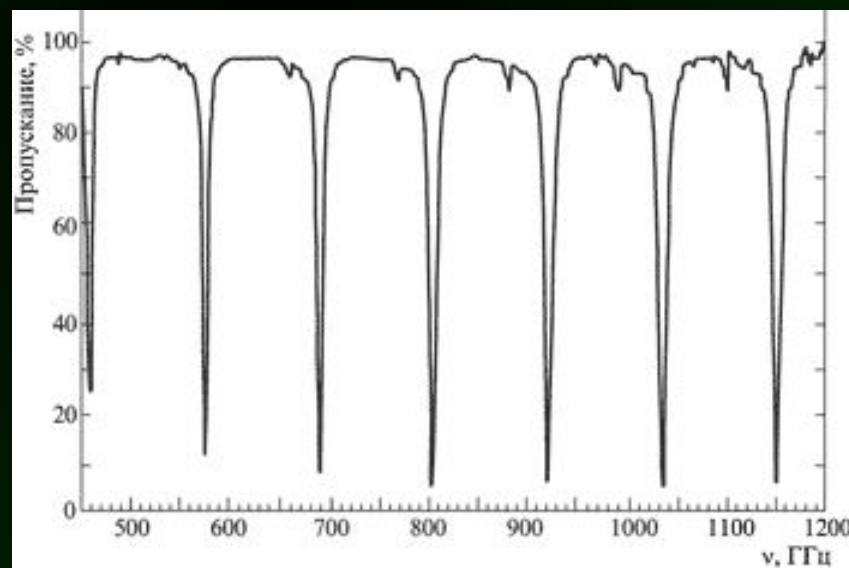


Вращательные спектры



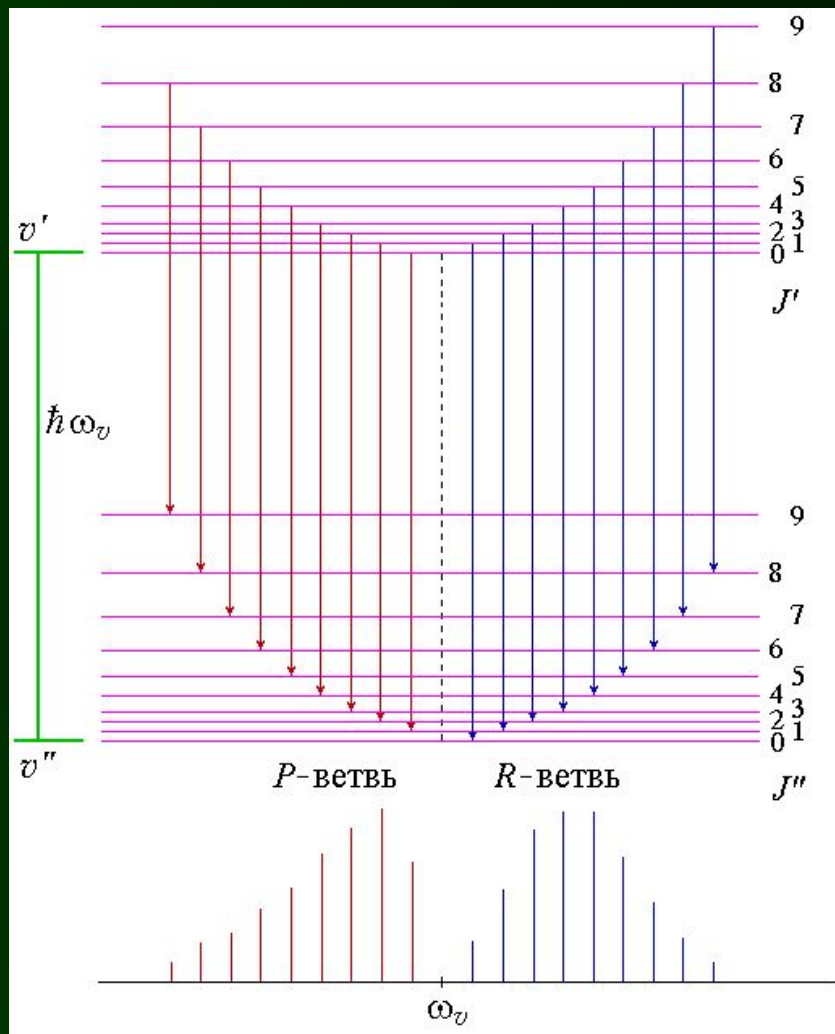
$$\hbar\omega_r = \hbar B J'(J'+1) - \hbar B J''(J''+1)$$

$$\Delta J = \pm 1 \quad \omega = 2B(J+1) = \omega_1(J+1)$$



Вращательный спектр CO

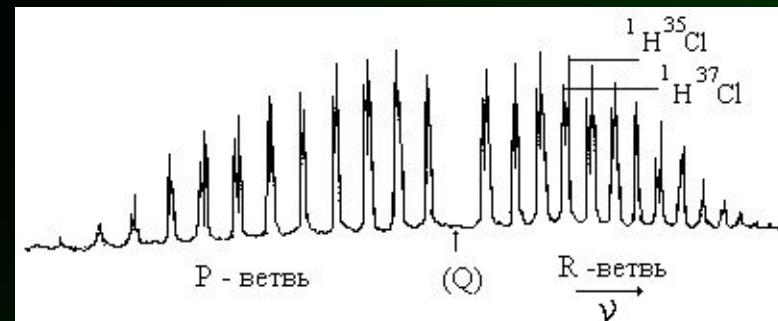
Колебательно-вращательные спектры



$$\omega = \omega_v + 2mB$$

$m = 1, 2, 3, \dots$ для R-

ВЕТВИ
 $m = -1, -2, -3, \dots$ для P-
 ВЕТВИ



Колебательно-
 вращательный спектр
 молекулы HCl

Электронно-колебательные спектры

$$\omega = \omega_0 + B'J'(J' + 1) - B''J''(J'' + 1)$$

$$\omega = \omega_0 + (B' + B'')m + (B' - B'')m^2$$

$m = 1, 2, 3, \dots$ для R-

ВЕТВИ

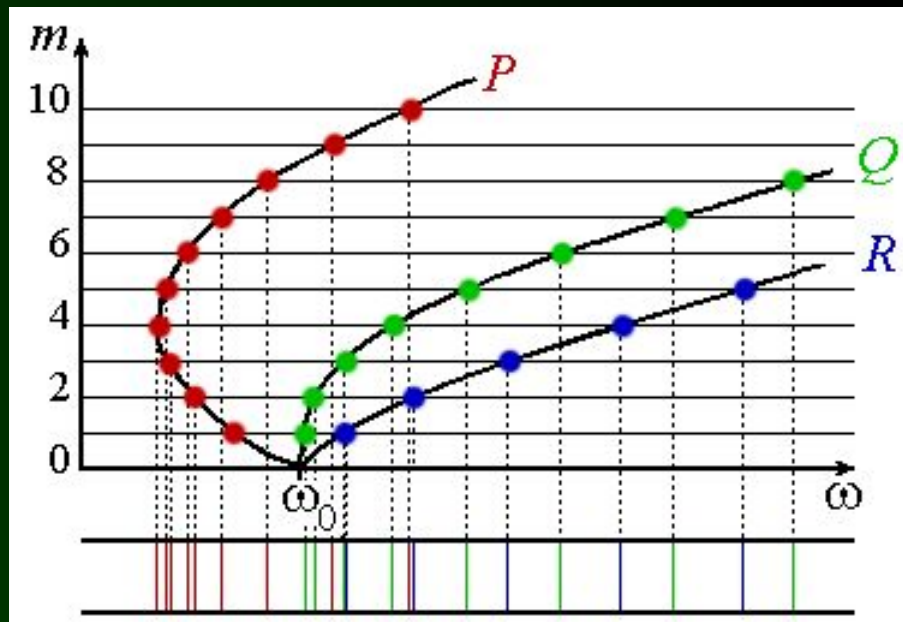
$$\omega = \omega_0 + (B' - B'')m(m - 1)$$

$m = -1, -2, -3, \dots$ для P-

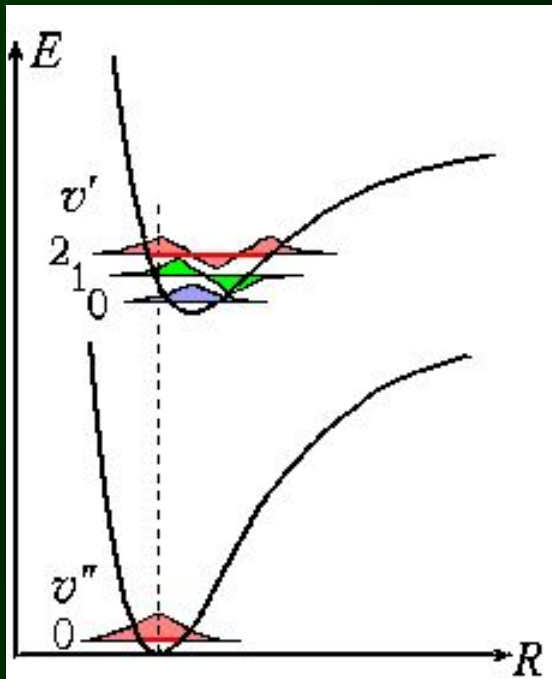
ВЕТВИ

$m = 1, 2, 3, \dots$ для Q-

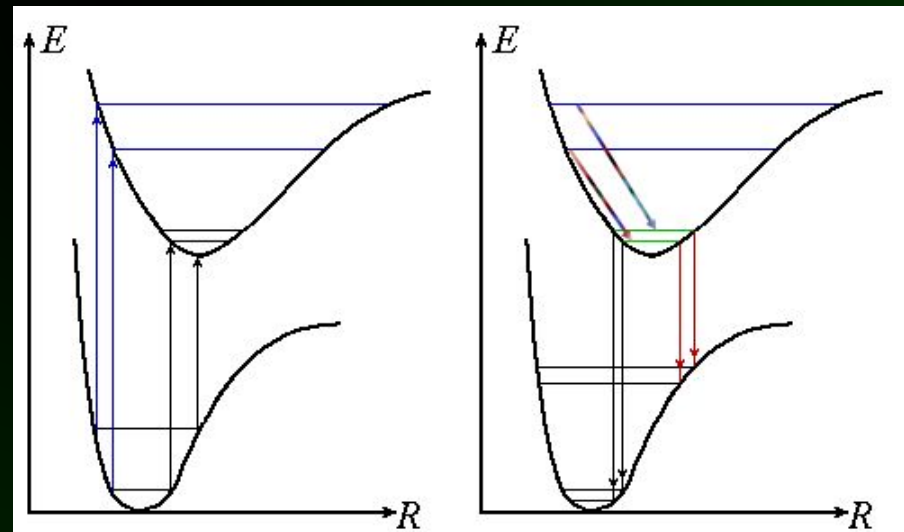
ВЕТВИ



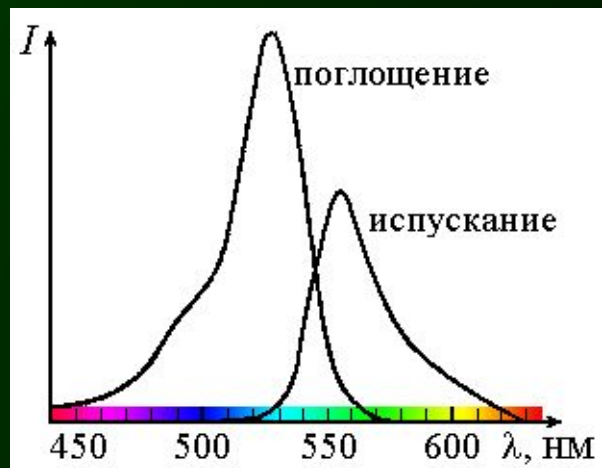
Принцип Франка–Кондона



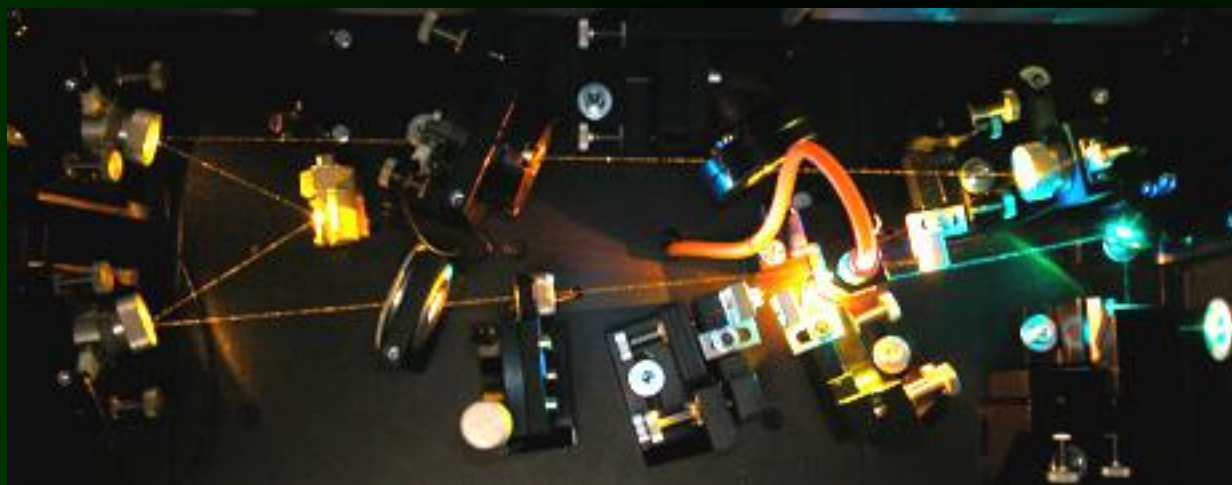
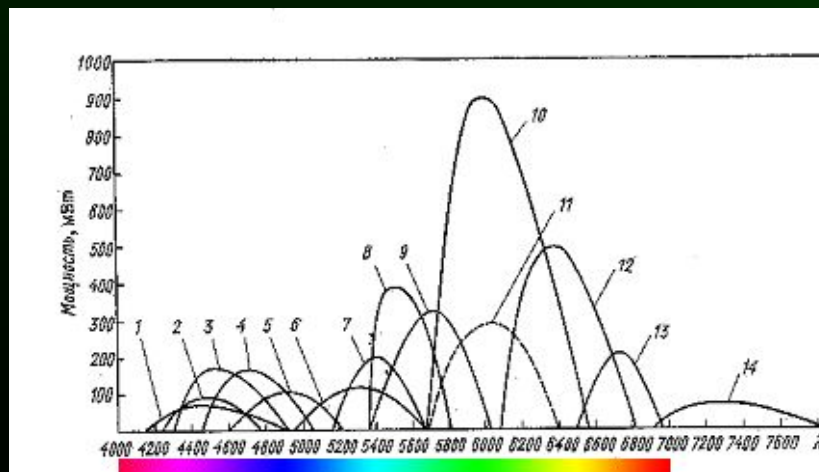
$$W = \left| \int \psi'_{v'}(R) \psi''_{v''}(R) dR \right|^2$$



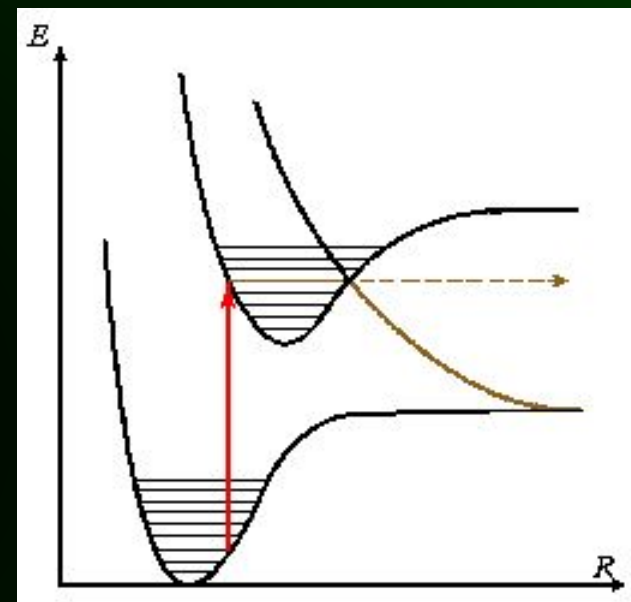
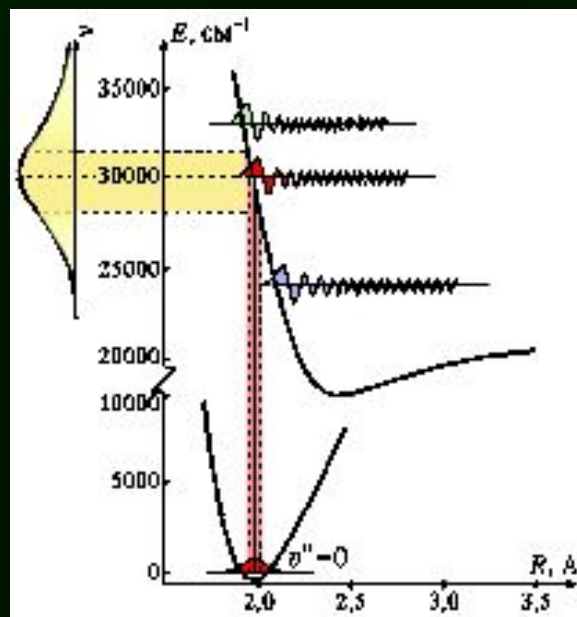
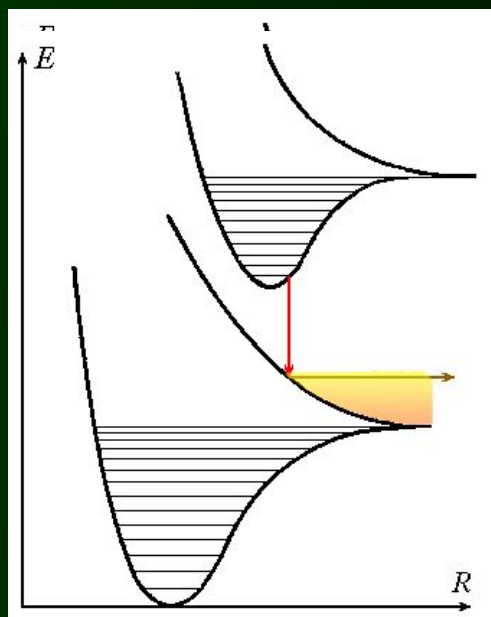
Лазеры на красителях



Родамин 6G



Сплошные спектры



Особенности молекулярных спектров

Спектры состоят из полос, каждая из которых содержит множество близких линий

Полосы имеют резкий кант с одной стороны

Полосы поглощения и испускания могут быть смещены друг относительно друга

Наличие сплошных участков спектров поглощения и испускания, не связанных с ионизацией