

## **Квантовая механика молекул (32 час.)**

### **Строгие законы сохранения (3 час.)**

1. Коллективные переменные.
2. Операторы импульса и момента импульса в коллективных переменных.
3. Теорема Вигнера-Гиршфельдера.
4. Функции Вигнера.
5. Учет спина электронов.

### **II. Адиабатическое приближение (3 час.)**

1. Приближение Борна-Оппенгеймера.
2. Теорема Братцева.
3. Вариационное адиабатическое приближение.

### **III. Двухатомные молекулы (16 час.)**

1. Нерелятивистский гамильтониан двухатомных молекул.
2. Свойства симметрии электронных термов.
3. Ядерное уравнение. Разделение колебательного и вращательного движений.
4. Решение колебательного уравнения в гармоническом приближении. Электронная, колебательная и вращательная энергии. Ангармонические поправки.
5. Учет спин-орбитального взаимодействия. Случаи "а" и "б" по Гунду.
6. Строгие свойства симметрии стационарных состояний двухатомных молекул.
7. Спектры двухатомных молекул. P, Q и R -ветви. Факторы Хенля-Лондона.
8. Неадиабатические поправки к волновым функциям. Л-удвоение.

### **IV. Многоатомные молекулы (10 час.)**

1. Оператор кинетической энергии.
2. Колебательный спектр. Колебательный момент молекул типа симметрического волчка и линейных молекул. Резонанс Ферми. Теория CO -лазера.
3. Вращательный спектр молекул типа шарового и симметрического волчка.
4. Дискретное квазиклассическое приближение. Вращательные спектры молекул типа асимметрического волчка.
5. Эффекты Яна-Теллера и Реннера.