

Электронные, колебательные и вращательные переходы в двухатомной молекуле

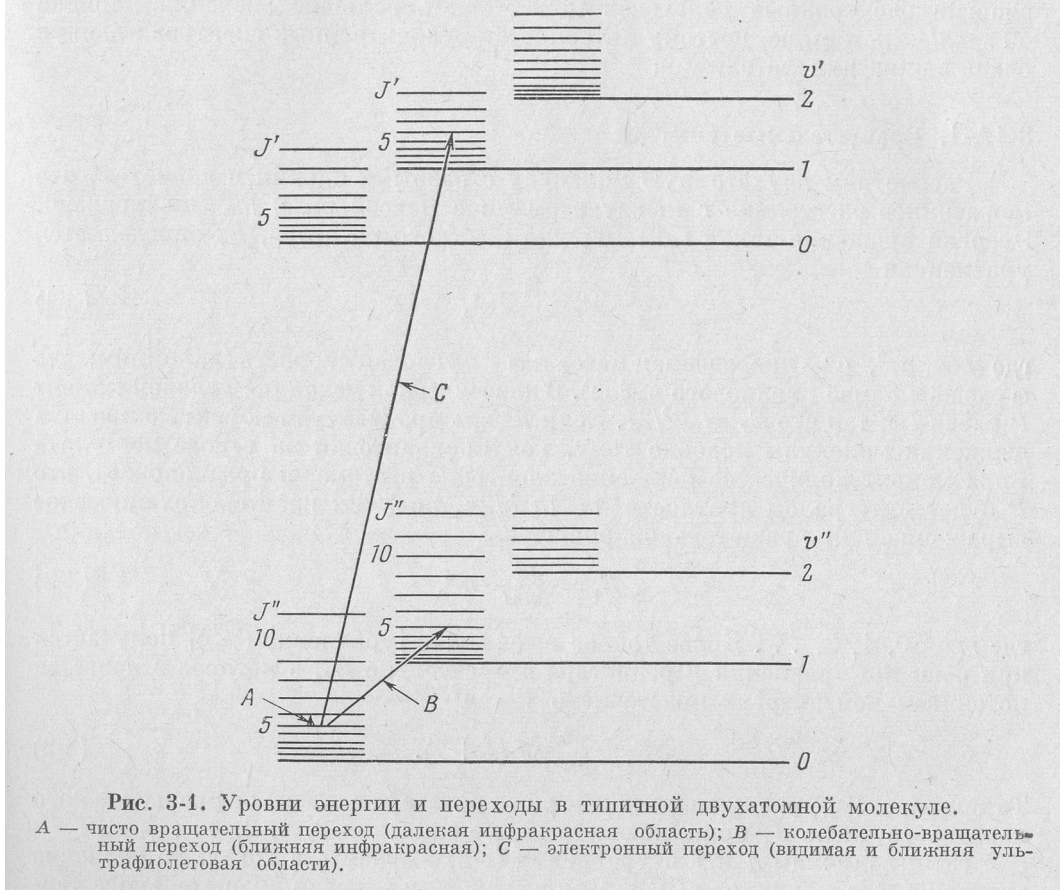


Рис. 3-1. Уровни энергии и переходы в типичной двухатомной молекуле. А — чисто вращательный переход (далекая инфракрасная область); В — колебательно-вращательный переход (ближняя инфракрасная); С — электронный переход (видимая и ближняя ультрафиолетовая области).

Чисто вращательный спектр HCl

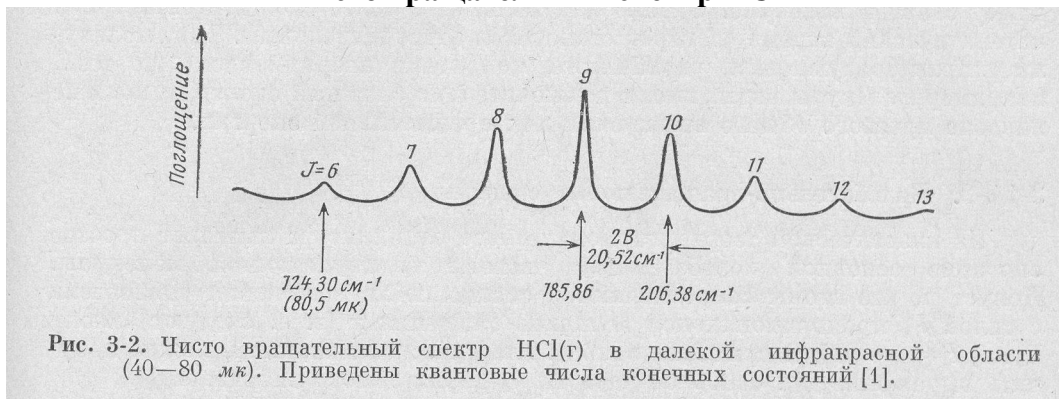


Рис. 3-2. Чисто вращательный спектр HCl(г) в далекой инфракрасной области (40–80 μm). Приведены квантовые числа конечных состояний [1].

Колебательно-вращательный спектр HCl

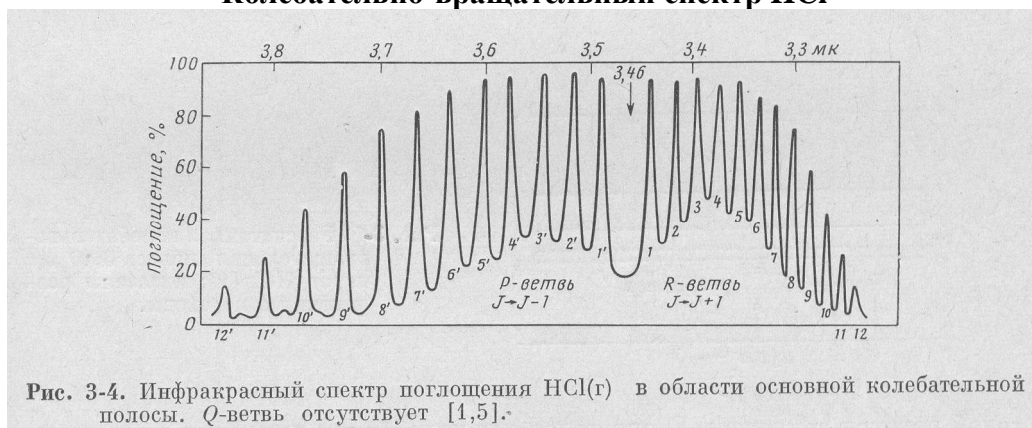


Рис. 3-4. Инфракрасный спектр поглощения HCl(г) в области основной колебательной полосы. Q-ветвь отсутствует [4,5].

Колебательно-вращательные переходы в HCl

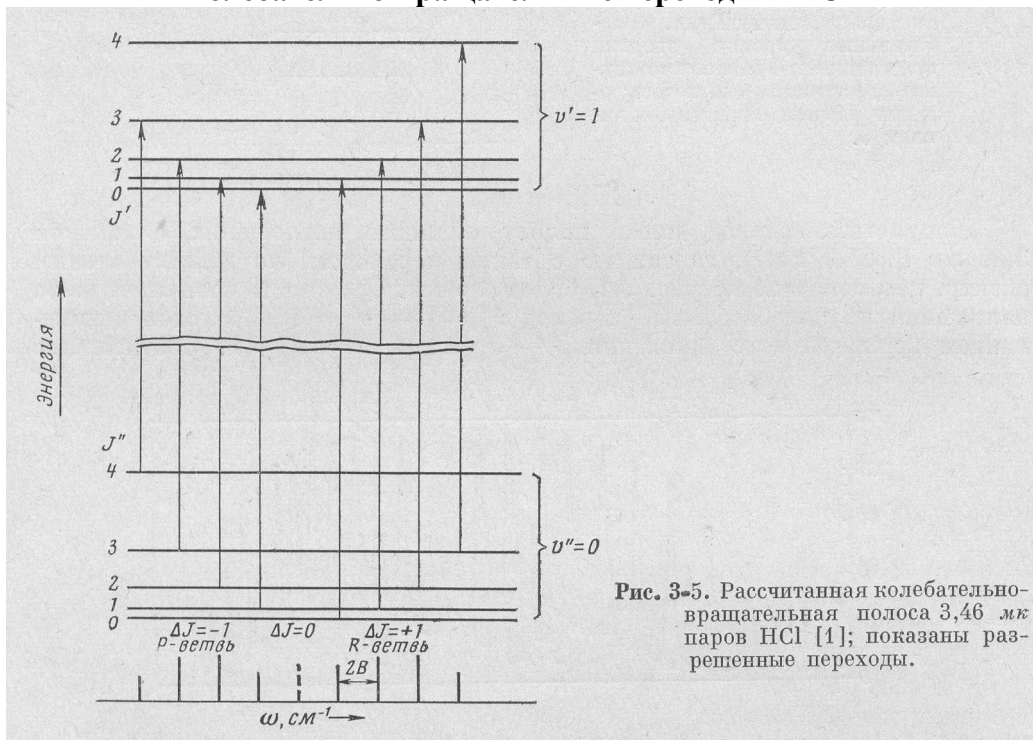


Рис. 3-5. Рассчитанная колебательно-вращательная полоса 3,46 мк паров HCl [1]; показаны разрешенные переходы.

Колебательные уровни энергии (ангармонический осциллятор)

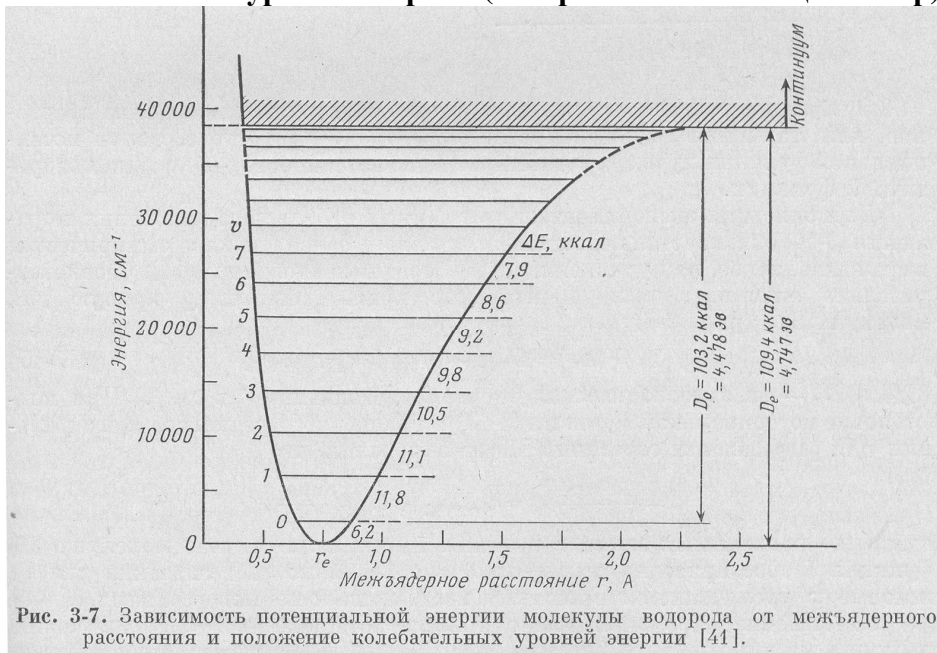


Рис. 3-7. Зависимость потенциальной энергии молекулы водорода от межъядерного расстояния и положение колебательных уровней энергии [41].

Электронно-колебательные переходы

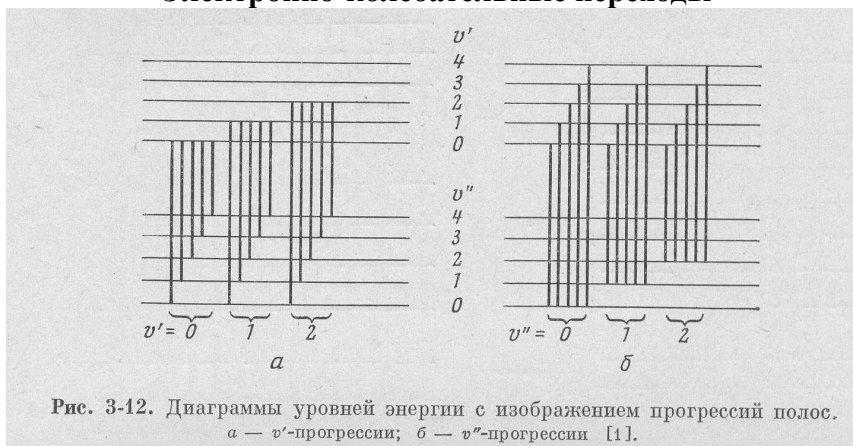


Рис. 3-12. Диаграммы уровней энергии с изображением прогрессий полос. а — v' -прогрессии; б — v'' -прогрессии [1].

Потенциальные кривые двухатомной молекулы

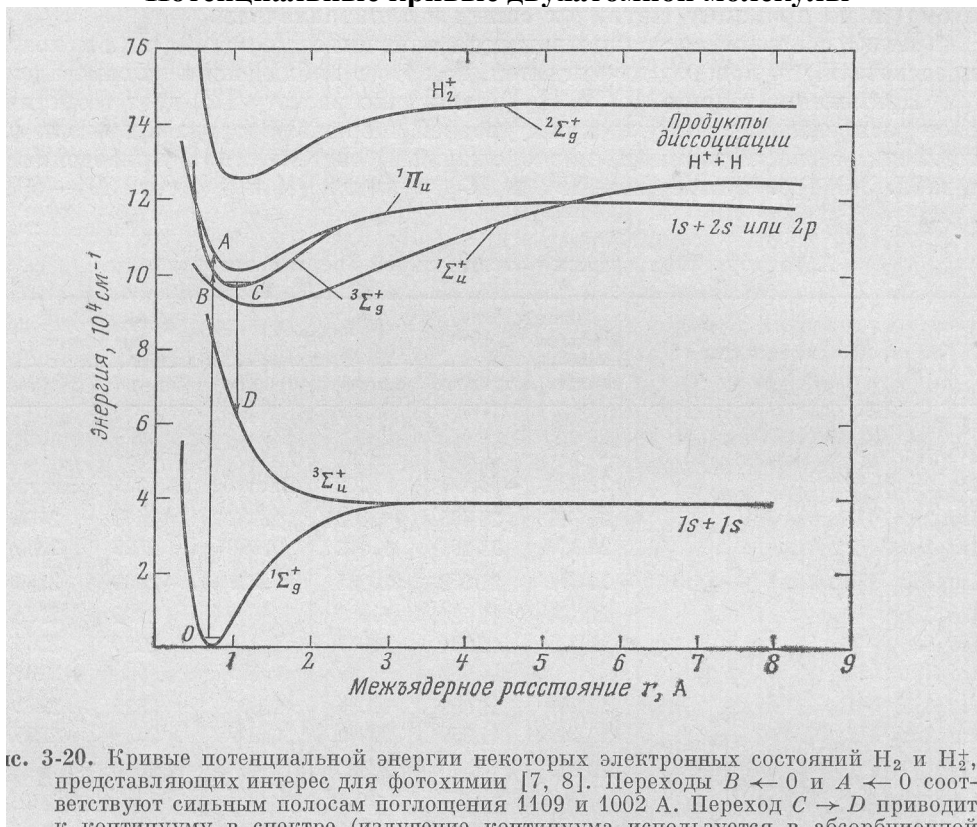


рис. 3-20. Кривые потенциальной энергии некоторых электронных состояний H_2 и H_2^+ , представляющих интерес для фотохимии [7, 8]. Переходы $B \leftarrow 0$ и $A \leftarrow 0$ соответствуют сильным полосам поглощения 1109 и 1002 А . Переход $C \rightarrow D$ приводит к континууму в спектре (излучение континуума используется в абсорбционной

Интенсивности в электронно-колебательных спектрах

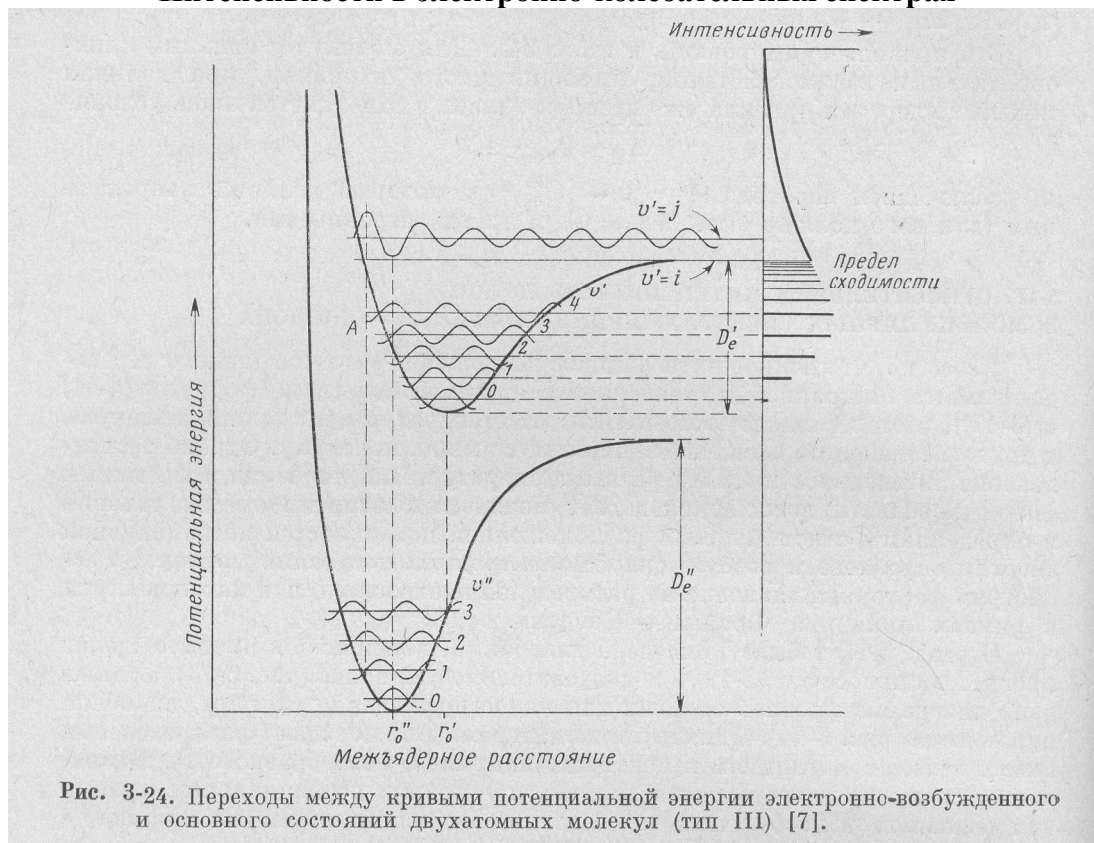


Рис. 3-24. Переходы между кривыми потенциальной энергии электронно-возбужденного и основного состояний двухатомных молекул (тип III) [7].

