

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ИНТЕНСИВНОСТЕЙ В СПЕКТРАХ ГИПЕРКОМБИНАЦИОННОГО
РАССЕЯНИЯ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ**

А.А.Анашкин, Т.Г.Бурова

Саратовский государственный университет

Предложено распространить метод прямого квантово-механического расчета, ранее применявшийся для анализа распределения интенсивностей в спектрах резонансного комбинационного рассеяния и двухфотонного поглощения многоатомных молекул, на спектры резонансного гиперкомбинационного рассеяния (РГКР). Это позволило описать указанные виды спектров с единой точки зрения, опираясь на общий набор параметров. Проведены расчеты распределения интенсивностей в спектрах циклических молекул как в приближении Франка-Кондона, так и в приближении Герцберга-Теллера. Результаты расчетов показали: 1) недостаточность использования приближения Франка-Кондона для получения удовлетворительного согласия с экспериментальными данными; 2) необходимость учета вклада возбужденных электронных состояний (ВЭС), ближайших к «резонансному», особенно принимая во внимание значение сил осцилляторов соответствующих переходов и разности энергий возбуждающего излучения и электронного перехода; 3) значительную роль электронно-колебательного взаимодействия и эффекта Герцберга-Теллера.

Получены относительные интенсивности линий в спектрах РГКР фторбензола (резонанс с переходом в первое возбужденное электронное состояние), хлорбензола (резонанс с переходом во второе ВЭС) и аденина (резонанс с третьим ВЭС) с учетом вклада 5-10 ближайших к «резонансному» ВЭС. Полученные данные свидетельствуют о наличии общих черт распределения интенсивностей в спектрах РГКР и РКР низкосимметричных молекул. Все наиболее интенсивные в спектрах РКР линии оказались интенсивными и в спектрах РГКР. Отмечено сходство распределения интенсивностей и среди линии средней интенсивности. Достигнуто удовлетворительное соответствие результатов расчета экспериментальным данным.