

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ «ВОЗМУЩЕННЫХ» МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ НА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОМ УРОВНЕ ТОЧНОСТИ

А.В.Столяров

кафедра лазерной химии химического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова

Обсуждаются современные методы лазерной спектроскопии и неэмпирического моделирования электронной структуры как источников информации об энергетических, радиационных, магнитных и электрических свойствах «возмущенных» состояний двухатомных молекул, необходимой, в частности, для оптимизации лазерного синтеза и стабилизации ультрахолодных молекулярных ансамблей в основном ровибронном состоянии. На примере димеров щелочных металлов продемонстрирована возможность построения прецизионных неадиабатических моделей описания «промежуточных» электронно-возбужденных состояний на экспериментальном (спектроскопическом) уровне точности, что принципиально важно для поиска эффективных путей оптической конверсии.