

Для расчета интенсивностей колебательных спектров :

Программа вызывается командой `fd3s-om-vsp`

Для запуска нужны файлы:

`рес.dat`

`input.dat`

`dip.dat` (образцы в `'/home/students/ОН/vib-sp'`).

В файле выдачи `spectrum.dat`:

первая колонка - частота перехода

вторая колонка - интеграл - он почти равен нулю - ортогональность
колебат.волновых функций!

третья колонка - нужный вам матричный элемент (не забудьте возвести его в
квадрат!)