Колебательно-вращательная задача

Радиальное уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dR^2} + V(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{\mu R^2}\right) \cdot \Psi^i_{vib}(R|J) = E_i(J) \cdot \Psi^i_{vib}(R|J)$$

$$\mathbf{J^2} \cdot \Psi_{rot}(\phi,\theta) = \hbar^2 J(J+1) \cdot \Psi_{rot}(\phi,\theta)$$

Матричный элемент перехода

$$M_{ij} = \left\langle \Psi^i_{rot}(\phi,\theta) \cdot \Psi^i_{vib}(R|J) | d(R) | \Psi^j_{vib}(R|J) \cdot \Psi^j_{rot}(\phi,\theta) \right\rangle = (S_{ij})^{1/2} \cdot \ \mu_{ij}$$

$$\mu_{ij} - \text{fd3s-sp}$$

$$S_{J\to J-1} = \frac{J}{2J+1}; S_{J\to J+1} = \frac{J+1}{2J+1}$$

Коэффициенты Эйнштейна

$$A_{ij} = \frac{8\pi^2}{3\hbar\epsilon_0}\nu^3_{ij} M^2_{ij}$$

$$\frac{8\pi^2}{3\hbar\epsilon_0} \approx 3.137 \cdot 10^{-7} \left[\frac{s^{-1}}{(cm^{-1})^3 \cdot D^2}\right]$$

Спектр поглощения

$$I_{ij} \sim N_i \cdot M^2_{ij}$$

$$k_B \approx 0.695[cm^{-1}/K]$$