

Российская академия наук

ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Том 98 № 5 2024 Май

Основан в 1930 г.
Выходит 12 раз в год
ISSN: 0044-4537

*Журнал издается под руководством
Отделения химии и наук о материалах РАН*

Главный редактор
академик РАН А.Ю. Цивадзе

Редакционная коллегия:

В.В. Азатян, В.Н. Андреев, О.В. Батищев, В.В. Болдырев,
Е.В. Болдырева, А.К. Буряк (*заместитель главного редактора*),
М.А. Воротынцев, К.С. Гавричев, Ю.Г. Горбунова, А.А. Горюнков,
С.Н. Калмыков, М.Г. Киселев, Т.Л. Кулова, Л.М. Кустов,
А.Л. Максимов, В.П. Мешалкин, В.Н. Пармон, Р.З. Сагдеев,
М.Ю. Синев, А.В. Столяров, С.Ф. Тимашев, Ю.К. Товбин,
И.А. Успенская (*ответственный секретарь*),
А.Ю. Цивадзе, В.П. Чижков

Международный консультативный совет:

А.Т. Бэлл (США), Ф. Вейнхольд (США),
О. Гошински (Швеция), Ж.-А. Дальмон (Франция),
Э. Дриоли (Италия), Е. Ковач (Швейцария),
У.А. Стилл (США), Х. Стратман (Нидерланды),
Дж.М. Томас (Великобритания), Д.В. Шусмит (Канада)

Зав. редакцией Н.М. Беленкина

Адрес редакции: 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
E-mail: physchem@pran.ru

Москва
ФГБУ «Издательство «Наука»

СОДЕРЖАНИЕ

Том 98, номер 5, 2024

XX Симпозиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (HighRus-2023)

Предисловие к специальному выпуску, посвященному симпозиуму HighRus-2023

А. В. Столяров, К. В. Казаков, В. И. Перевалов 3

ОБЗОРНЫЕ СТАТЬИ

Эксперименты по молекулярной спектроскопии на новосибирском терагерцовом лазере на свободных электронах

В. В. Кубарев, Е. Н. Чесноков 5

Спектроскопия высокого разрешения двухатомных молекул вблизи порога диссоциации

А. В. Столяров 17

Информационная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов»

В. В. Казаков, В. Г. Казаков, О. И. Мешков, А. С. Яценко 21

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Вращение молекул и обобщенные уравнения Эйлера

С. В. Петров 30

О векторной модели преобразования оператора кинетической энергии многочастичных систем к описанию внутренних движений

Б. К. Новосадов 41

О физическом смысле параметров потенциалов межмолекулярного взаимодействия в асимптотической теории крыльев линий

О. Б. Родимова 48

Трансформация комплексной колебательной восприимчивости линейной молекулы под действием столкновений на примере полосы ν_3 диоксида углерода

А. П. Коузов, Н. Н. Филиппов, Н. И. Егорова, Р. Е. Асфин 58

Асимптотическое поведение ридберговских состояний молекулярного водорода в пределе объединенного атома

А. С. Лихарев, Е. А. Пазюк, А. В. Столяров 63

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Исследование спектра ионизации 6,6-диметил-фульвена методами алгебраического диаграммного построения и связанных кластеров

А. Б. Трофимов, А. Д. Скитневская, А. М. Белоголова, Э. К. Якимова, Е. В. Громов 70

Неэмпирический расчет редуцированных квартичных, секстичных и октичных постоянных эффективных колебательно-вращательных гамильтонианов на основе операторной теории возмущений

И. М. Ефремов, Д. В. Миллионщиков, С. В. Краснощеков 78

Влияние отталкивательных электронных состояний на параметры тонкой структуры основного электронного состояния радикала ОН

С. В. Козлов, Е. А. Пазюк, А. В. Столяров 90

Вычисление колебательно-вращательных частот и RKR-потенциалов молекулы HBr

Т. И. Величко, С. Н. Михайленко 95

Двухтемпературный анализ распределения интенсивностей
в ровибронных спектрах радикала CN

В.А. Терашкевич, Е.А. Пазюк

102

СПЕКТРОСКОПИЯ И ФИЗИКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

PQN-Code — программа на основе полиномов квантовых чисел для расчета
центров линий инфракрасного спектра многоатомных молекул и матричных
элементов дипольного момента

М. Ю. Юрьев, В. М. Вахромов, А. О. Волощенко, Л. Б. Клинк

108

Некоторые особенности конформационной динамики молекул фторангидрида
и хлорангидрида циклопропановой кислоты в основном электронном состоянии

Г.А. Акимов, В.А. Батаев, С.С. Степин

117
