539.194(049.3)

КОЛЕБАНИЯ МОЛЕКУЛ

М. В. Волькенштейн, Л. А. Грибов, М. А. Ельяшевич, Б. И. Степанов. Колебания молекул. Изд. 2-е, перераб. М., «Наука» (Главная редакция физико-математической литературы), 1972, 700 стр.

Первое издание монографии М. В. Волькенштейна, М. А. Ельяшевича и Б. И. Степанова, вышедшее в 1949 г. в двух томах и удостоенное Государственной премии СССР, было с удовлетворением встречено многочисленными читателями, работающими в различных областях химической физики, физической химии, теоретической химии и других смежных областях. Появление этой монографии, написанной авторами, разработавшими в начале 40-х годов основы общей теории колебаний молекул, способствовало проведению многочисленных исследований по теории колебательных спектров и ее различных применений.

За истекшие двадцать четыре года со времени выхода первого издания книги «Колебания молекул» в теории колебаний молекул и изучении молекулярных спектров был достигнут весьма существенный прогресс. За это время был проведен расчет колебательных спектров очень большого числа молекул, в частности, ряда важных классов органических соединений, была развита далее теория интенсивностей и поляризаций колебательных спектров, нашли применение в практике расчета колебаний электронно-вычислительные машины, разработана соответствующая теория и достигнуты другие успехи. Естественно, что повторное издание монографии «Колебания молекул» является весьма своевременным.

Второе издание фундаментально отличается от первого. Хотя принятое в нем расположение материала в основном соответствует первому изданию, монография, по существу, написана заново. Эта большая работа по подготовке нового издания была проведена Л. А. Грибовым, активно работающим в области теории колебательных спектров и внесшим за последние 10—15 лет большой вклад в ее развитие, особенно по теории интенсивностей в ИК спектрах и по теории и практике применения электронно-вычислительных машин к расчету колебаний молекул.

Фундаментальная переработка первого издания монографии «Колебания молекул» вполне оправдана в связи с необходимостью освещения новых методов расчета колебательных спектров и их интенсивностей с помощью электронно-вычислительных машин. Оправдано также и значительное сокращение объема монографии по сравнению с первым изданием (с 85 печатных листов до 44) и исключение ряда разделов, например, молекулярного взаимодействия, вычисления термодинамических функций, проявления поворотной изомерии в колебательных спектрах и др. Все эти вопросы требуют самостоятельного рассмотрения, и по ряду из них появились специальные монографии.

Новое издание книги «Колебания молекул» состоит из двух частей. Первая часть (гл. 1—14) посвящена общей теории колебаний молекул, а вторая (гл. 15—21) — теории интенсивностей в ИК спектрах и спектрах комбинационного рассеяния. В начале монографии приведено небольшое математическое введение, а в конце дано приложение — о применении математической логики в колебательной спектроскопии, написанное Л. А. Грибовым совместно с М. Е. Эляшбергом.

Общая теория колебаний молекул в первой части нового издания излагается на основе квантовомеханических представлений о строении молекул (гл. 1). В гл. 2 и 3 подробно рассматриваются свойства матриц кинетической и потенциальной энергии, причем вводится матрица **B**, описывающая переход от декартовых координат к естественным и оказывающаяся очень полезной при построении методики расчета колебаний при применении электронно-вычислительных машин. В последующих главах первой части (гл. 4—7) рассматриваются свойства и симметрия равновесной конфигурации молекулы, симметрия колебаний, построение координат симметрии и применение зависимых координат.

Гл. 8—13 посвящены вопросам методики решения прямой и обратной колебательной задачи. Решение этих задач, как и в первом издании, иллюстрируется расчетом колебательных спектров метана, этана и этилена (гл. 11). В гл. 12 рассмотрена теория быстрого расчета частот колебаний сложных молекул. Особо следует отметить весьма нужную гл. 13, в которой излагается методика решения прямой и обратной задач при применении электронно-вычислительных машин. Первая часть заканчивается изложением в гл. 14 основ теории характеристических колебаний многоатомных молекул, рассмотрением метода возмущений (в простом и квантовомеханическом вариантах) и его применением к расчету частот и форм колебаний молекул, обладающих свойствами периодичности.

Некоторым недостатком нового издания является отсутствие в его первой части особой главы или параграфа, в котором было бы рассмотрено вековое уравнение и его свойства (ср. стр. 179—185 тома I первого издания).

Весьма логично построена и вторая часть нового издания рецензируемой монографии. После изложения в гл. 15 общих положений квантовомеханической теории интенсивностей ИК спектров и спектров комбинационного рассеяния многоатомных молекул, эти положения на основе валентно-оптической схемы последовательно применяются в последующих главах к построению теории интенсивностей в ИК спектрах, причем сначала рассматривается расчет интенсивностей основных частот и задача определения электрооптических параметров на основании опытных данных (гл. 16 и 17), а затем вопросы интенсивности обертонов и составных частот (гл. 19). В гл. 18 изложены важные и полезные следствия развитой в гл. 16 и 17 теории — теория характеристических интенсивностей и интенсивности ИК спектров периодических молекул конечной длины и полимеров.

Последние две главы монографии (гл. 20 и 21) посвящены валентно-оптической теории интенсивностей в спектрах комбинационного рассеяния и вопросу о характеристических интенсивностях в этих спектрах.

Весьма оправдано включение в текст второго издания отмеченного выше приложения по математической логике, которое окажется, несомненно, полезным при отыскании характеристических частот и решении некоторых других задач.

Анализ содержания второго издания монографии «Колебания молекул» показывает, что издана весьма нужная книга для всех занимающихся вопросами строения молекул и различными применениями молекулярной спектроскопии, в частности, ИК спектроскопии. Написанное на высоком научном уровне с глубоким знанием дела новое издание «Колебания молекул» будет с удовлетворением встречено читателями.

И. Н. Годнев