

НЕАДИАБАТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ: ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ ИОННО-ПАРНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ГАЛОГЕНОВ

Бучаченко А.А.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедра физической химии

Описание переноса электронной энергии в молекулярных столкновениях остается фундаментальной проблемой моделирования элементарных процессов в газовой фазе, что связано как с необходимостью выхода за рамки приближения Борна-Оппенгеймера, так и с крайней фрагментарностью экспериментальных данных. Изучение столкновений молекул галогенов, возбужденных в т.н. ионно-парные (ИП) электронные состояния, предоставляет уникальные возможности для развития теории неадиабатических процессов, ее экспериментальной проверки и выявления общих закономерностей неадиабатической динамики. Для их исследования развита полная теоретическая методология, включающая (1) вывод строгих уравнений квантовой теории рассеяния для молекул, подчиняющихся случаю связи (с) по Гунду, и разработку на этой основе приближенной техники решения задачи рассеяния; (2) создание аналитической полуэмпирической модели для поверхностей потенциальной энергии и матричных элементов взаимодействия состояний в диабатическом представлении; (3) развитие специальной теории возмущений по межмолекулярному взаимодействию для учета специфики электронной структуры ИП состояний.

Развитая техника применена для расчета констант скорости и распределений продуктов столкновений молекул I_2 и Br_2 в ИП состояниях $E0^+_g$, $f0^+_g$ и $D0^+_u$ с атомными и молекулярными партнерами [1,2]. Полученные результаты согласуются с экспериментальными и позволяют выявить важные общие особенности динамики неадиабатических процессов.

Автор признателен своим ученикам Т.В. Щербулю (Институт теоретической атомной и молекулярной физики, США) и Ю.В. Сулейманову (Оксфордский университет, Англия), коллегам-экспериментаторам из групп А.М. Правилова (СПбГУ) и Т.А. Стефенсона (Свартсмурский колледж, США) и РФФИ за поддержку (02-03-32676, 05-03-32371, 08-03-00352).

[1]. T. V. Tscherbul, A. A. Buchachenko, M. E. Akopyan, S. A. Poretsky, A. M. Pravilov, and T. A. Stephenson, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6**, 3201 (2004).

[2]. M. E. Akopyan, S. S. Lukashov, S. A. Poretsky, A. M. Pravilov, A. S. Torgashkova, A. A. Buchachenko, and Yu. V. Suleimanov, *J. Chem. Phys.* **129**, 114309 (2008).