**Бедняков, Александр Сергеевич.**

## Особенности перемещения протонов в кластерах воды : неэмпирическая модель : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04 / Бедняков Александр Сергеевич; [Место защиты: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2017. - 161 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Бедняков, Александр Сергеевич

Оглавление

Введение

1 Литературный обзор

1.1 Типы структур

1.1.1 Основные характеристики молекулы воды и водородной связи

1.1.2 Перестройка сетки водородных связей

1.1.3 Общие сведения о кластерах воды

1.1.4 Особенности кластерных структур разного размера

1.1.5 Водородные связи в кластерах

1.1.6 Сетки водородных связей воды и льдов

1.2 Перемещение протонов в сетке водородных связей

1.2.1 Аномальная подвижность протонов

1.2.2 Механизм Гроттгуса

1.2.3 Перемещение протонов при бимолекулярных столкновениях кластеров воды

1.2.4 Структурные особенности процесса переноса протонов

1.2.5 Согласованное перемещение протонов

в протонированных системах

1.2.6 Перемещение протонов в непротонированных системах

1.2.7 Индуцированная лазерным излучением диссоциация воды

2 Обсуждение результатов

2.1 Модельные системы и квантово-химический метод

2.1.1 Выбор модельных систем

2.1.2 Квантово-химические методы расчета

2.2 Характеристики кластеров на пути процесса

перемещения мостиковых протонов в кольце

2.2.1 Устойчивые структуры модельных кластеров

2.2.2 Гармонические частоты кластерных структур

2.2.3 Анализ переходных состояний

2.2.4 Пути наименьшей энергии и внешние стенки потенциала

2.3 Эволюция систем в модельных потенциалах

2.3.1 Двуямный потенциал

2.3.2 Аппроксимация сечений поверхности потенциальной энергии

2.3.3 Собственные состояния модельных систем

2.3.4 Оценка вероятностей и времён туннелирования

2.4 Воздействие лазерного излучения

2.4.1 Двухуровневый случай

2.4.2 Многофотонные процессы

2.4.3 Двухфотонный резонанс в трехуровневой системе

2.4.4 Трёхфотонный резонанс в четырёхуровневой системе

2.4.5 Оценки времён возбуждения высоколежащих состояний

Выводы

Список литературы