**Щербуль, Тимур Викторович.**

## Неадиабатические переходы, индуцированные межмолекулярным взаимодействием: системы инертный газ-галоген : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.17. - Москва, 2005. - 135 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Щербуль, Тимур Викторович

Введение

1 Индуцированные столкновениями неадиабатические переходы: опыт предыдущих исследований

1.1 Ионно-парные состояния молекулы 12.

1.2 Индуцированный столкновениями обмен энергией между ионно-парными состояниями

1.2.1 Экспериментальные исследования.

А 1.2.2 Теоретические модели.

1.3 Теоретические методы исследования динамики неупругих столкновений

1.3.1 Поверхности потенциальной энергии для систем Rg-•• Х

1.3.2 Теория неупругих столкновений двухатомной молекулы с атомом

1.3.3 Метод сильной связи каналов.

1.3.4 Приближение связанных состояний.

1.3.5 Приближение внезапных возмущений бесконечного порядка

1.3.6 Приближение искаженных волн.

1.3.7 Полуклассическое приближение.

1.3.8 Константы скорости неупругих столкновений.

2 Динамика неадиабатических переходов, индуцированных столкновениями: I2(E,f) + Rg

2.1 Полуклассический метод и его применение к столкновениям h{E) + Аг

2.2 Квантовая теория неадиабатических процессов в столкновениях молекул в случае Гунда (с) и бесструктурных частиц.

2.2.1 Молекулярный гамильтониан и базисные функции каналов

2.2.2 Система сильно связанных уравнений

2.2.3 Приближение внезапных возмущений бесконечного порядка

2.2.4 Экспоненциальное приближение искаженных волн.

2.3 Алгоритмы численных расчетов.

2.3.1 Расчеты по методу полуклассического пути.

2.3.2 Расчеты по методам ЭИВ и СС-ВВБП.

3 Электронная структура комплексов Rg- • • 12 в ионно-парных состояниях

3.1 Метод ДФВМ TBI для ИП состояний комплексов Rg- • -12.

3.2 Потенциалы взаимодействия Rg-I±.

3.3 Взаимодействие на больших расстояниях.

3.4 ППЭ ионно-парных состояний комплексов Rg- • • 12.

4 Столкновения молекулы 12 в состояниях первого яруса с атомами инертных газов

4.1 Сравнение теоретических подходов на примере системы 12 4- Аг

4.2 Столкновения 12(E) + Rg: роль дальнодействующих взаимодействий

5 Столкновения молекулы 12 в состояниях второго яруса с атомами инертных газов

5.1 Столкновения 12(/, у/ = 8 — 17) + Rg.

5.2 Столкновения с молекулой 12(Х) и атомами Rg: сравнительный анализ

5.3 Сравнение переходов Е —+ D и / —► F.

6 Механизмы и правила отбора неадиабатических переходов в столкновениях I2 + Rg

Выводы