

# Неадиабатические переходы между ионно-парными состояниями молекулы I<sub>2</sub> в столкновениях с молекулой CF<sub>4</sub><sup>1</sup>

Сулейманов Юрий Валерьевич

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: [suleimanov@phys016-amd3.chem.msu.ru](mailto:suleimanov@phys016-amd3.chem.msu.ru)

Проведены теоретические исследования неадиабатических переходов при столкновении молекулы йода, возбужденной в ионно-парное состояние  $E0_g^+$ , с молекулой CF<sub>4</sub>. Для исследования динамики столкновений предложена приближенная модель, рассматривающая сферический молекулярный партнер по столкновению CF<sub>4</sub> как эффективный атом с внутренней колебательной структурой.

Поверхности потенциальной энергии и матричные элементы связи получены на основе приближения двухатомных фрагментов в молекуле. Для правильного учета взаимодействий на больших расстояниях рассмотрена специальная форма теории возмущений по межмолекулярному взаимодействию [1]. Установлено наличие поправки в матричный элемент неадиабатической связи ионно-парных состояний, обусловленной взаимодействием дипольных моментов электронных переходов в молекуле I<sub>2</sub> и колебательных переходов в молекуле CF<sub>4</sub>. Динамика столкновений I<sub>2</sub>(E) + CF<sub>4</sub> исследована с использованием метода сильной связи электронно-колебательных каналов и приближения внезапных возмущений бесконечного порядка для вращательных каналов. Рассмотрен широкий интервал начальных колебательных возбуждений  $\nu_E$  молекулы йода. Несмотря на приближенный характер, модель обеспечивает достаточно хорошее согласие с доступными экспериментальными данными о константах скоростей неадиабатических переходов и колебательных распределениях продуктов [2,3]. Обнаружено, что взаимодействие дипольных моментов переходов в сталкивающихся молекулах существенно влияет на динамику столкновений. Неадиабатические переходы, сопровождающиеся возбуждением колебательных мод CF<sub>4</sub>, доминируют при  $\nu_E \geq 8$ .

В то же время детальное сопоставление с экспериментальными колебательными распределениями [2,3] и с предыдущими исследованиями столкновений с атомом Ar [1] свидетельствует о том, что вращательные степени свободы играют значительную роль в неадиабатической динамике. Пренебрежение этим фактором в настоящей модели не позволяет описать измеренные колебательные распределения количественно.

Рассмотренная модель, позволяющая рассматривать электронно-колебательный перенос энергии в молекулярных столкновениях без существенных теоретических сложностей, может быть полезна для исследования различных процессов с участием высокосимметричных молекул.

## Литература

1. Т.В. Щербуль, Ю.В. Сулейманов и А.А. Бучаченко. Дальнейшее взаимодействие и динамика неадиабатических переходов в столкновениях молекулы I<sub>2</sub>(E) с атомами инертных газов. // *Ж. Физ. Химии.* -2006.-Т.80.-С.2196-2206.
2. М. Е. Акopyan, А. М. Pravilov, М. В. Stepanov and А. А. Zakharova. The collision-induced I<sub>2</sub>(E0<sub>g</sub><sup>+</sup>  $\xrightarrow{M}$  D0<sub>u</sub><sup>+</sup>) transitions, M=He, Ar, N<sub>2</sub>, CF<sub>4</sub>. // *Chem. Phys.* -2003.-V.287.-P.399-410.
3. J. M. Hutchison, B. R. Carlisle and T. A. Stephenson. Ro-vibrational resonance effects in collision-induced electronic energy transfer: I<sub>2</sub>(E,  $\nu=0-2$ ) + CF<sub>4</sub>. // *J. Chem. Phys.* -2006.-V.125.-P.194313-1-8.

<sup>1</sup> Тезисы доклады основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фона Фундаментальных Исследований (проект № 05-03-32371).