

Математическая модель молекулярных процессов: спектры и химические превращения

© Грибов*⁺ Лев Александрович и Михайлов Игорь Васильевич

Лаборатория молекулярного моделирования и спектроскопии. Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН (ГЕОХИ РАН), ул. Косыгина, 19. г. Москва, 119991. Россия.

Тел.: (499) 137-63-71. E-mail: l_gribov@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантовая теория молекул, молекулярные спектры, химические превращения.

Аннотация

Обсуждены общие вопросы моделирования объектов молекулярного мира. Существование нескольких устойчивых геометрических структур для группы атомов, находящихся в ограниченной области пространства, позволяет рассматривать широкую яму с высокими вертикальными стенками и дном в виде многоминимальной поверхности как наиболее естественный выбор формы потенциала. Появление наблюдаемых молекулярных образований можно тогда рассматривать как спонтанные переходы из стохастических состояний с высокоэнергетических уровней (неопределенные структуры в виде сгустка атомов) в состояния с конкретной геометрией на более низкие уровни потенциальных ям.

Показано, что перевернутая гауссова функция может быть одним из возможных вариантов выбора формы потенциальных ям. Такой потенциал позволяет физически естественно объяснить переходы из стохастической области в область локализованных состояний, так как нижний уровень стохастического состояния отвечает нулевой энергии, а между энергиями этих состояний возникает щель. В области минимума потенциала волновые функции близки к гармоническим, но по мере приближения к краям ямы расстояния между уровнями энергии связанных состояний уменьшаются. Потенциалы в виде суммы нескольких гауссовых функций легко трансформируются, а смешанные собственные функции таких потенциалов могут быть отличны от нуля как в ямах, так и в промежутках между ними, что и приводит к структурным преобразованиям.

Показано, что, опираясь на базовые положения теории молекулярных спектров, можно без привлечения эмпирических параметров построить математическую модель для описания сложных, меняющихся во времени молекулярных объектов. Сформулирован пошаговый алгоритм построения такой *ab initio* модели и показано, что область её применимости не ограничивается только внутримолекулярными процессами, а охватывает также и химические превращения. Предлагаемый подход открывает возможности для анализа кинетики химических превращений, прогноза развития процессов и их оптимизации на основе проведения компьютерных экспериментов.

Приведен пример общей системы дифференциальных уравнений, описывающих сложный многоступенчатый процесс превращений, включающий в себя структурные преобразования, реакции разложения и присоединения. Важно, что основными параметрами единой системы уравнений являются значения уровней энергии, вероятности переходов между ними и частоты квантовых биений, которые могут быть рассчитаны с помощью современных методов теории молекулярных спектров. Показан результат решения этой системы уравнений.