

Потенциальная энергия взаимодействия атомов электронно-возбужденных двухатомных молекул

© Умирзаков^{1,2*} Ихтиёр Холмаматович и Искандаров³ Илхам Кучкарович

¹ Научный фонд имени А.И. Бутлерова. ул. Бондаренко, 33-44. г. Казань, 420066.

Республика Татарстан. Россия.

² Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. ул. Кутателадзе, 1.

г. Новосибирск, 630090. Россия. E-mail: cluster125@gmail.com

³ Кафедра прикладной математики. Тихоокеанский государственный университет.

ул. Тихоокеанская, 136. г. Хабаровск, 680035. Россия.

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантовая теория молекул, молекулярные спектры, потенциал взаимодействия, уровни энергии, двухатомная молекула, электронно-возбужденное состояние.

Аннотация

Установлен явный аналитический вид потенциала взаимодействия, имеющего два минимума и один максимум и монотонно возрастающего до нуля при неограниченном увеличении расстояния между двумя атомами электронно-возбужденной двухатомной молекулы. Потенциал имеет шесть независимых параметров. Найдены связи параметров потенциала с параметрами (кривизной или шириной, глубиной, высотой, положением) минимумов и максимума потенциала, а также с параметрами асимптотики потенциала на больших расстояниях между атомами.

Найдена связь энергии активации распада связанных состояний системы, а также ширины и положения активационного барьера с параметрами двух минимумов, а также одного из двух минимумов. Установлена связь энергии активации и параметров активационного комплекса с параметрами асимптотики потенциала взаимодействия на больших расстояниях между центрами масс взаимодействующих молекул и положением и глубиной или положением и шириной или шириной и глубиной одного из двух минимумов, а также положениями или глубинами или ширинами двух минимумов потенциала.

Энергия активации, положение и ширина активационного барьера для связанных состояний являются таковыми и для метастабильных состояний (резонансов), если последние существуют.

Рассмотрены десять различных видов потенциальной энергии взаимодействия, когда число независимых друг от друга параметров уменьшается до пяти. Также рассмотрены тридцать три различных типов потенциала взаимодействия с четырьмя независимыми параметрами.

Потенциал может описывать все физически возможные случаи взаимодействия, включая случаи: наличия связанных состояний и метастабильных состояний; отсутствия связанных состояний и наличия метастабильных состояний; наличия связанных состояний и отсутствия метастабильных состояний; и отсутствия связанных и метастабильных состояний.

Показано, что замена расстояния в предложенной в настоящей работе потенциальной энергии взаимодействия между молекулами на монотонно-возрастающую неотрицательную функцию от расстояния с непрерывной второй производной дает бесконечный класс потенциалов взаимодействия с двумя минимумами и одним максимумом, монотонно увеличивающихся до нуля при неограниченном увеличении расстояния.