

## ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПАРНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

### $\text{Cs}^+-\text{Rb}^+$ И $\text{Cl}^--\text{I}^-$ В СИСТЕМЕ $\text{CsCl} + \text{RbI}$

### С ПОМОЩЬЮ ЛИНЕЙНОГО РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА

В. М. Азриель, В. М. Акимов, Л. Ю. Русин, М. Б. Севрюк

*Институт энергетических проблем химической физики РАН, г. Москва*

Взаимодействие двух молекул галогенидов щелочных металлов при энергиях выше тепловых является характерным примером многоканальной столкновительно-индуцированной диссоциации в четырехатомных системах, приводящей к образованию ионов и ионных комплексов. В нашей лаборатории в скрещенных молекулярных пучках были определены функции возбуждения  $\sigma = \sigma(E_{\text{col}})$  катионов  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{CsRbCl}^+$  и  $\text{CsRbI}^+$  в реакции  $\text{CsCl} + \text{RbI}$  в диапазоне энергий столкновения  $E_{\text{col}}$  от 2.7 до 9 эВ. Динамика этой реакции при таких  $E_{\text{col}}$  может быть с хорошей точностью описана в рамках квазиклассического траекторного моделирования на одной ионной поверхности потенциальной энергии, равной сумме шести парных межйонных потенциалов  $U$  в усеченной форме Риттнера  $U(R) = A \exp(-R/\rho) \pm 1/R - (\alpha_1 + \alpha_2)/2R^4 - C/R^6$  (в атомной системе единиц). Здесь  $R$  — межъядерное расстояние, а  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — поляризуемости соответствующих ионов.

Межйонные потенциалы в молекулах  $\text{CsCl}$ ,  $\text{RbI}$ ,  $\text{CsI}$  и  $\text{RbCl}$  достаточно надежно установлены из спектроскопических данных. Мы использовали измеренные функции возбуждения катионов в реакции  $\text{CsCl} + \text{RbI}$  для уточнения параметров потенциалов взаимодействия  $\text{Cs}^+-\text{Rb}^+$  и  $\text{Cl}^--\text{I}^-$  *одноименно* заряженных ионов. Особенно важным является определение т.н. *параметров мягкости*  $\rho$ , к изменению которых динамические характеристики реакции наиболее чувствительны. Область оптимальных пар параметров  $\rho_+ = \rho(\text{Cs}^+-\text{Rb}^+)$ ,  $\rho_- = \rho(\text{Cl}^--\text{I}^-)$  была найдена с помощью аппарата линейных средних квадратических регрессий, когда зависимость сечения данного канала реакции от параметров потенциалов при каждой фиксированной энергии  $E_{\text{col}}$  аппроксимируется линейной функцией. Центр области отвечает значениям  $\rho_+ = 0.8085$  Бор,  $\rho_- = 2.0895$  Бор.

Основные результаты работы подробно изложены в статье В. М. Азриель, В. М. Акимов, Л. Ю. Русин, М. Б. Севрюк, Химическая физика, 2010, т. 29, № 5, с. 3–19.