

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПАРНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Cs^+-Rb^+ И Cl^--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 Cs^+ , Rb^+ , CsRbCl^+ и CsRbI^+ в реакции $\text{CsCl} + \text{RbI}$ в диапазоне энергий столкновения E_{col} от 2.7 до 9 эВ. Динамика этой реакции при таких E_{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 α_1 и α_2 — поляризуемости соответствующих ионов.

Межйонные потенциалы в молекулах CsCl , RbI , CsI и RbCl достаточно надежно установлены из спектроскопических данных. Мы использовали измеренные функции возбуждения катионов в реакции $\text{CsCl} + \text{RbI}$ для уточнения параметров потенциалов взаимодействия Cs^+-Rb^+ и Cl^--I^- *одноименно* заряженных ионов. Особенно важным является определение т.н. *параметров мягкости* ρ , 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_{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.