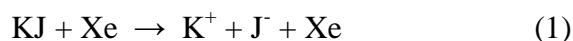


**ТРАЕКТОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ
НЕАДИАБАТИЧЕСКОЙ ДИССОЦИАЦИИ МОЛЕКУЛ КJ В
СТОЛКНОВЕНИЯХ С АТОМАМИ КСЕНОНА**

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

Институт энергетических проблем химической физики РАН, г. Москва

Методом траекторного моделирования динамика столкновительно-индуцированной диссоциации в системе КJ + Хе исследована в диапазоне энергий столкновения от 0 до 50 эВ. Расчет показывает, что распад молекул КJ может происходить как по ионному, так и по нейтральному каналам в соответствии со следующей схемой:



Ионный и ковалентный термы молекулы КJ имеют радиус пересечения 21,66 а.е., и, как следствие, оба канала демонстрируют сечения одного порядка при энергиях выше порога, составляющего для каналов (1) и (2) соответственно 4,6 эВ и 3,34 эВ в случае “холодных”, т.е. обладающих нулевой внутренней энергией молекул.

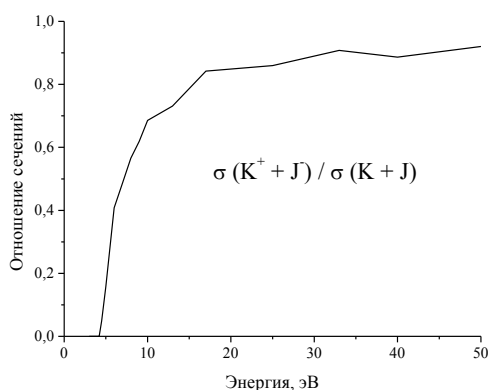


Рис. 1. Зависимость отношения сечений каналов диссоциации молекул КJ на ионные и нейтральные продукты от энергии столкновения в диапазоне энергий от 0 до 50,0 эВ

На рисунке 1 приведена расчетная зависимость отношения сечений диссоциации молекулы КJ на ионные и нейтральные продукты от энергии столкновения. Видно, что это отношение быстро увеличивается с ростом энергии столкновения от порога реакции диссоциации на ионы, достигает значения 0,7 при энергии 10 эВ и асимптотически увеличивается, приближаясь к единице, с ростом энергии столкновения до нескольких десятков электрон-вольт.