

ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕТАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ТРАЕКТОРИИ СТОЛКНОВЕНИЯ

В.М. Азриель, Д.Б. Кабанов, Л.Ю. Русин

Институт энергетических проблем химической физики РАН

Разработанные методы траекторного математического моделирования динамики элементарных процессов опираются на статистическое усреднение по нескольким кинематическим параметрам столкновения, результатов расчета множества траекторий, т.е. на статистическое описание динамики взаимодействия.

Естественным развитием статистической динамики являются исследования детальной динамики, элементарных процессов, т.е. зависимости их механизма от каждого из начальных и кинематических условий столкновения при отсутствии или минимальном усреднении по другим параметрам.

При детальном рассмотрении траектория представляет собой набор попарных расстояний между атомами, рассчитанных для каждого шага траектории, при этом количество шагов траектории может достигать нескольких десятков тысяч. Пошаговое исследование даже одной такой траектории представляет собой трудоемкую задачу. Поэтому для исследований детальной динамики элементарных процессов необходим информативный метод, позволяющий пошаговое исследование траектории и сравнение энергетических и структурных характеристик процесса на каждом шаге траектории, и при этом обладающий существенно меньшей трудоемкостью. Одним из методов отвечающим данным критериям является метод, основанный на анализе визуализированных траекторий, рассчитанных для заданных начальных кинематических параметров, что позволяет детализировать механизм столкновения и определить влияние каждого начального параметра на его исход.

Программное обеспечение, разработанное для этих целей, позволяет рассчитать траекторию с заданными кинематическими параметрами, и отобразить движение частиц относительно выбранного центра масс системы и дополнительную информацию о траектории. Этот пакет программ использован для исследований динамики трехтельной рекомбинации.