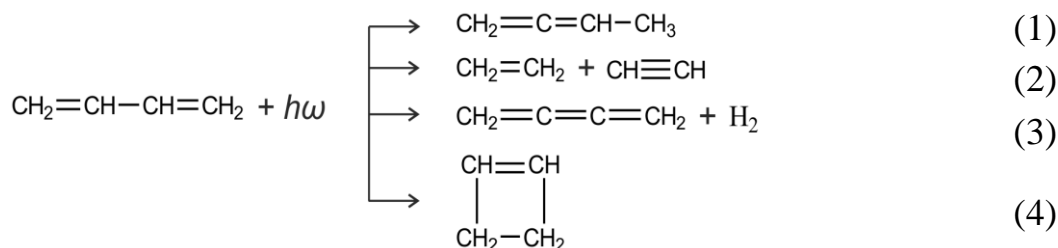


МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ КВАНТОВЫХ ВЫХОДОВ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

М. Х. Исхаков

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН

Предложенный ранее метод расчета квантовых выходов фотохимических реакций был применен для моделирования следующих превращений:



Важными и интересными особенностями этих реакций являются, во-первых, параллельное протекание процессов по нескольким каналам сразу и, во-вторых, присутствие каналов, отвечающих реакциям разложения (2, 3).

При моделировании с использованием предлагаемого подхода тип реакции не принципиален. Реакцию разложения можно представить как процесс перехода в некую форму, которая является слабо стабильной и распадается на части.

В рассматриваемом случае переходы осуществляются через разные колебательные уровни исходного вещества. Это позволяет считать все процессы идущими по независимым параллельным каналам. Однако на количественные результаты, выражаемые в квантовых выходах, будут влиять заселенности четырех колебательных уровней исходного вещества, зависящие от вероятностей излучательных переходов.

Табл. 1. Экспериментальные (φ_{exp}) и вычисленные (φ_{cal}) при $\Omega = 8.5 \times 10^9 \text{ c}^{-1}$ значения квантовых выходов и их отношений для реакций (1)-(4).

Значение	φ_{exp}	φ_{cal}
φ_4	0.03	0.028
φ_1/φ_2	2	2.4
φ_1/φ_3	5	8
φ_2/φ_3	2.5	3.3

Получено хорошее согласие с экспериментом (см. табл. 1), учитывая, что при моделировании всех четырех реакций использовалась одинаковая величина полуэмпирического параметра.