

**МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ РЕАЛИЗАЦИИ  
ЭЛЕМЕНТАРНОГО ПРОЦЕССА ПРЯМОЙ ТРЕХТЕЛЬНОЙ  
РЕКОМБИНАЦИИ ИОНОВ Cs<sup>+</sup> И Br<sup>-</sup> С УЧАСТИЕМ ТРЕТЬЕГО ТЕЛА**

**Колесникова Е.В., Русин Л.Ю.**

*Институт энергетических проблем химической физики РАН*

Одна из проблем исследования динамики элементарных процессов состоит в определении границ кинематических параметров столкновения, в которых этот элементарный процесс существует. Эта постановка задачи является новой, и ее решение возможно при наличии адекватной этому элементарному процессу поверхности потенциальной энергии (ППЭ).

Разработан метод, определять границы областей начальных условий и значений кинематических параметров, при которых элементарный процесс осуществляется, и результатом элементарного взаимодействия является образование продуктов в заданных квантовых состояниях. Метод основан на простом и эффективном симплексоподобном алгоритме поиска областей независимых параметров, представляющих аргументы целевой функции, оптимизация которой определяет область значений параметров, в которой осуществляется элементарное взаимодействие. Метод был применен к исследованию детальной динамики элементарной реакции прямой трехтельной рекомбинации ионов Cs<sup>+</sup> и Br<sup>-</sup>. С помощью метода были определены диапазоны значений кинематических параметров, внутри которых результатом взаимодействия является образование молекулы CsBr. Другое применение метода состоит в определении условий, приводящих к трехтельной рекомбинации с максимально возможной при данных начальных условиях степенью стабилизации образующейся молекулы. Определение условий, приводящих к рекомбинации, дает возможность более точно, чем в статистической динамике элементарных процессов, определить механизм или механизмы элементарного процесса, сопровождающего столкновение частиц. Метод позволяет значительно сократить число анализируемых при изучении детальной динамики траекторий, выделив наиболее приоритетные диапазоны значений параметров.