Исследование бифуркаций в трехатомных гидридах методом классических траекторий

Финенко Артем

МГУ им. М.В. Ломоносова

Введение

Для подавляющего количества задач, решаемых в области теоретической молекулярной спектроскопии, в последнее время применяются методы, основанные на квантовом рассмотрении. Однако, несмотря на значительные вычислительные мощности, доступные в наше время, существуют задачи, в которых квантовое рассмотрение не представляется возможным. Существует небольшой класс задач, при решении которых методы классической механики успешн конкурируют как с квантовыми вычислениями, так и с методами молекулярной динамики. К этому классу относят вращение молекулярных систем в условиях сильного колебательно-вращательного взаимодействия [!]. Помимо прочего, классическое рассмотрение может дать лучшее понимание квантовых явлений, происходящих в рамках рассматриваемой задачи. В данной работе изучается вращение трехатомных гидридов в условиях сильного колебательного взаимодействия.

Метод анализа колебательно-вращательной динамики

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{r}_1{}', \cdots, \vec{r}_n{}', \dot{\vec{r}}_1{}', \cdots, \dot{\vec{r}}_n{}')$$

Переход в систему отсчета, связанную с центром масс $\quad \vec{r}_i{}' = \vec{R} + \vec{r}_i$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_{n-1}, \dot{\vec{r}}_1, \cdots, \dot{\vec{r}}_{n-1})$$

Переход в подвижную систему отсчета $\quad \vec{r}_i = \$\vec{R}_i$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{R}_1, \cdots, \vec{R}_n, \dot{\vec{R}}_1, \cdots, \dot{\vec{R}}_{n-1}, \vec{\Omega})$$

Переход к обобщенным координатам $\quad \vec{R}_i = \vec{R}_i(q_1, \cdots, q_s)$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{q}_1, \cdots, \vec{q}_s, \dot{\vec{q}}_1, \cdots, \dot{\vec{q}}_s, \vec{\Omega})$$

Применение теоремы Донкина $\quad J = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Omega},\ p = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{q}_1, \cdots, \vec{q}_s, \vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_s, \vec{J})$$

$$\dot{\vec{p}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{q}} \dot{\vec{q}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} \dot{\vec{J}} + [\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{J}} \times \vec{J}] = 0$$

BlocktitleC

Blocktext