

Моделирование спектров столкновительно-индуцированного поглощения в дальней ИК области методом классических траекторий

Докладчик: Финенко Артем

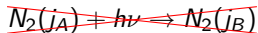
Научные руководители:

Петров С. В.
Локштанов С. Е.

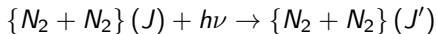
June 1, 2019

Столкновительно-индуцированное поглощение

Вращательный переход запрещен в мономере



Переход в столкновительном комплексе



Состояния молекулярных пар

- 1 Связанные состояния
- 2 Континуальные свободные состояния
- 3 Метастабильные состояния

Существующие подходы

Схема расчета

Предварительная работа

- 1 Аналитические аппроксимации *ab initio* ППЭ и ПДМ

Компоненты расчета

- 1 Распределение начальных условий
- 2 Интегрирование уравнений движения – получение столкновительных траекторий
- 3 Преобразование Фурье функции дипольного момента вдоль каждой столкновительной траектории
- 4 Расчет классической спектральной функции как среднее по ансамблю траекторий рассеяния
- 5 Десимметризация спектральной функции и расчет бинарного коэффициента поглощения