
Слайд 1. Активное изучение явления столкновительно-индуцированного поглощения в газовых смесях происходит с середины прошлого века. В одной из самых ранних работ, посвященной этой тематике, Кроуфорд с соавторами изучали поглощение азота при высоких давлениях в инфракрасной области. Они наблюдали полосу поглощения в области фундаментального перехода (2330 см^{-1}). Была обнаружена квадратичная зависимость интегральной интенсивности полосы по давлению, что свидетельствует о том, что за поглощение ответственны парные комплексы. В результате межмолекулярных взаимодействий в столкновительных комплексах происходит индукция дипольного момента. Так как комплексы обладают малыми временами жизни, спектры оказываются протяженными по частоте.

Объектами изучения в данной работе были молекулярные комплексы, образованные бездипольными мономерами. Состояния молекулярных пар классифицируют на связанные, метастабильные и свободные. Пока что наша методика не позволяет рассматривать связанные состояния. Однако их интегральный вклад при околокомнатных температурах невелик для многих систем по сравнению со вкладами свободных и метастабильных состояний.

Слайд 2. Явление столкновительно-индуцированного поглощения в инфракрасной области вносит существенный вклад в радиационный баланс плотных планетных атмосфер. Его учитывают в так называемых окнах прозрачности – спектральных диапазонах, в которых отсутствуют дипольно-разрешенные полосы поглощения атмосферных молекул. Если говорить о планетах Солнечной системы, то можно выделить три основных типа атмосфер. К первому типу относятся водородо-гелиевые атмосферы планет-гигантов. Второй тип – преимущественно азотные атмосферы Титана и Земли. К третьему типу относятся атмосферы Венеры и Марса, основу которых составляет диоксид углерода. В качестве примесных компонентов в атмосферах часто встречаются метан, благородные газы, аммиак, вода и др. Экспериментальные исследования набора молекулярных систем проводились при отдельных температурах, однако для приложений требуются данные в широком диапазоне температур и частот, чем и мотивируется теоретическое моделирование спектров столкновительно-индуцированного поглощения.

Слайд 3. Оператор возмущения, описывающий взаимодействие системы с полем, записывают в дипольном приближении.

Слайд 5. В силу того, что и спектральная и корреляционная функция – действительны, они являются симметричными функциями частоты и времени, соответственно. Существует ряд полуклассических процедур, поправляющих классическую спектральную функцию таким образом, чтобы она удовлетворяла квантовому детальному балансу. Процедура десимметризации задана неоднозначно. Расчет спектральной функции как преобразования Фурье автокорреляционной функции дипольного момента для свободных и метастабильных состояний вычислительно неэффективен. Поэтому было выполнена определенная замена переменных в интеграле, подробно описанная в тексте работы для двухатомной системы, приводящая к выражению, по которому можно производить эффективное усреднение по ансамблю траекторий рассеяния. При этом траектории рассеяния имеют начало и конец при большом фиксированном межмолекулярном расстоянии.

Слайд 7. Производим рассмотрение в приближении жестких мономеров, следовательно имеем одну радиальную координат и набор угловых, описывающих ориентации мономеров. Масштабируемость!

Слайд 8. Виральный коэффициент чувствителен к особенностям поверхности потенциальной энергии слабосвязанных систем и повсеместно используется для проверки их качества. Аппроксимации поверхностей по угловым координатам выполнены в базисе сферических гармоник, по радиальной координате – при помощи кубических сплайнов.

Слайд 9. Как известно, классические траектории обратимы по времени, однако в результате накопления вычислительных ошибок на практике это не всегда так. На слайде представлены ...