СОЗДАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С ЗАРАНЕЕ ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ

С.А. Позднеев
Физический институт им.П.Н. Лебедева РАН, Москва

С.А. Позднеев
Физический институт
им.П.Н. Лебедева РАН

На основе проведенных исследований химических реакций в квантовых системах нескольких частиц обнаружены необычные резонансные состояния, характеризующиеся тем, что чем слабее парное взаимодействие между частицами системы тем сильнее связь во всей многочастичной системе [1]. Таким образом, зная закономерности образования этих состояний и влияния на них различных факторов можно достаточно эффективно управлять различными химическими реакциями, т.е. получать продукты реакций с запланированными свойствами [2]. Дальнейшие детальные теоретические исследования реальных систем, таких как триммеры благородных газов и др., проведенные на основе квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц (КТР), математической основой которой являются уравнения Фаддеева-Якубовского [3], подтвердили эти предположения.

Экспериментальные исследования систем молекул благородных газов и других соединений показами прекрасное совпадение с теоретическими расчетами. Эти исследования предоставляют основу для разработки методов и соответствующих средств целенаправленного создания молекулярных структур с заранее запланированными свойствами, что в дальнейшем открывает возможность практической реализации этих методов в виде соответствующих технологий. Представлены результаты исследовании динамики различных резонансных процессов атомной, молекулярной и химической физики [1-3]. Данные результаты позволяют:

- разработать методы и средства для целенаправленного получения новых молекулярных структур с заранее запланированными свойствами, что позволит создать новую технологию получения новых материалов;
- определить особенности возникновения резонансных состояний и их влияние на протекание элементарных реакций атомной, молекулярной и химической физики;
- выявить роль различных факторов влияющих на резонансные процессы в химических реакциях и распадах;
- обосновать основные закономерности возникновения и распада промежуточных состояний в простейших реакциях атомной, молекулярной и химической физики;
- разработать эффективные методы управления каналами простейших химических реакций. Предлагаемая методика исследований особенностей сечений химических реакций в системах как нейтральных, так и заряженных частиц позволит теоретически обосновать многие экспериментальные данные не получившие своего объяснения в рамках других моделей. По сравнению с применяемыми до настоящего времени теоретическими методами расчета различных процессов атомной, молекулярной и химической физики предлагаемая методика имеет следующие преимущества:
- учитывает многомерность исследуемых процессов;
- в качестве исходных данных для решения КТР необходимы потенциалы взаимодействия, массы и энергии сталкивающихся частиц, в отличии от всех предлагаемых методов, где необходимы также и поверхности потенциальной энергии, построение которых является достаточно сложной задачей. Применяемые до настоящего времени технологии получения новых материалов с заранее заданными свойствами основывались, в основном, на эмпирических или в лучшем случае на полуэмпирических закономерностях и таким образом выход материалов со свойствами, отличающимися от планируемых составлял порядка 80-90 процентов. Поэтому необходим был как тщательный контроль, производимой продукции, так и длительные испытания, что значительно удлиняло производственный цикл и повышало стоимость выпускаемых изделий. Предлагаемая методика преодолевает эти трудности, т.к. в своей основе базируется на математически корректной КТР, и позволяет разработать методы и средства целенаправленного получения новых молекулярных структур с запланированными

свойствами, что позволит создать новую технологию получения новых материалов, свободную от вышеприведенных недостатков.

Литература

1. *V.Efimov* Nucl.Phys., A362, 45, 1981; A378, 581, 1982; Phys.Rev., C47, 1876, 1993; Vugalter S.A., Zislin G.M. Dokl AN USSR, 1982, v.267, p.784; Ефимов В. Влияние резонансов в парных силах на спектр уровней трех частиц, М., МИФИ, 1973: Ребане Т.К. Динамическое притяжение невзаимодействующих частиц. Мюонный атом дейтерия, ЯФ, т.61, № 1, с.61-65, 1998.
2. *L.D. Faddeev, S.P Merkuriev* Quantum scattering theory for several particles systems, Kluwer, London, 1993.
3. *Pozdneev S.* Dynamics of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gas and Plasma. Nova Science Publ., v.212, 99, 1996; Pozdneev S., Phys.Lett., B125, 355, 1983; Позднеев С.А. Применение квантовой теории рассеяния в системе трех тел для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, М.,Янус-К, 2001, 412 с.; Позднеев С.А. Применение трехчастичного приближения для исследеования эффекта Ефимова в молекулярных системах, Краткие сообщения по физике, М, № 4Б с.19-33; Позднеев С.А. Столкновения електронов с молекулами, находящимися в возбужденных колебательно вращательных состояниях, ЖЭТФ, 2000,т.117, № 1, с. 35-50; Позднеев С.А. Резонансы в рассеянии электронов молекулами, 2004,т.126, с.1051-1072.
4. *А.В.Финкельштейн, О.Б.Птицин* Физика белка: курс лекций, М.: Книжный дом "Университет", 2002, 376 с.