

ТРАЕКТОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕКОМБИНАЦИИ В СИСТЕМЕ $Cs^+ + Br^- + Xe$

Азриель В.М.¹, Русин Л.Ю.² Email: Azriel17124@scientifictext.ru

¹Азриель Владимир Михайлович - доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник;

²Русин Лев Юрьевич - доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе
Российская Академия наук,
г. Москва

Аннотация: в статье на основе математического моделирования, количественно воспроизводящего результаты экспериментов в скрещенных молекулярных пучках, подробно проанализированы три основных представленных в литературе механизма рекомбинации атомных ионов. Получены зависимости вероятности реализации отдельных стадий многоступенчатых механизмов и их взаимной конкуренции от энергии столкновения частиц. Определены эффективные энергетические диапазоны для каждой из стадий. Показано, что двух- и трехступенчатые механизмы рекомбинации реализуются лишь при очень малых значениях энергии. Обнаружено, что прямая трехтельная рекомбинация является более эффективной по сравнению с другими рассмотренными механизмами.

Ключевые слова: механизм ионной рекомбинации, энергия столкновения, вероятность протекания реакции, ионный комплекс.

TRAJECTORY SIMULATION OF RECOMBINATION MECHANISMS IN SYSTEM $Cs^+ + Br^- + Xe$

Azriel V.M.¹, Rusin L.Yu.²

¹Azriel Vladimir Mikhailovich - Doctor of physical and mathematical sciences, leading researcher;

²Rusin Lev Yur'evich - Doctor of physical and mathematical sciences, principal researcher,
Federal state budgetary institution of science Institute of energy problems of chemical physics,
Russian Academy of Sciences,
Moscow

Abstract: in article on the basis of the mathematical simulation which is quantitatively reproducing results of experiments in the crossed molecular beams three main presented in literature recombination mechanisms of atomic ions are analyzed in details. Dependences of probability of realization of separate stages in multistage mechanisms and their mutual competition from the collision energy of particles are received. Effective energy ranges for each of stages are determined. It is shown that two- and three-stage mechanisms of a recombination are implemented only at very small values of energy. It is revealed that the direct three-body recombination is more effective in comparison with other considered mechanisms.

Keywords: mechanism of an ionic recombination, collision energy, reaction probability, ionic complex.

УДК 539.196+531.662

I. Введение

Динамика многих представляющих огромный как научный, так и практический интерес процессов, таких как горение, реакции в верхней атмосфере и ионосфере, состояние низкотемпературной плазмы и т.п., определяется в первую очередь концентрацией заряженных частиц, составляющих изучаемую систему. Это делает актуальной задачу детального изучения механизмов химических превращений с их участием. Атомные и молекулярные ионы образуются и исчезают преимущественно в результате элементарных реакций столкновительно-индуцированной диссоциации (СИД) молекул и ионной рекомбинации в соответствующих средах.

Столкновительно-индуцированная диссоциация двухатомных молекул с образованием атомных и молекулярных ионов интенсивно исследовалась рядом авторов (см., например, [1-13]) в экспериментах со скрещенными молекулярными пучками. В таких экспериментах реализуются условия однократных столкновений реагентов, что дает возможность получить наиболее подробную динамическую информацию о характере их взаимодействия. Постановка подобных экспериментов по рекомбинации связана с принципиальными сложностями реализации одновременного столкновения трех пучков или последовательности двойных столкновений определенных частиц в заданной точке пространства в нужные моменты времени. Это обстоятельство определяет практически полное отсутствие экспериментальной динамической информации о процессах рекомбинации ионов.

Чрезвычайно важной задачей в этих условиях является разработка простых и надежных теоретических моделей, рассматривающих различные механизмы исследуемых процессов, их конкуренцию и условия реализации. Одним из наиболее часто используемых подходов при построении таких моделей применительно к взаимодействию тяжелых частиц при не слишком высоких энергиях является траекторное моделирование исследуемого процесса, адекватность которого реальному взаимодействию частиц определяется, в первую очередь, правильностью используемой в расчетах поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Однако, построение ППЭ, адекватной исследуемому процессу, является одной из самых сложных задач теории атомно-молекулярных взаимодействий. Несмотря на огромные достижения в развитии вычислительной техники за последние десятилетия построить точные ППЭ на основе квантово-химических расчетов до сих пор удалось лишь для нескольких наиболее простых систем, состоящих преимущественно из легких атомов. Значительно большее распространение в траекторных расчетах получили полуэмпирические и эмпирические ППЭ, содержащие ряд подбираемых параметров, оптимальные значения которых определяются из сравнения получаемых в расчетах тех характеристик рассеяния, которые могут быть измерены непосредственно в соответствующих экспериментах.

Однако, как отмечалось ранее, прямая динамическая информация по рекомбинации отсутствует вследствие значительных экспериментальных трудностей. Альтернативный подход к выбору ППЭ для моделирования процесса рекомбинации основывается на принципе микроскопической обратимости [14-27], который утверждает, что два протекающих в противоположных направлениях процесса, обратные друг другу, управляются одной и той же поверхностью потенциальной энергии. Таким образом, если у нас имеется ППЭ, адекватно описывающая индуцированную столкновением с третьей частицей диссоциацию двухатомной молекулы, ведущую к образованию пары ионов, то и обратный по отношению к СИД процесс рекомбинации этих ионов происходит на той же поверхности потенциальной энергии.

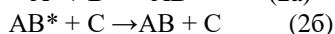
Основной особенностью процессов рекомбинации является необходимость стабилизации рекомбинирующих частиц передачей части энергии образующейся молекулы третьему телу. В химической кинетике рассматриваются три механизма рекомбинации, т.е. стабилизации рекомбинирующей пары ионов (A^+ и B^-) третьим телом (C), которые могут быть представлены следующими схемами [28-31]:

- прямая трехтельная рекомбинация, протекающая в одну стадию:



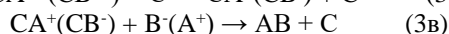
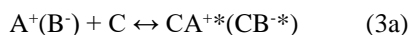
В этом механизме предполагается одновременное столкновение трех частиц, т.е. конфигурация, соответствующая сильному потенциальному взаимодействию каждой пары партнеров столкновения.

- механизм Линдемана с передачей энергии от возбужденного ассоциата третьему телу:



Механизм Линдемана, реализуется в две стадии, каждая из которых включает столкновение двух частиц. Как видно из схемы, на стадии (2a) образуется возбужденная молекула продукта, стабилизация которой в столкновении с третьей частицей происходит позже на стадии (2b).

- механизм, реализующийся через три последовательных двухтельных столкновения:



В этой схеме на стадии (3a) происходит образование промежуточного слабосвязанного комплекса одного из ионов с атомом C . На второй стадии комплекс стабилизируется столкновением со вторым атомом-акцептором энергии и далее на стадии (3в) в результате взаимодействия ионного комплекса со вторым участвующим в рекомбинации ионом образуется молекула AB как конечный продукт рекомбинации.

Как видно из этих схем, в отличие от первого механизма два других реализуются через последовательность двойных столкновений. Очевидно, что реализация того или иного механизма существенным образом зависит от природы рекомбинирующих частиц и стабилизирующего третьего тела, а также от условий столкновения. Свойства частиц проявляются через потенциалы взаимодействия

между ними, а условия столкновений определяются кинематикой, которая включает такие параметры как энергии частиц, конфигурации столкновения и т.п.

Отдать предпочтение тому или иному механизму на основе только кинетических данных практически невозможно. В книгах и статьях по кинетике преимущество отдается одному из последовательных двухтельных механизмов, а вклад прямого процесса считается пренебрежимо малым [14, 31]. Такие заключения, как правило, делаются из простого расчета соотношения числа двойных и тройных столкновений на основе грубых оценок размеров частиц.

Расчеты показывают, однако, невысокую вероятность реализации отдельных стадий последовательных механизмов рекомбинации, быстро уменьшающуюся, кроме того, с ростом энергии частиц. Подробному изучению различных механизмов ионной рекомбинации методом траекторного моделирования на примере системы $Cs^+ + Br^- + Xe$ и посвящена настоящая статья. Статья построена следующим образом. После настоящего введения кратко рассматриваются используемая в работе поверхность потенциальной энергии и технология расчетов. Далее следуют раздел, содержащий полученные из траекторного моделирования результаты и их обсуждение.

II. Поверхность потенциальной энергии и технология расчетов

Вследствие отсутствия прямых экспериментальных данных о динамике процесса рекомбинации в рассматриваемой системе и, как следствие, невозможности восстановить по этим данным ППЭ, управляющую взаимодействием частиц в системе, в настоящих расчетах использовалась ППЭ, полученная из траекторной модели диссоциации молекул $CsBr$, индуцированной столкновениями с атомами ксенона. Рекомбинация является процессом, обратным по отношению к СИД, включает тот же набор взаимодействующих частиц и, следовательно, в силу принципа микроскопической обратимости, должна адекватно описываться той же поверхностью потенциальной энергии.

Динамика СИД в системе $CsBr + Xe$ подробно исследована в экспериментах со скрещенными молекулярными пучками [32, 33]. В этих экспериментах были измерены полные и двойные дифференциальные сечения рассеяния, а также зависимости сечения от внутренней энергии молекулы для различных каналов взаимодействия. Траекторная модель СИД количественно воспроизводит эти экспериментальные данные [33, 34], что свидетельствует об адекватности выбранной поверхности потенциальной энергии реальному взаимодействию частиц в системе.

Аналитический вид ППЭ для системы $Cs^+ + Br^- + Xe$ соответствует аддитивной функции трех парных потенциалов взаимодействия ионов Cs^+ и Br^- между собой и каждого иона с атомом ксенона:

$$U(R_1, R_2, R_3) = U_{Cs^+ - Xe}(R_1) + U_{Cs^+ - Br^-}(R_2) + U_{Br^- - Xe}(R_3)$$

Для описания межйонного взаимодействия в молекулах галогенидов щелочных металлов наиболее часто используется так называемый усеченный потенциал Ритгнера [35, 36], имеющий вид:

$$U_{Cs^+ - Br^-}(R_2) = A_2 \cdot \exp(-R_2/\rho_2) - 1/R_2 - (\alpha_{Cs^+} + \alpha_{Br^-})/2R_2^4 - C_2/R_2^6$$

Парные взаимодействия каждого из ионов с атомом ксенона описываются одинаковыми выражениями:

$$U_{Cs^+ - Xe}(R_1) = A_1 \cdot \exp(-R_1/\rho_1) - \alpha_{Xe}/2R_1^4 - C_1/R_1^6$$

$$U_{Br^- - Xe}(R_3) = A_3 \cdot \exp(-R_3/\rho_3) - \alpha_{Xe}/2R_3^4 - C_3/R_3^6$$

В этих выражениях A_i и ρ_i – параметры отталкивательных Борн-Майеровских стенок, α_{Cs^+} , α_{Br^-} и α_{Xe} – поляризуемости ионов Cs^+ , Br^- и атома Xe соответственно, C_i – постоянные ван-дер-Ваальсовского взаимодействия. Значения параметров используемого потенциала приведены в таблице 1, а на рисунке 1 показаны парные потенциалы взаимодействия.

Таблица 1. Параметры потенциалов парных взаимодействий в системе $Cs^+ + Br^- + Xe$

Пара	A_i	ρ_i	C_i	Ссылка
$Cs^+ - Br^-$	127.5	0.7073		[37]
			87.36	[38, 39]
$Cs^+ - Xe$	318.5	0.6494		[40]
			490.0	*
$Br^- - Xe$	62.84	0.877		[40]
			297.3	*

* Расчет по формуле Кирквуда.

Поляризуемости частиц [41]: $\alpha_{Cs^+}=16.48$, $\alpha_{Br^-}=32.46$, $\alpha_{Xe}=27.2$.

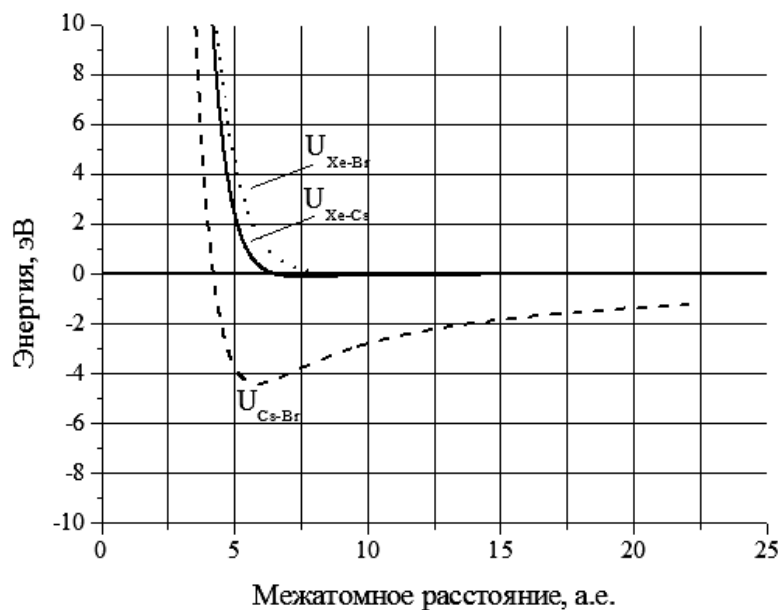


Рис. 1. Парные потенциалы взаимодействия в системе $Cs^+ + Br + Xe$

Движение участвующих во взаимодействии частиц описывалось системой дифференциальных уравнений первого порядка в форме Гамильтона. Начальное расстояние между центрами масс сталкивающихся частиц устанавливалось равным 250 а.е. с тем, чтобы можно было пренебречь влиянием потенциала на их относительное движение в начале траектории. С точки зрения вычислительной процедуры это условие означает постоянство импульсов относительного движения частиц на первых шагах интегрирования. Интегрирование уравнений движения выполнялось методом Адамса шестого порядка, начальные значения для которого рассчитывались с помощью процедуры Рунге-Кутты, с шагом интегрирования 50 а.е., что обеспечивало сохранение полной энергии системы на протяжении всей траектории не хуже $10^{-50}\%$ от ее начального значения. Траектории интегрировались до тех пор, пока в соответствии со значениями попарных межатомных расстояний и энергий не реализовывался один из возможных каналов взаимодействия. Образование данной группы атомов как устойчивого конечного продукта фиксировалось при условии, что все попарные расстояния внутри данной группы не превышают 30 а.е. и полная энергия отрицательна, в то время как расстояния от данной группы до других атомов составляют более 250 а.е. и соответствующие энергии положительны.

III. Результаты и обсуждение

В работах [42-46] подробно рассмотрен прямой трехтельный механизм рекомбинации ионов Cs^+ и Br^- в присутствии атома Xe в качестве стабилизирующей частицы, предполагающий одновременное столкновение трех частиц, и показаны основные динамические и кинематические особенности реализации этого механизма. Обнаружено, что вероятность рекомбинации уменьшается с ростом энергии частиц (см. рисунок 2).

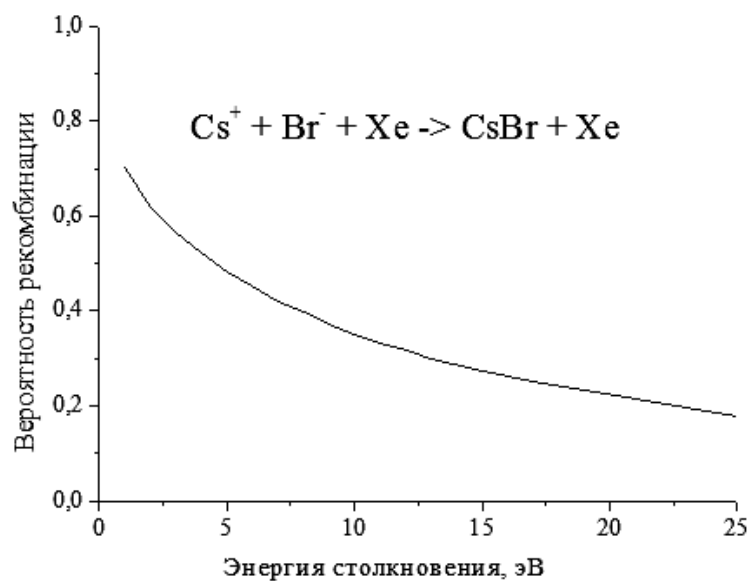


Рис. 2. Зависимость вероятности прямой трехтельной рекомбинации ионов от энергии частиц

Механизм Линдемана, как отмечалось ранее, реализуется в две последовательные стадии, т.е. предполагается задержка по времени второго стабилизирующего столкновения по отношению к моменту сближения пары ионов. Траекторная модель показывает, что вероятность рекомбинации в этом случае ниже вероятности рекомбинации при одновременном столкновении трех частиц для любой величины этой задержки. Соответствующая зависимость приведена на рисунке 3, из которого видно, что вероятность рекомбинации быстро падает с ростом величины запаздывания, уменьшаясь в 2,5 раза для задержки 0,1 (задержка атома определяется как доля от времени сближения ионной пары) и в 5 раз для задержки 0,2 по сравнению с вероятностью рекомбинации для прямого трехтельного механизма.

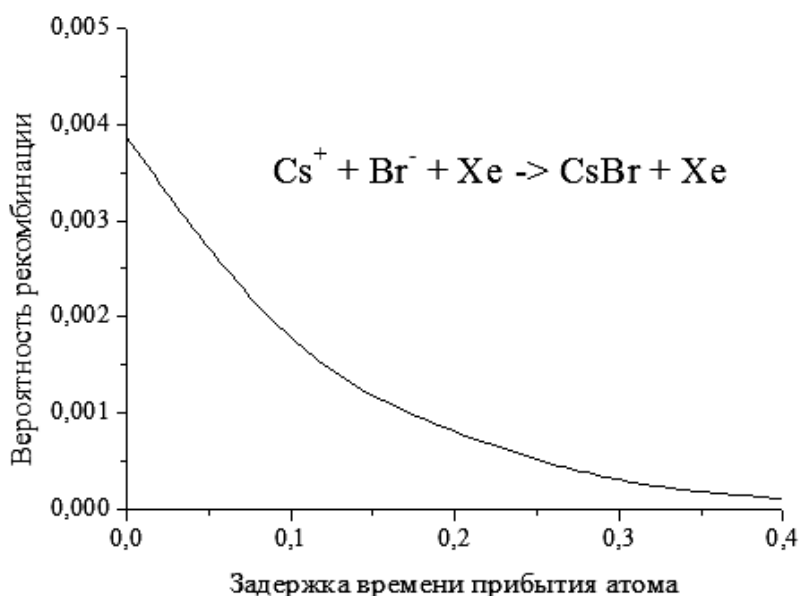


Рис. 3. Зависимость вероятности рекомбинации ионов Cs^+ и Br^- от величины запаздывания времени прибытия третьего атома в точку встречи ионной пары. Задержка времени прибытия указана в долях от величины, соответствующей одновременному столкновению трех частиц

Третий механизм рекомбинации включает три последовательные стадии, каждую из которых необходимо рассмотреть более подробно.

На первой стадии предполагается образование слабосвязанного промежуточного комплекса одного из ионов с атомом-акцептором энергии, т.е. молекулярных ионов $XeCs^+$ и $XeBr^-$. Расчет показывает, что оба комплекса образуются лишь при относительных энергиях частиц ниже 1,0 эВ, что связано со слабой энергией связи в комплексах, составляющей для $XeCs^+$ и $XeBr^-$ соответственно 0,109 эВ и 0,0267 эВ. На рисунке 4 показана зависимость вероятности образования комплексов в процессе, объединяющем стадии

(3а) и (3б), т.е. стабилизация комплексов происходит одновременно с их формированием. Вероятность образования обоих комплексов максимальна при близких к нулю значениях относительной энергии частиц и быстро падает с ростом энергии, уменьшаясь, например, для комплекса XeCs^+ в 10 раз при изменении энергии частиц от 0,1 эВ до 0,3 эВ. При этом для всех значений энергии вероятность образования ионного комплекса XeCs^+ превышает аналогичную величину для комплекса XeBr^- (см. рисунок 4). Даже при энергиях частиц 0,3 эВ вероятность образования этих комплексов ниже вероятности образования молекулы CsBr по первому механизму прямой рекомбинации соответственно в 70 и 250 раз.

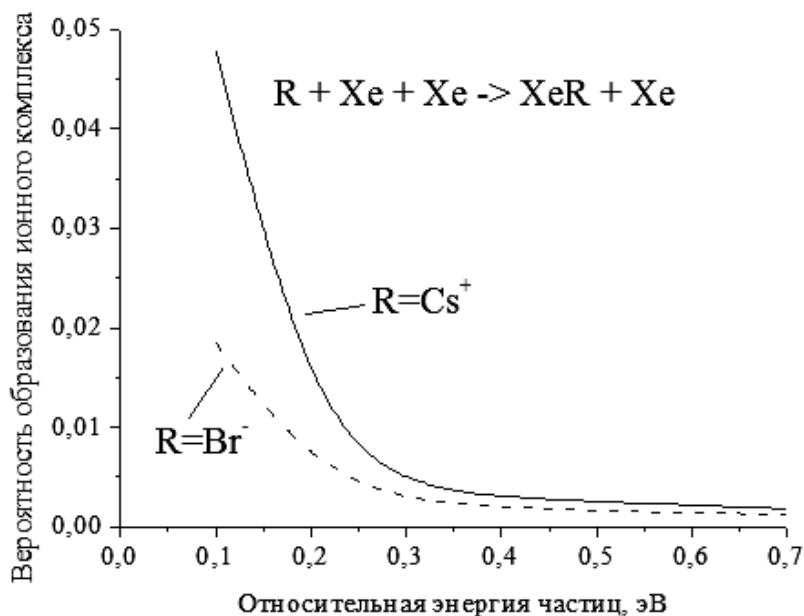


Рис. 4. Зависимость вероятности образования ионного комплекса от относительной энергии частиц

Процесс 3(б) трехстадийного механизма соответствует стабилизации промежуточного комплекса в столкновении со вторым атомом-акцептором энергии, т.е. в системе предполагается избыточное количество нейтральных атомов С по сравнению с концентрацией ионов A^+ и B^- . В этом случае, однако, даже стабилизированный уже ионный комплекс CA^+ или CB^- в результате дополнительного столкновения с обладающим достаточной энергией атомом С может диссоциировать на составляющие его компоненты.

На рисунке 5 показаны рассчитанные функции возбуждения таких процессов индуцированной столкновениями с атомами ксенона диссоциации находящихся в основном энергетическом состоянии ионных комплексов XeCs^+ и XeBr^- в диапазоне энергий столкновения от 0 до 25,0 эВ (а) и более подробно вблизи порога (б). Из рисунка видно, что функции возбуждения начинаются при энергиях столкновения, соответствующих энергиям связи в комплексах (0,0267 эВ для XeBr^- и 0,109 эВ для XeCs^+), далее сечения быстро увеличиваются, достигая максимумов при энергиях 1,0 эВ и 4,0 эВ соответственно, и далее уменьшаются очень медленно с ростом энергии столкновения в широком диапазоне энергий. Таким образом, вероятность распада промежуточного ионного комплекса в столкновениях с нейтральными атомами представляется весьма высокой. При всех значениях энергии сечение диссоциации более слабо связанного комплекса XeBr^- заметно выше.

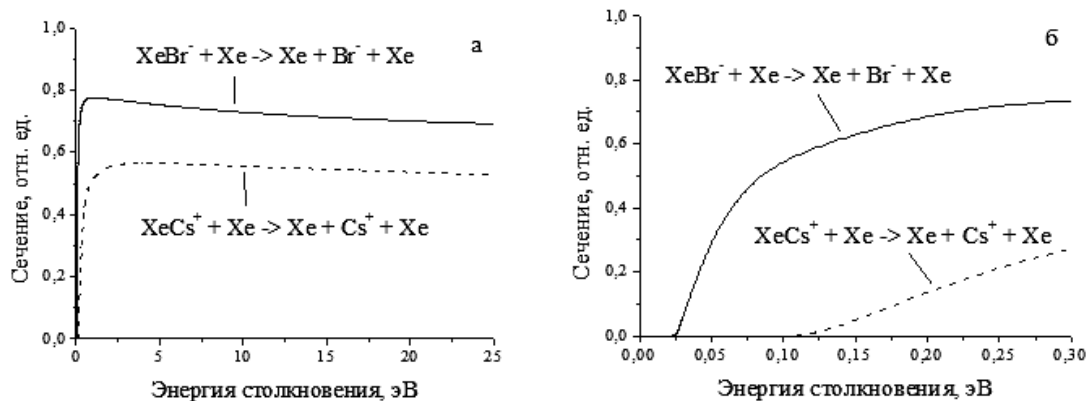


Рис. 5. Функции возбуждения индуцированной столкновениями с атомами Хе диссоциации ионных комплексов XeCs^+ и XeBr^- , в диапазоне энергий столкновения от 0 до 25,0 эВ (а) и более подробно вблизи порога (б)

На третьей стадии (Зв) ионные комплексы XeCs^+ и XeBr^- взаимодействуют соответственно с ионами Br^- и Cs^+ с образованием молекулы CsBr как конечного продукта рекомбинации. Однако и на этой стадии кроме процесса (Зв) возможен распад слабосвязанного комплекса в столкновении со вторым ионом без образования устойчивой молекулы, причем траекторная модель предсказывает весьма высокую вероятность и этой реакции. Рассмотрим конкуренцию этих двух процессов на примере комплекса XeCs^+ . Рассчитанная функция возбуждения процесса диссоциации комплекса без образования молекулы CsBr показана на рисунке 6(а) в диапазоне энергий столкновения от 0 до 25,0 эВ и на рисунке 6(б) более подробно вблизи порога. Канал открывается при энергии столкновения 0,21 эВ, дальше сечение растет, достигая максимума при энергии около 3,0 эВ, и плавно уменьшается с дальнейшим ростом энергии столкновения.

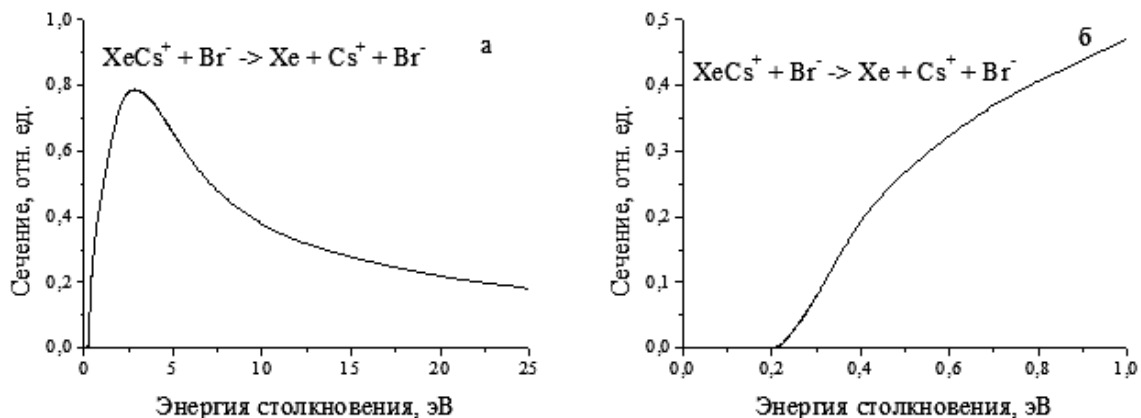


Рис. 6. Функция возбуждения канала СИД при энергиях столкновения до 25,0 эВ (а) и вблизи порога (б) при взаимодействии в системе $\text{XeCs}^+ + \text{Br}^-$

Из сравнения рисунков 5(б) и 6(б) интересно отметить, что значения порога СИД при столкновении комплекса с нейтральным атомом ксенона и ионом Br^- заметно отличаются. Для системы $\text{XeCs}^+ + \text{Xe}$ канал открывается при энергии столкновения, соответствующей энергии связи ионного комплекса, в то время как для системы $\text{XeCs}^+ + \text{Br}^-$ величина порога равна 0,21 эВ, что в 2 раза превышает энергию связи ионного комплекса (рисунок 1). Различие в величинах пороговых энергий связано, очевидно, с характером взаимодействия иона Cs^+ с третьей частицей. Для системы $\text{XeCs}^+ + \text{Br}^-$ при энергиях ниже 0,2 эВ более 99% траекторий ведет к экзотермической реакции образования молекулы CsBr . Функция возбуждения этой реакции показана на рисунке 7.

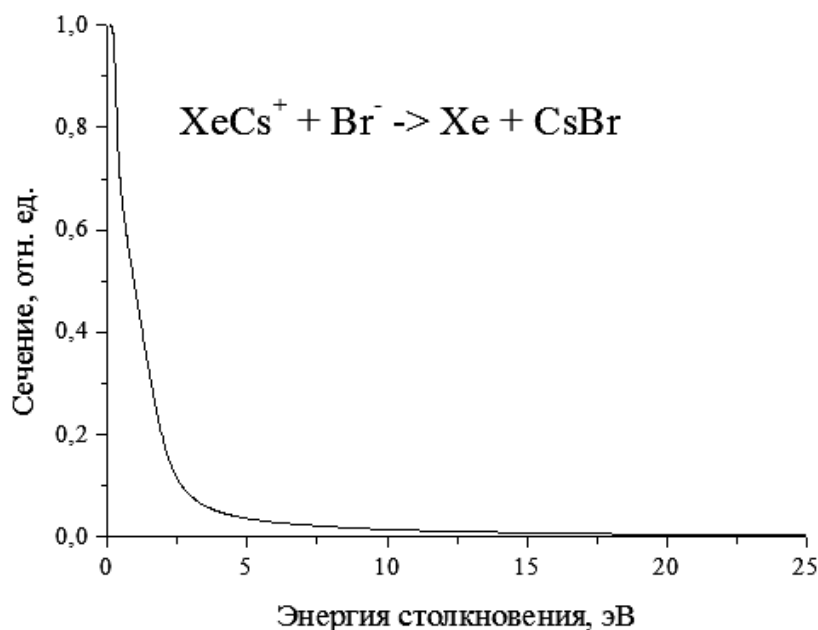


Рис. 7. Функция возбуждения канала процесса (Зв) при энергиях столкновения до 25,0 эВ

Видно, что сечение максимально при близких к нулю значениях энергии столкновения и быстро уменьшается с ростом энергии. Сечение процесса образования молекулы CsBr и сечение распада комплекса XeCs⁺ в столкновениях с ионами брома имеют близкие величины при энергии столкновения около 1,0 эВ, а при более высоких значениях энергии вероятность распада промежуточного ионного комплекса значительно выше.

Таким образом, приведенные расчеты показывают, что трехстадийный механизм рекомбинации может быть эффективным лишь при энергиях заметно ниже 1,0 эВ. При энергиях же в несколько эВ наиболее продуктивным является механизм прямой трехтельной рекомбинации, когда рекомбинирующие ионы сразу образуют конечную молекулу, стабилизация которой происходит непосредственно в процессе сближения ионной пары.

Траекторное моделирование динамики ионной рекомбинации в системе Cs⁺ + Br⁻ + Xe показывает, однако, что вероятность прямой трехтельной рекомбинации при одинаковых условиях столкновения частиц значительно превышает аналогичную величину для двух других рассмотренных механизмов.

Список литературы / References

1. Parks E.K., Pobo L.G., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1984. V. 80. P. 5003-5022.
2. Parks E.K., Hansen N.J., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1973. V. 58. P. 5489-5501.
3. Sheen S.H., Diplomon G., Parks E.K., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1978. V. 68. P. 4950-4968.
4. Lenin L.V., Rusin L.Yu. // Chem. Phys. Lett., 1990. V. 170. P. 502-508.
5. Akimov V.M., Lenin L.V., Rusin L.Yu. // Chem. Phys. Lett., 1991. V. 180. P. 541-544.
6. Parks E.K., Wagner A., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1973. V. 58. P. 5502-5513.
7. Parks E.K., Kuhry J., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1977. V. 67. P. 3014-3028.
8. Parks E.K., Inoue M., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1982. V. 76. P. 1357-1379.
9. Tully F.P., Lee Y.T., Berry R.S. // Chem. Phys. Lett., 1971. V. 9. P. 80-84.
10. Parks E.K., Sheen S.H., Wexler S. // J. Chem. Phys., 1978. V. 69. P. 1190-1195.
11. Piper L.B., Hellemans L., Sloan J., Ross J. // J. Chem. Phys., 1972. V. 57. P. 4742-4751.
12. Wexler S., Parks E.K. // Ann. ReV. Phys. Chem., 1979. V. 30. P. 179-186.
13. Tully F.P., Cheung N.H., Haberland H., Lee Y.T. // J. Chem. Phys., 1980. V. 73. P. 4460-4475.
14. Смит Ф. Тройные столкновения и скорости тримолекулярных реакций. В сб. «Кинетические процессы в газах и плазме». М.: Атомиздат, 1972. С. 277-326.
15. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966. 340 с.
16. Лайт Дж., Росс Дж., Шулер К. Сечения реакций, константы скорости и микроскопическая обратимость. В сб. «Кинетические процессы в газах и плазме». М.: Атомиздат, 1972. С. 241-276.
17. Фейнман, Лейтон, Сэндс. Фейнмановские лекции по физике. Том 4. Кинетика. Теплота. Звук. М.: Мир, 1967. 261 с.
18. Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: Изд. МГУ, 1989. 240 с.
19. Gallavotti G., Cohen E.G.D. // Phys. Rev. Lett., 1995. V. 74. P. 2694-2697.
20. Gallavotti G., Cohen E.G.D. // J. Stat. Phys., 1995. V. 80. P. 931-970.
21. Kurchan J. // J. Phys. A., 1998. V. 31. P. 3719-3729.
22. Gibbs J.W. Elementary principles in statistical mechanics, developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics. Yale Univ. Press, 1902. 207 p.
23. Manousiouthakis V.I., Deem M.W. // J. Chem. Phys., 1999. V. 110. P. 2753-2756.
24. Dirac P.A.M. // Proc. R. Soc. A., 1924. V. 106. P. 581-596.
25. Eyink G.L. // Prog. Theor. Phys. Suppl., 1998. V. 130. P. 77-94.
26. Hoover W.G. Time reversibility, computer simulation, and chaos. Advanced Series in Nonlinear Dynamics, 1999. V. 13. 280 p.
27. Alberty R.A. // J. Chem. Edu., 2004. V. 81. № 8. P. 1206-1211.
28. Pack R.T., Walker R.B., Kendrick B.K. // J. Chem. Phys., 1998. V. 109. P. 6701-6713.
29. Бенсон С. Основы химической кинетики. Пер. с англ., М.: Мир, 1964. 602 с.
30. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия. Пер. с англ., М., Изд-во Иностранной литературы, 1962. 628 с.
31. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. 558 с.
32. Азриель В.М., Акимов В.М., Русин Л.Ю. // Хим. Физика, 1990. Т. 9. № 9. С. 1224-1230.
33. Азриель В.М., Акимов В.М., Грико Я., Русин Л.Ю. // Хим. Физика, 1990. Т. 9. № 10. С. 1306-1310.
34. Азриель В.М., Акимов В.М., Грико Я., Русин Л.Ю. // Хим. Физика, 1990. Т. 9. № 11. С. 1463-1470.
35. Rittner E.S. // J. Chem. Phys., 1951. V. 19. № 8. P. 1030-1035.
36. Brumer P., Karplus M. // J. Chem. Phys., 1973. V. 58. P. 3903-3918.
37. Kumar M., Kaur A.J., Shanker J. // J. Chem. Phys., 1986. V. 84. P. 5735-5740.

38. *Patil S.H.* // J. Chem. Phys., 1987. V. 86. P. 313-320.
39. *Patil S.H.* // J. Chem. Phys., 1988. V. 89. P. 6357-6364.
40. *Gilbert T.L., Simpson O.C., Williamson M.A.* // J. Chem. Phys., 1975. V. 63. P. 4061-4071.
41. *Brumer P.* // Phys. Rev. A., 1974. V. 10. P. 1-8.
42. *Азриель В.М., Русин Л.Ю.* // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2006. Т. 4. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2006-10-23-002.pdf/> (дата обращения: 26.02.2018).
43. *Азриель В.М., Кабанов Д.Б., Колесникова Л.И., Русин Л.Ю.* // Известия Российской Академии наук, серия Энергетика, 2007. № 5. С. 50-69.
44. *Азриель В.М., Русин Л.Ю.* // Хим. Физика, 2008. Т. 27. № 7. С. 5-17.
45. *Azriel V.M., Rusin L.Yu., Sevryuk M.V.* // Chem. Phys., 2013. V. 411. P. 26-34.
46. *Азриель В.М., Колесникова Л.И., Русин Л.Ю.* // Хим. Физика, 2016. Т. 35. № 8. С. 3-10.