

Аннотация

Результаты недавних работ свидетельствуют о наличии в низших электронных состояниях катион-радикалов *цис*- и *транс*-1,2-дихлорэтилена вибронного взаимодействия, оказывающего заметное влияние на ядерную динамику в этих состояниях. Признаки нарушения адиабатического приближения, обусловленные вибронным взаимодействием, хорошо видны в фотоэлектронных спектрах этих молекул, представляя собой, прежде всего, появление нерегулярной колебательной структуры у соответствующих полос. Можно ожидать, что аналогичные вибронные взаимодействия имеют место в катион-радикале 1,1-дихлорэтилена, хотя и в несколько менее выраженной степени, что следует из более простой в данном случае структуры фотоэлектронного спектра. Поскольку ранее было проведено лишь предварительное моделирование вибронного взаимодействия в катион-радикалах 1,2-дихлорэтилена, в результате которого оставался нерешённым ряд вопросов, касающихся, в частности, параметров использовавшихся гамильтонианов, а вибронное взаимодействие в катион-радикале 1,1-дихлорэтилена не изучалось вообще, в рамках проекта будет предпринята попытка систематического рассмотрения всех трех молекул в рамках единого более строгого подхода к вибронному моделированию и описанию ядерной динамики.