

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**С. В. Феськов**

**ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС  
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ:  
ОСНОВЫ ТЕОРИИ И МЕТОДЫ  
ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

*Учебно-методическое пособие*

Волгоград 2010

Рекомендовано к опубликованию Учебно-методической комиссией  
факультета физики и телекоммуникаций  
Волгоградского государственного университета  
(протокол 1 от 25.02 2010 г.)

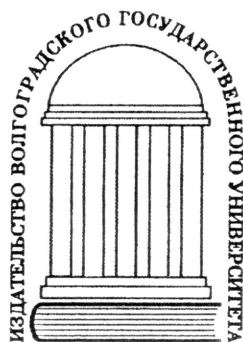
Рецензент  
канд. физ.-мат. наук, доц. каф. информационных систем  
и компьютерного моделирования  
Волгоградского государственного университета

**Феськов, С. В.**

Электронный перенос в конденсированных средах: основы теории и методы численного моделирования [Текст] : учеб.-метод. пособие / С. В. Феськов ; Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования «Волгогр. гос. ун-т». – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – 52 с., ил.

В настоящем пособии рассматривается обобщенная стохастическая модель электронного переноса в конденсированной среде, используемая для описания широкого круга диффузионно-опосредованных химических реакций. Предложены алгоритмы компьютерного моделирования динамики переноса электрона в рамках метода случайных траекторий. Сформулированные алгоритмы представляются наиболее перспективными в применении к многомодовым моделям, включающим целый набор координат реакции, и к системам с большим числом электронных и колебательных состояний. Особенности численного метода позволяют эффективно использовать его в среде параллельных вычислений.

Для студентов, обучающихся по специальности «Физика».



© С. В. Феськов, 2010

# Содержание

Основные понятия теории электронного переноса .....	4
Классификация реакций .....	4
Физические принципы реакции .....	5
Энергетика реакции .....	9
1. Модель Маркуса .....	11
1.1. Электронные термы донорного и акцепторного состояний .....	11
1.2. Константа скорости электронного переноса .....	12
1.3. Маркусовы режимы реакции .....	14
1.4. Электронная связь термов. Электронные переходы .....	15
2. Стохастическая динамика координаты реакции .....	17
2.1. Броуновская частица. Уравнение Ланжевена .....	17
2.2. Свободная частица в термостате. Уравнение Фоккера-Планка .....	19
2.3. Броуновская частица во внешнем поле. Уравнение Крамерса .....	22
2.4. Предел сильной связи со средой. Уравнение Смолуховского .....	24
3. Модель Зусмана .....	27
3.1. Основные положения .....	27
3.2. Уравнения Зусмана .....	28
3.3. Обобщенная стохастическая модель .....	30
4. Метод броуновского моделирования .....	33
4.1. Броуновские траектории движения .....	33
4.2. Начальные условия .....	36
4.3. Электронные переходы. Необратимая реакция .....	37
4.4. Обратимые электронные переходы .....	40
4.5. Реакции с участием нескольких электронно-колебательных состояний .....	44
4.6. Варианты тестирования расчетных алгоритмов .....	45
Заключение .....	49
Литература .....	50