

Комментарии к статье

М.В.Базилевского, М.В.Венера

«Теоретические исследования реакций переноса протона и атома водорода
в конденсированной фазе»

Успехи химии, 72, 3 – 39 (2003)

На с. 20 в конце раздела III.1.б авторы добавляют следующий текст:

Исключение составляют реакции переноса атома водорода (ПАВ) в системе $H_2 + H$ и ее изотопных аналогах. Здесь на канонической кривой пути реакции нет участков высокой кривизны, а именно такое условие необходимо, чтобы использовать эту кривую в качестве репера для построения криволинейной системы координат. К таким системам применима вариационная теория переходного состояния (ПС) в стандартной формулировке; их расчеты оказались успешными даже при низкой температуре.^{1–4} Чтобы распространить вариационную теорию на ПАВ между тяжелыми фрагментами (системы, рассмотренные в разделе II.3.б, которые имеют участок с высокой кривизной на пути реакции в области ПС) необходима ее значительная модификация, включающая специальное определение траектории туннелирования.^{5–8}

Авторы благодарны профессору Д.Трулару, сообщившему им о своих работах.

1. J.G.Lauderdale, D.G.Truhlar. *Surf. Sci.*, **164**, 558 (1985)
2. G.C.Hancock, C.A.Mead, D.G.Truhlar, A.J.C.Varandas. *J. Chem. Phys.*, **91**, 3492 (1989)
3. S.E.Wonchoba, D.G.Truhlar. *J. Chem. Phys.*, **99**, 9637 (1993)
4. S.E.Wonchoba, W.-P.Hu, D.G.Truhlar. *Phys. Rev. B*, **51**, 9985 (1995)
5. B.C.Garrett, N.Abusalbi, D.J.Kouri, D.G.Truhlar. *J. Chem. Phys.*, **83**, 2252 (1985)
6. B.C.Garrett, T.Joseph, T.N.Ruong, D.G.Truhlar. *Chem. Phys.*, **136**, 271 (1989) (Errata: **140**, 207 (1990))
7. D.G.Truhlar, M.S.Gordon. *Science*, **249**, 491 (1990)
8. A.Fernandez-Ramos, D.G.Truhlar. *J. Chem. Phys.*, **114**, 1491 (2001)