

**Научный отчет о визите проф. Мари Гиту (Prof. Marie Guitou)  
на кафедру теоретической физики и астрономии  
Российского государственного педагогического университета им. А.И.Герцена  
в рамках программы фонда «Династия» «Краткосрочные визиты иностранных  
ученых в российские научные центры» с 12 по 19 сентября 2013 г.**

Проф. Мари Гиту (Университет Восточного Парижа, Франция) посетила кафедру теоретической физики и астрономии Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена (Герценовский университет) с 12 по 19 сентября 2013 г. в рамках программы фонда «Династия» «Краткосрочные визиты иностранных ученых в российские научные центры». В ходе визита были проведены следующие мероприятия:

16 сентября 2013 г. проф. Гиту выступила с научным докладом на тему "Non-reactive interaction of molecules with a surface: periodic or cluster approach?". На докладе присутствовали преподаватели, сотрудники и аспиранты кафедры теоретической физики и астрономии, студенты факультета физики, сотрудники Научно-образовательного центра «Передовые теоретические исследования» и Научно-исследовательского института физики Герценовского университета.

На протяжении всего визита проводились совместная научная работа и рабочие встречи с научной группой проф. А.К. Беляева. Во время рабочих встреч:

(1) проведено обсуждение результатов квантово-химических расчетов столкновительных систем  $Mg+N$  и  $Ca+N$ , полученных проф. М. Гиту; проведен тщательный анализ рассчитанных адиабатических потенциальных энергий и неадиабатических взаимодействий; определены данные для использования в динамических задачах;

(2) проведено сшивание полученных квантово-химических данных с динамической задачей столкновений; для квазимолекулы  $MgN$  выбраны данные, которые используются в расчетах неадиабатической ядерной динамики в качестве входных данных; проведены пробные расчеты вероятностей неадиабатических переходов и неупругих сечений; проведено сравнение с результатами предыдущих расчетов, опубликованных в статьях: M. Guitou, A. K. Belyaev et al, J. Phys. B 44, 035202 (2011); A. K. Belyaev, M. Guitou et al, Phys. Rev. A 85, 032704 (2012).

(3) проведено обсуждение последующих этапов совместных исследований; выбран круг объектов для квантово-химических расчетов проф. М. Гиту; определены приоритеты для проведения динамических расчетов группой проф. А.К. Беляева; обсужден план совместной статьи для написания; выбран объем материала для включения в планируемую статью;

(5) проф. М. Гиту ознакомилась с работами, проводимыми на кафедре теоретической физики и астрономии, в Научно-образовательном центре «Передовые теоретические исследования» и в отделе теоретической физики Научно-исследовательского института физики Герценовского университета, в частности, проф. М. Гиту интенсивно общалась с аспирантами и студентами кафедры.

Скоординирован план совместных действий по реализации совместного научного проекта.

Приглашенный ученый

проф. М. Гиту (M. Guitou)

