

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ МЕДЛЕННЫХ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ КАЛЬЦИЯ И ВОДОРОДА

Власов Д. В.^{1,2,†}, Беляев А. К.^{1,‡}

¹РГПУ им. А. И. Герцена

²ООО «Т-Системс РУС»

[†]*dmitry.v.vlasov@gmail.com*, [‡]*akbelyaev@herzen.spb.ru*



Настоящее исследование посвящено расчету сечений возбуждения и образования ионной пары $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$ для столкновительной системы $\text{Ca} + \text{H}$ в рамках **последовательного квантового подхода**, а также вычислению *сечений девозбуждений и взаимной нейтрализации*. Расчеты сечений для квазимолекулы CaH приводились ранее в работах [1, 2] на основе модели Ландау-Зинера [3]. В данной работе произведено решение ядерной части полной задачи столкновения в соответствии с подходом Борна-Оппенгеймера в гибридном диабатическом представлении [4]. *Переход к гибридному диабатическому представлению обусловлен* необходимостью устранения вычислительных сложностей при численном решении системы связанных уравнений для некоторых областей неадиабатичности, в которых матричные элементы $\langle j | \frac{\partial}{\partial R} | k \rangle$ имеют вид высоких и узких пиков. Соответствующая предварительная **подготовка входных квантово-химических данных в гибридном диабатическом представлении осуществлена** на основе набора данных в адиабатическом представлении из работы [5]. Точность таких вычислений имеет значение для астрофизических приложений. Это обусловлено отклонениями от приближения локального термодинамического равновесия (не ЛТР эффекты) [6], что может приводить к неточным результатам, особенно при использовании формулы Дравина. Также это важно при необходимости получить сечения образования ионных пар и взаимной нейтрализации, которые играют доминирующую роль по сравнению с сечениями возбуждения для ковалентного взаимодействия.

Результатом исследования являются зависимости сечений процессов от энергии столкновения для первых одиннадцати состояний $^2\Sigma^+$, включая ионный терм $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$, а также последующий расчет соответствующих констант скоростей. Работа поддержана Российским научным фондом (РНФ), **грант №17-13-01144**.

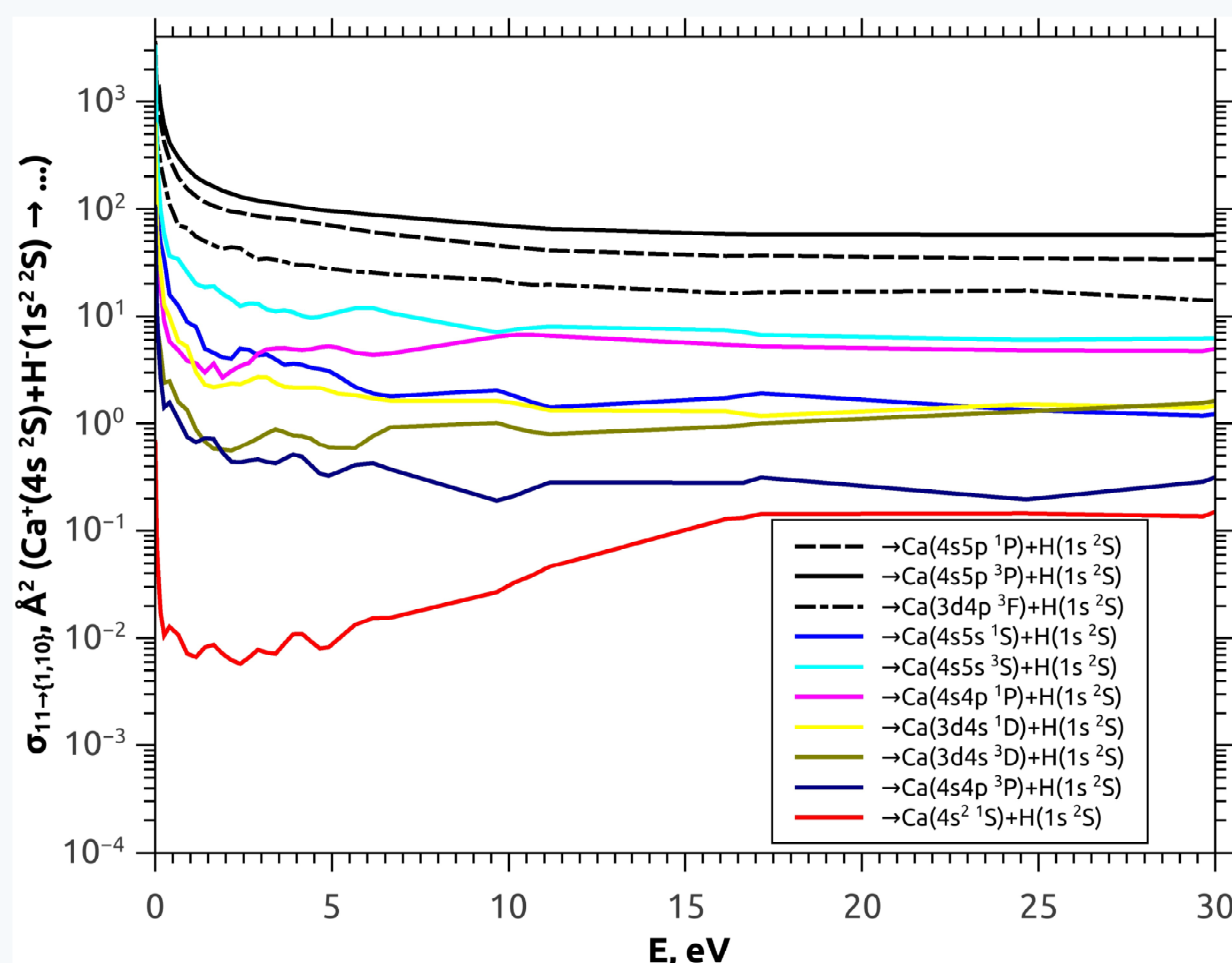


Рис. 1: Сечения взаимной нейтрализации $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$

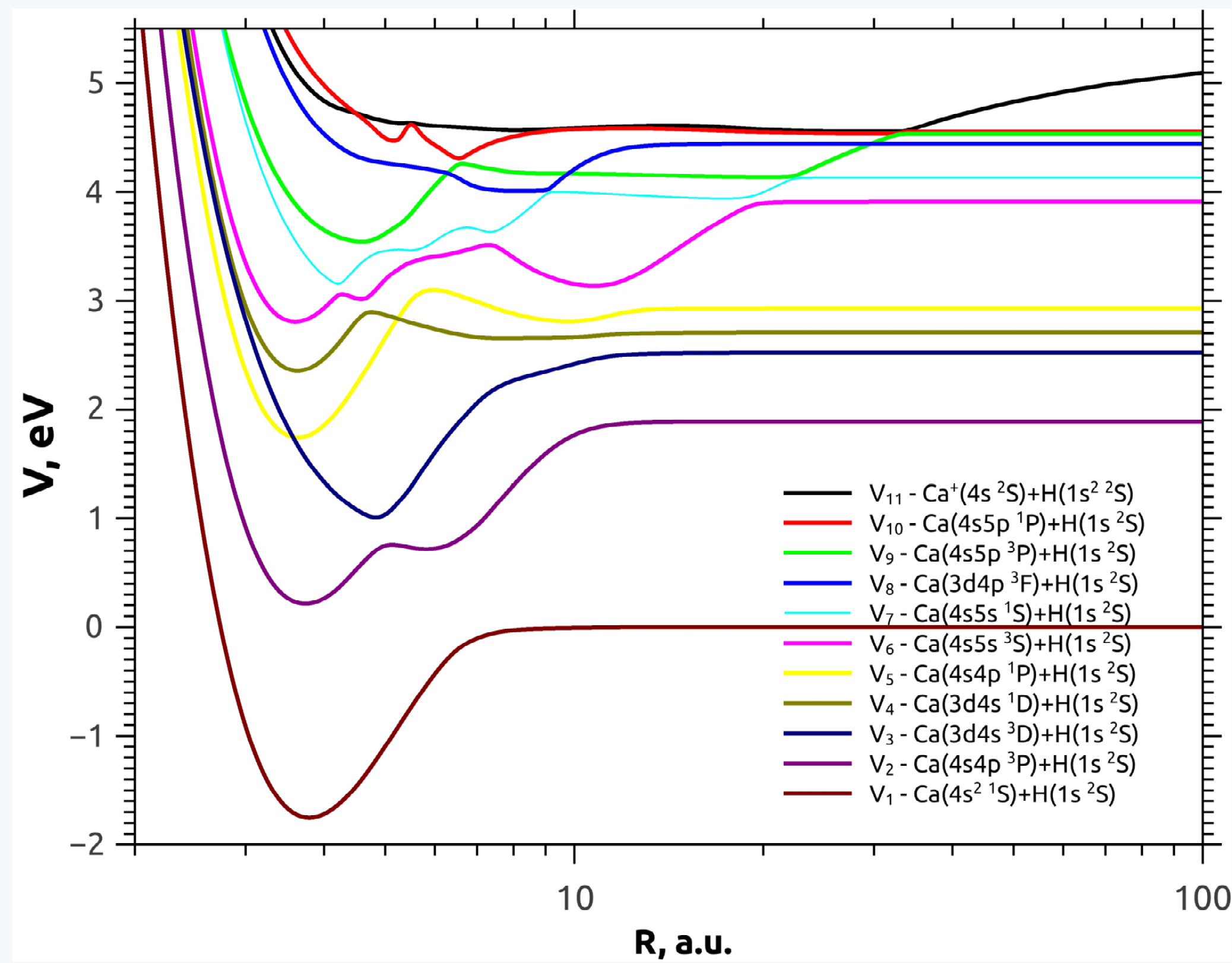


Рис. 2: Потенциальные кривые в гибридном диабатическом представлении

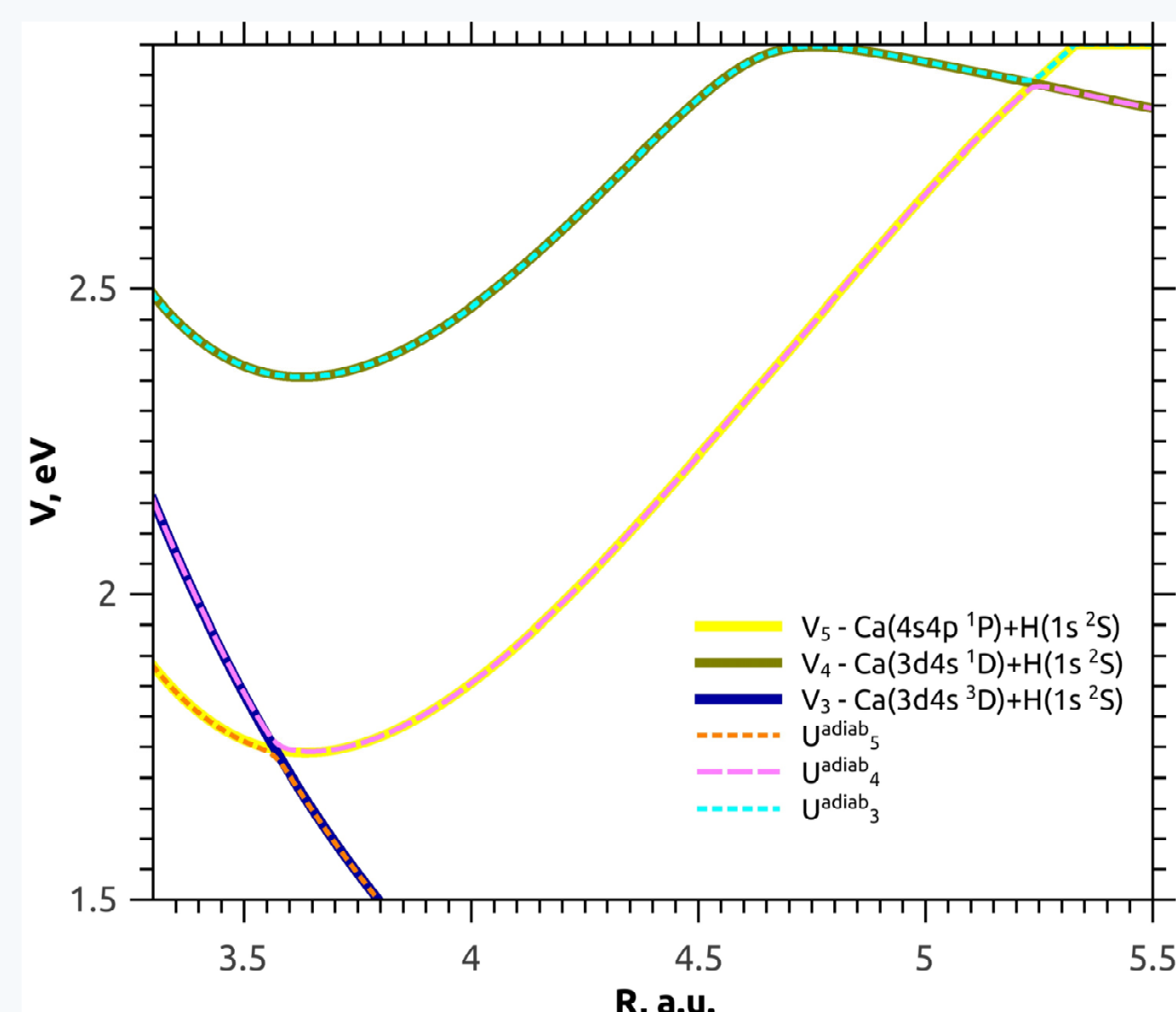


Рис. 3: Диабатические потенциалы V_3, V_4, V_5

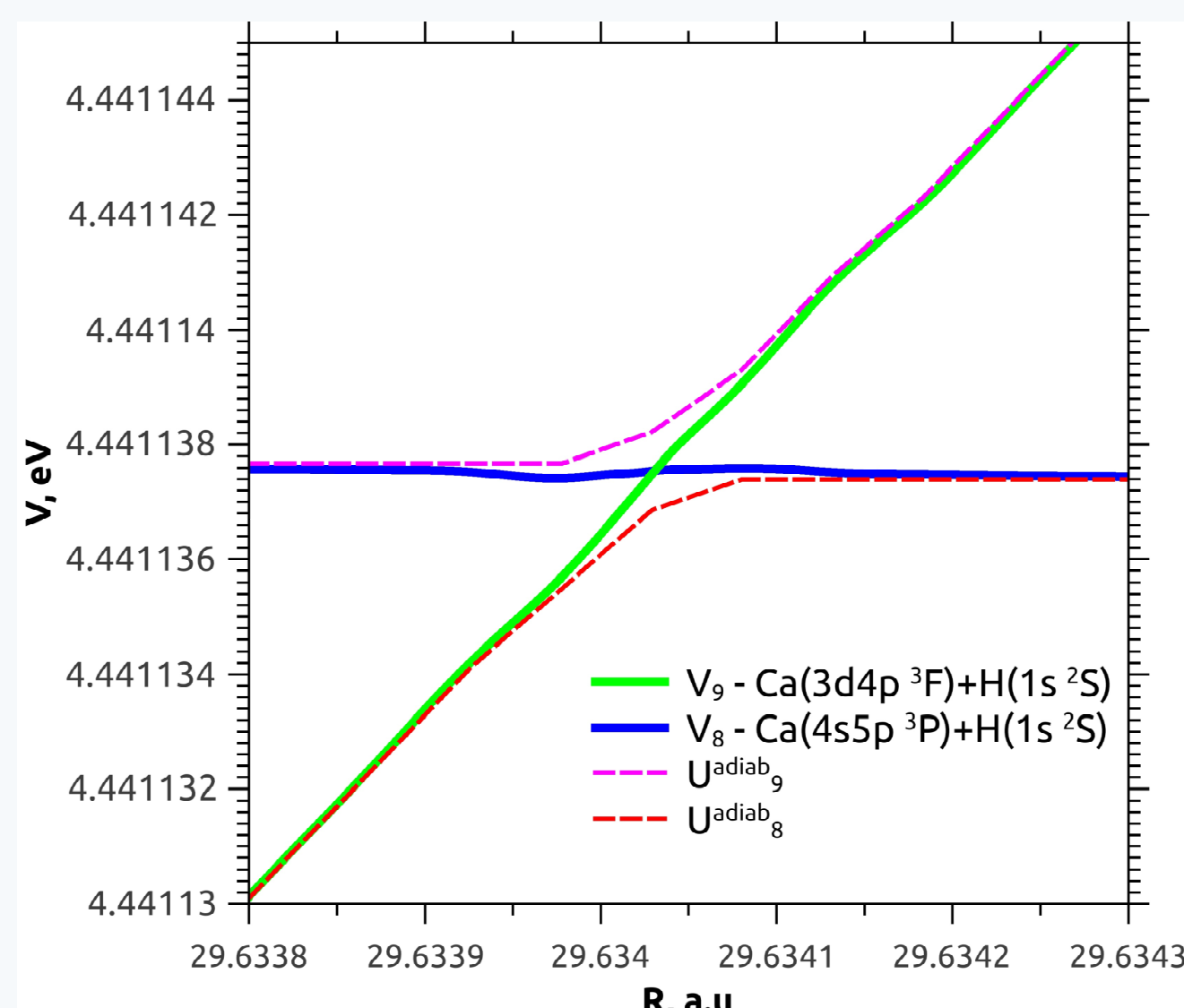


Рис. 4: Диабатические потенциалы V_8, V_9

На рисунке 1 представлены сечения взаимной нейтрализации для однократно ионизованного атома кальция в нижележащие десять молекулярных состояний $^2\Sigma^+$ CaH [5]. Расчет сечений девозбуждений и взаимной нейтрализации осуществляется путём перерасчета из значений сечений возбуждений и сечений образования ионной пары. Подготовленные в рамках текущих вычислений гибридные [4] диабатические потенциальные кривые представлены на рисунке 2. Области неадиабатичности, подвергнутые предварительной процедуре гибридной диабатизации изображены отдельно на рисунках 3 и 4. Из двух последних графиков видно, что соответствующие области неадиабатичности имеют малые размеры. Особенно это заметно на рисунке 4. Таким образом, вычисление сечений процессов в рамках чисто квантового подхода может требовать предварительного анализа и обработки входных квантово-химических данных.

Решение *системы связанных уравнений* имеет большое значение для получения *наиболее точных* значений сечений процессов возбуждения, девозбуждения и взаимной нейтрализации. Данный тип вычислений чувствителен к входному набору квантово-химических данных при наличии узких областей неадиабатичности, особенно для высоковозбужденных состояний рассматриваемой квазимолекулы. Также он является достаточно трудоемким, но позволяет уточнить модельные способы расчета сечений. Набор сечений, необходимых для получения констант скоростей процессов для CaH находятся на этапе расчета.

- [1] A. K. Belyaev, S. A. Yakovleva, M. Guitou, A. O. Mitrushchenkov, A. Spielfiedel, and N. Feautrier. *Astronomy & Astrophysics*, 587:A114, feb 2016, doi:10.1051/0004-6361/201527651.
- [2] A. K. Belyaev, Y. V. Voronov, S. A. Yakovleva, A. Mitrushchenkov, M. Guitou, and N. Feautrier. *The Astrophysical Journal*, 851(1):59, dec 2017, doi:10.3847/1538-4357/aa98da.
- [3] Andrey K. Belyaev. *Physical Review A*, 88(5), nov 2013, doi:10.1103/physreva.88.052704.
- [4] D. V. Vlasov, D. S. Rodionov, and A. K. Belyaev. *Optics and Spectroscopy*, 124(5):611–617, may 2018, doi:10.1134/s0030400x18050223.
- [5] A. Mitrushchenkov, M. Guitou, A. K. Belyaev, S. A. Yakovleva, A. Spielfiedel, and N. Feautrier. *The Journal of Chemical Physics*, 146(1):014304, jan 2017, doi:10.1063/1.4973457.
- [6] Paul S. Barklem. *The Astronomy and Astrophysics Review*, 24(1), may 2016, doi:10.1007/s00159-016-0095-9.