

Данные о неупругих процессах при  
столкновениях с водородом:  
последние достижения и проблемы

Яковлева Светлана Анатольевна

Беляев Андрей Константинович

Кафедра теоретической физики и астрономии РГПУ им. А. И. Герцена

27 июня 2023 г.

## Численные расчёты в рамках подхода Борна-Оппенгеймера

В представлении L-S связи (без учета тонкой структуры)

Электронная структура:

1. Квантово-химические расчёты из первых принципов
2. Асимптотический подход

Ядерная динамика:

1. Решение системы связанных уравнений
2. Метод токов вероятностей
3. Многоканальная формула
4. Упрощенный модельный подход

## Численные расчёты в рамках подхода Борна-Оппенгеймера

В представлении J-J связи (с учетом тонкой структуры)

Электронная структура:

1. Квантово-химические расчёты из первых принципов (очень редкие)
2. Асимптотический подход (разделение матричного элемента взаимодействия в LS представлении)

Ядерная динамика:

1. Решение системы связанных уравнений
2. Метод токов вероятностей
3. Многоканальная формула
4. Упрощенный модельный подход

# Проведенные расчёты для столкновений с водородом

1 IA										18 VIIIA									
1	1.0079											2	4.0025						
	<b>H</b>												<b>He</b>						
	Hydrogen												Helium						
2	3 6.941	4 9.0122											5 10.811	6 12.011	7 14.007	8 15.999	9 18.998	10 20.180	
	<b>Li</b>	<b>Be</b>											<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>	
	Lithium	Beryllium											Boron	Carbon	Nitrogen	Oxygen	Fluorine	Neon	
3	11 22.990	12 24.305											13 26.982	14 28.086	15 30.974	16 32.065	17 35.453	18 39.948	
	<b>Na</b>	<b>Mg</b>											<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Ar</b>	
	Sodium	Magnesium											Aluminium	Silicon	Phosphorus	Sulphur	Chlorine	Argon	
4	19 39.098	20 40.078	21 44.956	22 47.867	23 50.942	24 51.996	25 54.938	26 55.845	27 58.933	28 58.693	29 63.546	30 65.39	31 69.723	32 72.64	33 74.922	34 78.96	35 79.904	36 83.8	
	<b>K</b>	<b>Ca</b>	<b>Sc</b>	<b>Ti</b>	<b>V</b>	<b>Cr</b>	<b>Mn</b>	<b>Fe</b>	<b>Co</b>	<b>Ni</b>	<b>Cu</b>	<b>Zn</b>	<b>Ga</b>	<b>Ge</b>	<b>As</b>	<b>Se</b>	<b>Br</b>	<b>Kr</b>	
	Potassium	Calcium	Scandium	Titanium	Vanadium	Chromium	Manganese	Iron	Cobalt	Nickel	Copper	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Selenium	Bromine	Krypton	
5	37 85.468	38 87.62	39 88.906	40 91.224	41 92.906	42 95.94	43 96	44 101.07	45 102.91	46 106.42	47 107.87	48 112.41	49 114.82	50 118.71	51 121.76	52 127.6	53 126.9	54 131.29	
	<b>Rb</b>	<b>Sr</b>	<b>Y</b>	<b>Zr</b>	<b>Nb</b>	<b>Mo</b>	<b>Tc</b>	<b>Ru</b>	<b>Rh</b>	<b>Pd</b>	<b>Ag</b>	<b>Cd</b>	<b>In</b>	<b>Sn</b>	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>I</b>	<b>Xe</b>	
	Rubidium	Strontium	Yttrium	Zirconium	Niobium	Molybdenum	Technetium	Ruthenium	Rhodium	Palladium	Silver	Cadmium	Indium	Tin	Antimony	Tellurium	Iodine	Xenon	
6	55 132.91	56 137.33	57-71	72 178.49	73 180.95	74 183.84	75 186.21	76 190.23	77 192.22	78 195.08	79 196.97	80 200.59	81 204.38	82 207.2	83 208.98	84 209	85 210	86 222	
	<b>Cs</b>	<b>Ba</b>	Lanthanide	<b>Hf</b>	<b>Ta</b>	<b>W</b>	<b>Re</b>	<b>Os</b>	<b>Ir</b>	<b>Pt</b>	<b>Au</b>	<b>Hg</b>	<b>Tl</b>	<b>Pb</b>	<b>Bi</b>	<b>Po</b>	<b>At</b>	<b>Rn</b>	
	Cesium	Barium		Hafnium	Tantalum	Tungsten	Rhenium	Osmium	Iridium	Platinum	Gold	Mercury	Thallium	Lead	Bismuth	Polonium	Astatine	Radon	
7	87 223	88 226	89-103	104 261	105 262	106 266	107 264	108 277	109 268	110 281	111 280	112 285	113 284	114 289	115 288	116 293	117 292	118 294	
	<b>Fr</b>	<b>Ra</b>	Actinide	<b>Rf</b>	<b>Db</b>	<b>Sg</b>	<b>Bh</b>	<b>Hs</b>	<b>Mt</b>	<b>Ds</b>	<b>Rg</b>	<b>Cn</b>	<b>Nh</b>	<b>Fl</b>	<b>Mc</b>	<b>Lv</b>	<b>Ts</b>	<b>Og</b>	
	Francium	Radium		Rutherfordium	Dubnium	Seaborgium	Bohrium	Hassium	Meitnerium	Darmstadtium	Roentgenium	Copernicium	Nihonium	Flerovium	Moscovium	Livermorium	Tennessee	Oganesson	
	57 138.91	58 140.12	59 140.91	60 144.24	61 145	62 150.36	63 151.96	64 157.25	65 158.93	66 162.50	67 164.93	68 167.26	69 168.93	70 173.04	71 174.97				
	<b>La</b>	<b>Ce</b>	<b>Pr</b>	<b>Nd</b>	<b>Pm</b>	<b>Sm</b>	<b>Eu</b>	<b>Gd</b>	<b>Tb</b>	<b>Dy</b>	<b>Ho</b>	<b>Er</b>	<b>Tm</b>	<b>Yb</b>	<b>Lu</b>				
	Lanthanum	Cerium	Praseodymium	Neodymium	Promethium	Samarium	Europium	Gadolinium	Terbium	Dysprosium	Holmium	Erbium	Thulium	Ytterbium	Lutetium				
	89 227	90 232.04	91 231.04	92 238.03	93 237	94 244	95 243	96 247	97 247	98 251	99 252	100 257	101 258	102 259	103 262				
	<b>Ac</b>	<b>Th</b>	<b>Pa</b>	<b>U</b>	<b>Np</b>	<b>Pu</b>	<b>Am</b>	<b>Cm</b>	<b>Bk</b>	<b>Cf</b>	<b>Es</b>	<b>Fm</b>	<b>Md</b>	<b>No</b>	<b>Lr</b>				
	Actinium	Thorium	Protactinium	Uranium	Neptunium	Plutonium	Americium	Curium	Berkelium	Californium	Einsteinium	Fermium	Mendelevium	Nobelium	Lawrencium				

- Full quantum
- Probability currents
- Probability currents with fine structure
- Multichannel formula
- Multichannel formula with fine structure
- Simplified model

# Проведенные расчёты для столкновений с водородом

1 IA										18 VIIIA																										
1	1.0079 <b>H</b> Hydrogen										2 4.0025 <b>He</b> Helium																									
2	3 6.941 <b>Li</b> Lithium		4 9.0122 <b>Be</b> Beryllium												5 10.811 <b>B</b> Boron		6 12.011 <b>C</b> Carbon		7 14.007 <b>N</b> Nitrogen		8 15.999 <b>O</b> Oxygen		9 18.998 <b>F</b> Fluorine		10 20.180 <b>Ne</b> Neon											
3	11 22.990 <b>Na</b> Sodium		12 24.305 <b>Mg</b> Magnesium												13 26.982 <b>Al</b> Aluminium		14 28.086 <b>Si</b> Silicon		15 30.974 <b>P</b> Phosphorus		16 32.065 <b>S</b> Sulphur		17 35.453 <b>Cl</b> Chlorine		18 39.948 <b>Ar</b> Argon											
4	19 39.098 <b>K</b> Potassium		20 40.078 <b>Ca</b> Calcium		21 44.956 <b>Sc</b> Scandium		22 47.867 <b>Ti</b> Titanium		23 50.942 <b>V</b> Vanadium		24 51.996 <b>Cr</b> Chromium		25 54.938 <b>Mn</b> Manganese		26 55.845 <b>Fe</b> Iron		27 58.933 <b>Co</b> Cobalt		28 58.693 <b>Ni</b> Nickel		29 63.546 <b>Cu</b> Copper		30 65.39 <b>Zn</b> Zinc		31 69.723 <b>Ga</b> Gallium		32 72.64 <b>Ge</b> Germanium		33 74.922 <b>As</b> Arsenic		34 78.96 <b>Se</b> Selenium		35 79.904 <b>Br</b> Bromine		36 83.8 <b>Kr</b> Krypton	
5	37 85.468 <b>Rb</b> Rubidium		38 87.62 <b>Sr</b> Strontium		39 88.906 <b>Y</b> Yttrium		40 91.224 <b>Zr</b> Zirconium		41 92.906 <b>Nb</b> Niobium		42 95.94 <b>Mo</b> Molybdenum		43 96 <b>Tc</b> Technetium		44 101.07 <b>Ru</b> Ruthenium		45 102.91 <b>Rh</b> Rhodium		46 106.42 <b>Pd</b> Palladium		47 107.87 <b>Ag</b> Silver		48 112.41 <b>Cd</b> Cadmium		49 114.82 <b>In</b> Indium		50 118.71 <b>Sn</b> Tin		51 121.76 <b>Sb</b> Antimony		52 127.6 <b>Te</b> Tellurium		53 126.9 <b>I</b> Iodine		54 131.29 <b>Xe</b> Xenon	
6	55 132.91 <b>Cs</b> Caesium		56 137.33 <b>Ba</b> Barium		57-71 Lanthanide		72 178.49 <b>Hf</b> Hafnium		73 180.95 <b>Ta</b> Tantalum		74 183.84 <b>W</b> Tungsten		75 186.21 <b>Re</b> Rhenium		76 190.23 <b>Os</b> Osmium		77 192.22 <b>Ir</b> Iridium		78 195.08 <b>Pt</b> Platinum		79 196.97 <b>Au</b> Gold		80 200.59 <b>Hg</b> Mercury		81 204.38 <b>Tl</b> Thallium		82 207.2 <b>Pb</b> Lead		83 208.98 <b>Bi</b> Bismuth		84 209 <b>Po</b> Polonium		85 210 <b>At</b> Astatine		86 222 <b>Rn</b> Radon	
7	87 223 <b>Fr</b> Francium		88 226 <b>Ra</b> Radium		89-103 Actinide		104 261 <b>Rf</b> Rutherfordium		105 262 <b>Db</b> Dubnium		106 266 <b>Sg</b> Seaborgium		107 264 <b>Bh</b> Bohrium		108 277 <b>Hs</b> Hassium		109 268 <b>Mt</b> Meitnerium		110 281 <b>Ds</b> Darmstadtium		111 280 <b>Rg</b> Roentgenium		112 285 <b>Cn</b> Copernicium		113 284 <b>Nh</b> Nihonium		114 289 <b>Fl</b> Flerovium		115 288 <b>Mc</b> Moscovium		116 293 <b>Lv</b> Livermorium		117 292 <b>Ts</b> Tennessine		118 294 <b>Og</b> Oganesson	

- Full quantum
- Probability currents
- Probability currents with fine structure
- Multichannel formula
- Multichannel formula with fine structure
- Simplified model

57 138.91 <b>La</b> Lanthanum	58 140.12 <b>Ce</b> Cerium	59 140.91 <b>Pr</b> Praseodymium	60 144.24 <b>Nd</b> Neodymium	61 145 <b>Pm</b> Promethium	62 150.36 <b>Sm</b> Samarium	63 151.96 <b>Eu</b> Europium	64 157.25 <b>Gd</b> Gadolinium	65 158.93 <b>Tb</b> Terbium	66 162.50 <b>Dy</b> Dysprosium	67 164.93 <b>Ho</b> Holmium	68 167.26 <b>Er</b> Erbium	69 168.93 <b>Tm</b> Thulium	70 173.04 <b>Yb</b> Ytterbium	71 174.97 <b>Lu</b> Lutetium
-------------------------------------	----------------------------------	--	-------------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------

89 227 <b>Ac</b> Actinium	90 232.04 <b>Th</b> Thorium	91 231.04 <b>Pa</b> Protactinium	92 238.03 <b>U</b> Uranium	93 237 <b>Np</b> Neptunium	94 244 <b>Pu</b> Plutonium	95 243 <b>Am</b> Americium	96 247 <b>Cm</b> Curium	97 247 <b>Bk</b> Berkelium	98 251 <b>Cf</b> Californium	99 252 <b>Es</b> Einsteinium	100 257 <b>Fm</b> Fermium	101 258 <b>Md</b> Mendelevium	102 259 <b>No</b> Nobelium	103 262 <b>Lr</b> Lawrencium
---------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	-------------------------------	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	------------------------------------

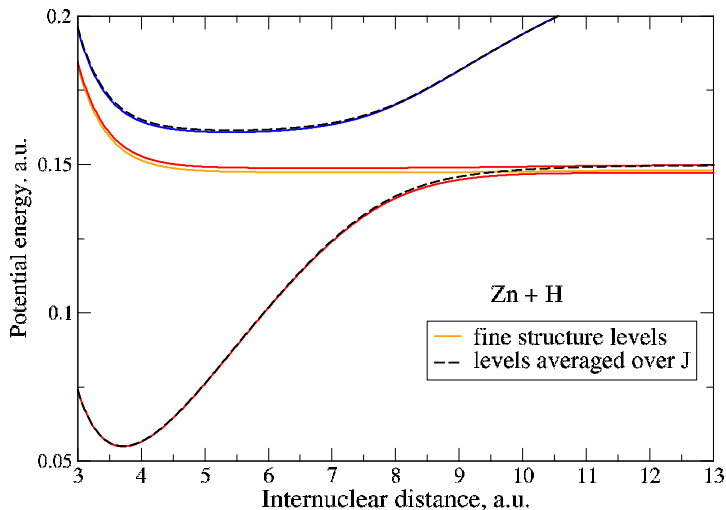
## Недавние расчеты атомных данных

- ▶  $V + H$  и  $V^+ + H^-$ ,  $V^+ + H$  и  $V^{2+} + H^-$  (постер ID-75, Воронов Я.В.)
- ▶  $Y + H$  и  $Y^+ + H^-$  (постер ID-71, Васильева В.А.)
- ▶  $Y^+ + H$  и  $Y^{2+} + H^-$   
91 молекулярное состояние, взаимодействующее с  $Y^{2+}(4p^6 4d^2 D) + H^-$  ( $^2\Sigma^+$ ,  $^2\Pi$ ,  $^2\Delta$  симметрия)  
38 молекулярных состояний, взаимодействующих с  $Y^{2+}(4p^6 5s^2 S) + H^-$  ( $^2\Sigma^+$  симметрия)
- ▶  $Cr + H$  и  $Cr^+ + H^-$   
16 молекулярных состояний, взаимодействующих с  $Cr^+(3d^5^6S) + H^-$  ( $^6\Sigma^+$  симметрия)  
38 молекулярных состояний, взаимодействующих с  $Cr^+(3d^4(^5D)4s^6D) + H^-$  ( $^6\Sigma^+$ ,  $^6\Pi$ ,  $^6\Delta$  симметрии)

## Основные сложности при модельных расчётах

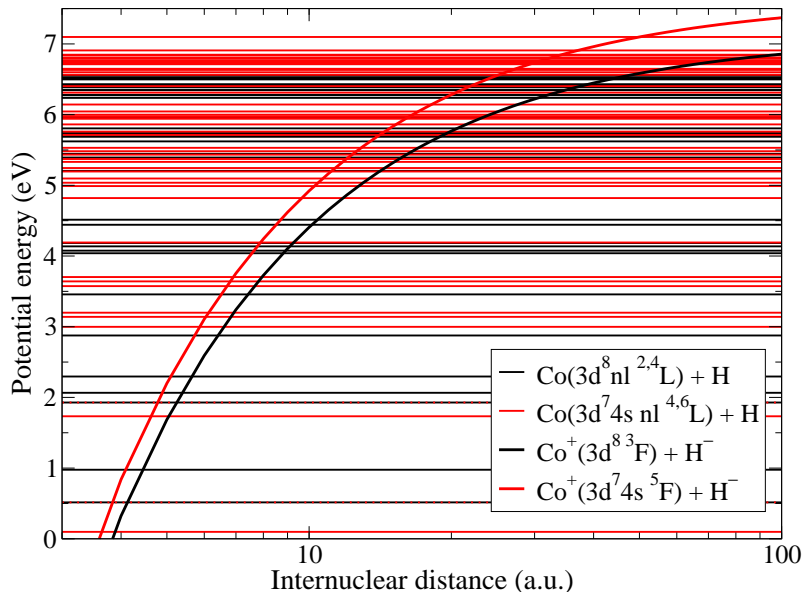
- ▶ Разделение перекрывающихся областей неадиабатичности в модели Ландау-Зинера;
- ▶ Учет ионных термов одной симметрии в модельных расчётах;
- ▶ Перекрывание уровней тонкой структуры;
- ▶ Неопределенные квантовые числа  $L$  и  $S$ .

## Перекрывание областей неадиабатичности





## Несколько ионных термов



## Перекрывание уровней тонкой структуры

Ni I 288 Levels Found  
Z = 28, Ni isoelectronic sequence

Configuration	Term	J	Level (eV)
3d8.(3F).4s2	3F	4	0.0000000
		3	0.1651673
		2	0.2748172
3d9.(2D).4s	3D	3	0.0253904
		2	0.1090833
		1	0.2123957
3d9.(2D).4s	1D	2	0.4227783
3d8.(1D).4s2	1D	2	1.6764334
3d10	1S	0	1.8261434
3d8.(3P).4s2	3P	2	1.9353740
		1	1.9507675
		0	1.9858928
3d8.(1G).4s2	1G	4	2.7403390
3d8.(3F).4s.4p.(3P*)	5D*	4	3.1930336
		3	3.3061486
		2	3.3990104
		1	3.4645554
		0	3.4979659
3d8.(3F).4s.4p.(3P*)	5G*	6	3.3799201
		5	3.4195327
		4	3.4799965
		3	3.5432227
		2	3.5971791
3d8.(3F).4s.4p.(3P*)	5F*	5	3.5387700
		4	3.6060130
		3	3.6987932
		2	3.7397508

## Неопределённые квантовые числа L и S

La I 343 Levels Found  
Z = 57, La isoelectronic sequence

Configuration	Term	J	Level (eV)
5d.6s2	2D	3/2	0.0000000
		5/2	0.1305757
	.....		
5d.6s.(3D).6p	*	5/2	1.690034
5d.6s.(3D).6p	4D*	1/2	1.747643
		3/2	1.823674
		5/2	1.922206
		7/2	1.996058
5d.6s.(3D).6p	*	3/2	1.863686
4f.6s2	2F*	5/2	1.884167
		7/2	2.050499
5d.6s.(3D).6p	*	1/2	1.887026
6s2.6p	*	3/2	2.018495
5d3	4P	1/2	2.060283
		3/2	2.074893
		5/2	2.120053
5d2.(3F).6p	*	5/2	2.089977
5d2.(1S).6s	2S	1/2	2.106668
5d3	2G	7/2	2.110628
		9/2	2.125201
5d.6s.(3D).6p	4P*	1/2	2.178091
		3/2	2.206583
		5/2	2.251177
5d2.(3F).6p	*	7/2	2.220578

## Дальнейшие планы

- ▶ Проведение точных квантовых расчётов там, где это возможно (постер ID-91, Рыбась А.А.; постер ID-73, Яковлев М.Ю.)
- ▶ Учёт тонкой структуры для различных молекулярных симметрий;
- ▶ Разработка подхода для перекрывающихся областей неадиабатичности (постер ID-85, Степанов И.Г.);
- ▶ Применение метода перепроецирования для модельных расчётов;
- ▶ Удобный пользовательский интерфейс для упрощённой модели;
- ▶ Мы открыты для предложений новых расчётов.