

Расчёты атомных данных о неупругих процессах при столкновениях

ИТТРИЯ С ВОДОРОДОМ

Васильева В.А. Яковлева С.А. Беляев А.К.

РГПУ им. А.И. Герцена

В данном исследовании рассчитаны сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов иттрия и водорода при низких энергиях. Рассмотрены четыре ионных состояния $Y^+ + H^-$, для каждого из которых сопоставлены ковалентные состояния, соответствующие одноэлектронным переходам. Для каждого из четырех наборов состояний проведены исследования неадиабатической ядерной динамики во всех молекулярных симметриях, которые порождает то или иное ионное состояние. Рассмотрены неупругие процессы, связанные с неадиабатическими переходами между 96 различными состояниями квазимолекулы YH . Всего рассмотрено 2726 неупругих процессов, рассчитаны и проанализированы их сечения для диапазона энергий столкновений от 0.001 эВ до 100 эВ и константы скоростей для температур от 1000 К до 10000 К.

Теория

Вероятность перехода при однократном прохождении области неадиабатичности в рамках модели Ландау-Зинера:

$$p_n = \exp\left(-\frac{\xi_{LZ}}{v}\right)$$

где v - скорость радиального движения в центре области неадиабатичности R_C , а ξ_{LZ} - параметр Ландау - Зинера, определяемый как:

$$\xi_{LZ} = \frac{\pi}{2\hbar} \sqrt{\frac{Z^3}{Z''}} \Big|_{R=R_C}$$

где Z - энергетическое расщепление в центре области неадиабатичности.

Многоканальная формула:

$$p_{if} = 2p_f(1-p_f)(1-p_i) \prod_{k=f+1}^{i-1} p_k \times \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{2(f-1)} \prod_{k=1}^m (-p_{f-\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor}) \right\} \times \left\{ 1 - \frac{\prod_{k=1}^F p_k^2 \left(1 + \sum_{m=1}^{2(i-1)} \prod_{k=1}^m (-p_{i-\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor}) \right)}{\sum_{m=1}^{2F} \prod_{k=1}^m (-p_{F+1-\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor})} \right\}$$

где p_n - вероятности перехода при однократном прохождении области неадиабатичности, F - полное число энергетически открытых каналов.

Сечение:

$$\sigma_{if}(E) = \frac{\pi \hbar^2 p_i^{stat}}{2\mu E} \sum_{J=0}^{J_{max}} p_{if}(J, E)(2J+1)$$

Константа скорости:

$$K_{if}(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi \mu (k_B T)^3}} \int_0^\infty \sigma_{if}(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) E dE$$

Каналы рассеяния квазимолекулы YH , их молекулярные симметрии и асимптотические значения энергии по данным NIST [1], отсчитанные от асимптотики основного состояния.

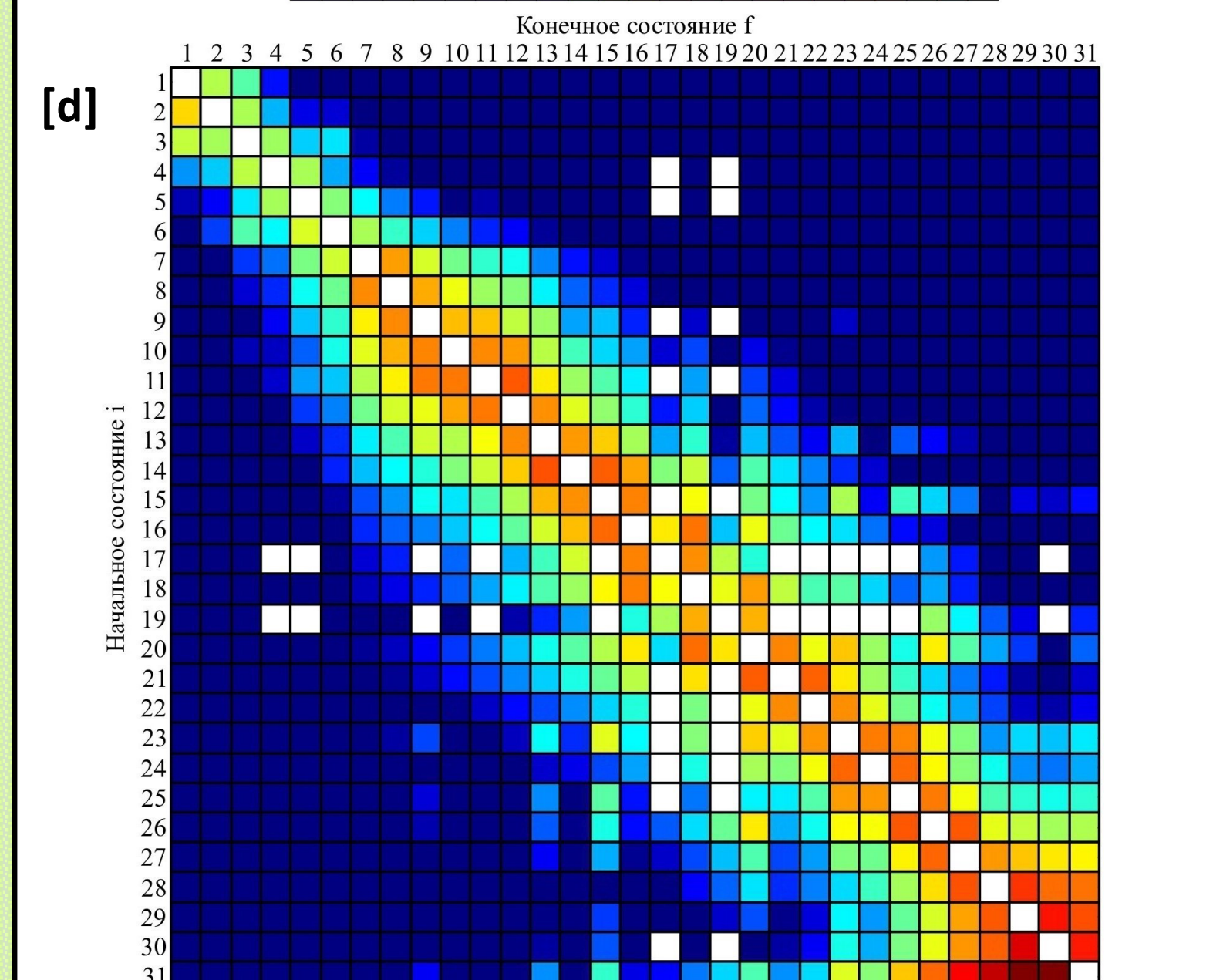
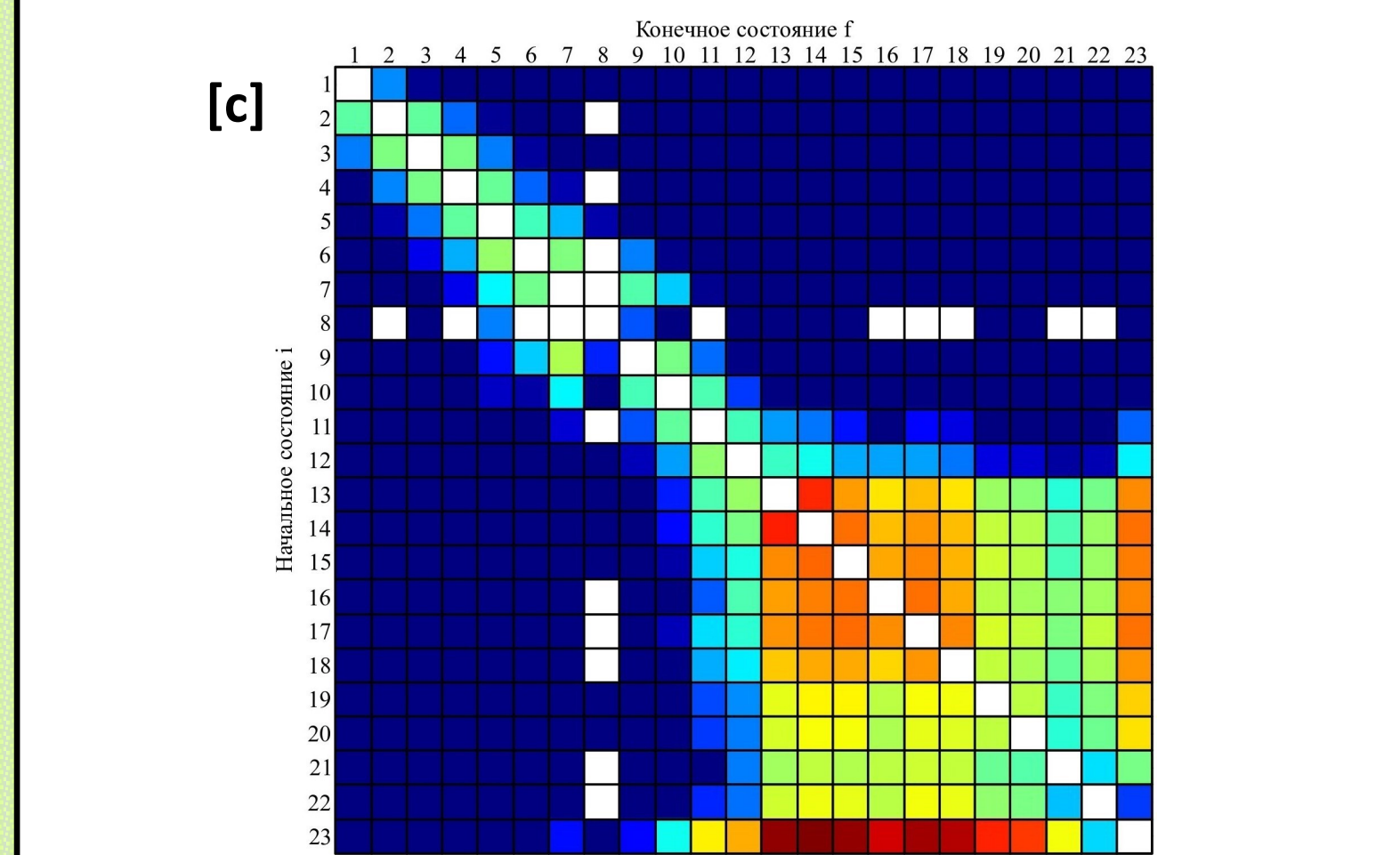
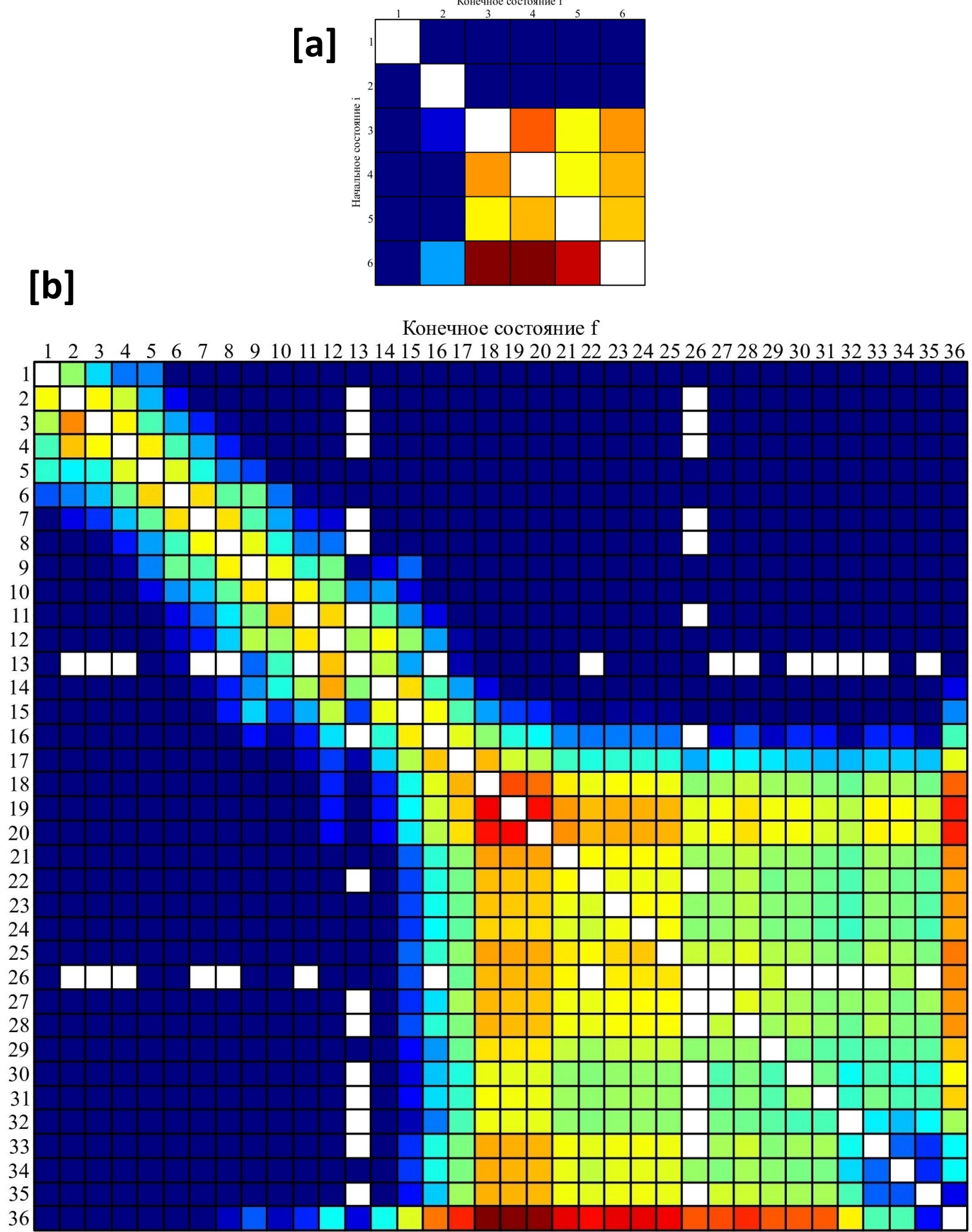
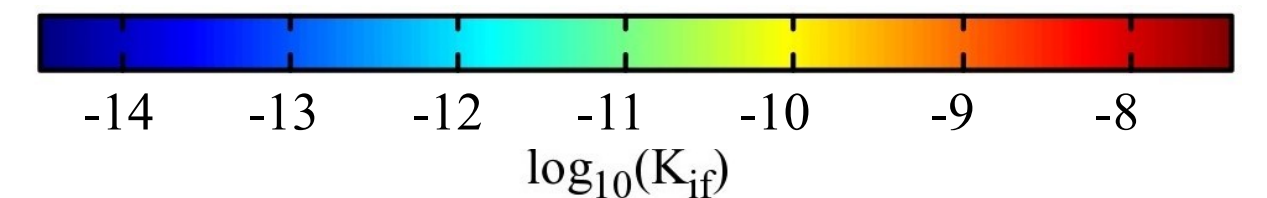
[a] j	Канал рассеяния	Молекулярная симметрия	Асимп. энергия
1	$Y(4d5s^2 \ ^2D) + H$	$^1\Sigma^+$	0.03885 эВ
2	$Y(5s^2 5p \ ^2P) + H$	$^1\Sigma^+$	1.37165 эВ
3	$Y(5s^2 6s \ ^2S) + H$	$^1\Sigma^+$	3.92677 эВ
4	$Y(5s^2(\ ^2D) 5d \ ^2D) + H$	$^1\Sigma^+$	4.24606 эВ
5	$Y(5s^2(\ ^1S) 6p \ ^2P) + H$	$^1\Sigma^+$	4.61472 эВ
6	$Y^+(5s^2 \ ^1S) + H^-$	$^1\Sigma^+$	5.46326 эВ

[c] j	Канал рассеяния	Молекулярные симметрии	Асимп. энергия
1	$Y(4d5s^2 \ ^2D) + H$	$^1\Sigma^+ \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	0.03885 эВ
...
13	$Y(4d5s(\ ^3D) 6s \ ^2D) + H$	$^1\Sigma^+ \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	4.51635 эВ
14	$Y(4d5s(\ ^1D) 6s \ ^2D) + H$	$^1\Sigma^+ \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	4.58576 эВ
15	$Y(4d5s(\ ^3D) 6p \ ^2F) + H$	$^1\Sigma^+ \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	4.83337 эВ
16	$Y(4d5s(\ ^3D) 5p \ ^2P) + H$	$- \ ^1\Pi -$	4.85594 эВ
17	$Y(4d5s(\ ^3D) 6p \ ^2D) + H$	$- \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	4.86874 эВ
18	$Y(4d5s(\ ^3D) 5d \ ^2F) + H$	$- \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	4.92681 эВ
...
23	$Y^+(4d5s \ ^1D) + H^-$	$^1\Sigma^+ \ ^1\Pi \ ^1\Delta$	5.87193 эВ

[b] j	Канал рассеяния	Молекулярные симметрии	Асимп. энергия
1	$Y(4d5s^2 \ ^2D) + H$	$^3\Sigma^+ \ ^3\Pi \ ^3\Delta$	0.03885 эВ
...
18	$Y(4d5s(\ ^3D) 6s \ ^4D) + H$	$^3\Sigma^+ \ ^3\Pi \ ^3\Delta$	4.15074 эВ
19	$Y(4d5s(\ ^3D) 6s \ ^2D) + H$	$^3\Sigma^+ \ ^3\Pi \ ^3\Delta$	4.51635 эВ
20	$Y(4d5s(\ ^1D) 6s \ ^2D) + H$	$^3\Sigma^+ \ ^3\Pi \ ^3\Delta$	4.58576 эВ
...
36	$Y^+(4d5s \ ^3D) + H^-$	$^3\Sigma^+ \ ^3\Pi \ ^3\Delta$	5.61116 эВ

[d] j	Канал рассеяния	Молекулярные симметрии	Асимп. энергия
1	$Y(4d^2(\ ^3F) 5s \ ^4F) + H$	$^3\Sigma^- \ ^3\Pi \ ^3\Delta \ ^3\Phi$	1.39762 эВ
...
29	$Y(4d^2(\ ^3F) 6s \ ^4F) + H$	$^3\Sigma^- \ ^3\Pi \ ^3\Delta \ ^3\Phi$	5.26831 эВ
30	$Y(4d^2(\ ^1G) 5p \ ^2F) + H$	$- \ ^3\Pi \ ^3\Delta \ ^3\Phi$	5.32333 эВ
31	$Y^+(4d^2 \ ^3F) + H^-$	$^3\Sigma^- \ ^3\Pi \ ^3\Delta \ ^3\Phi$	6.50828 эВ

В таблицах приведены молекулярные состояния, неупругие процессы с участием которых имеют наибольшие значения констант скоростей. Все они соответствуют процессам нейтрализации, т.е. переходам из ионного входного канала в ковалентные состояния. Неупругие процессы с большими значениями констант скоростей могут быть важны для учета эффектов отклонения от локального термодинамического равновесия при астрофизическом моделировании.



Графическое представление констант скоростей системы YH при $T = 6000$ К.

1. Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
2. Vasileva V. A., Yakovleva S. A. // Physics of Complex Systems (in press)