

Атомные данные о неупругих процессах, происходящих при столкновениях $B + H$ и $B^+ + H$

Я. В. Воронов, А. К. Беляев

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

Email: voronovj@herzen.spb.ru, andrey.k.belyaev@gmail.com

Квантовым модельным методом исследованы неупругие процессы, происходящие при низкоэнергетических столкновениях $B + H$, $B^+ + H$, $B^+ + H$ и $B^{2+} + H$. Электронная структура рассчитана в рамках асимптотического подхода. Ядерная динамика исследована с помощью многоканальной формулы. Особое внимание уделено процессам, связанным с образованием резонансных спектральных линий $B\ I$ (249.7 нм, 209.0 нм) и $B\ II$ (136.2 нм). Показано, что константы скорости процессов девозбуждения $B(2s^23s\ ^2S) + H \rightarrow B(2s^22p\ ^2P) + H$ и $B(2s2p^2\ ^2D) + H \rightarrow B(2s^22p\ ^2P) + H$ без учёта тонкой структуры имеют величины порядка 10^{-30} - 10^{-34} см³/с, в то время как с учётом тонкой структуры величины констант скорости возрастают до значений вплоть до 10^{-12} см³/с. Для процесса $B^+(2s2p\ ^2P) + H(1s\ ^2S) \rightarrow B^+(2s^2\ ^2S) + H(1s\ ^2S)$ величина константы скорости составляет примерно 10^{-16} см³/с. Выявлены процессы с наибольшими величинами констант скорости, в основном соответствующие процессам нейтрализации. Использование полученных констант скорости позволит получить более точные результаты при моделировании спектральных линий бора в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия.

Краткая теория

Модель Ландау-Зинера:

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

$$p = \exp\left(-\frac{\xi LZ}{v}\right)$$

где v — радиальная скорость движения в центре области неадиабатичности R_C ,

ξLZ — параметр Ландау-Зинера, рассчитываемый через энергетическое расщепление $\Delta U(R_C)$ в центре области неадиабатичности и вторую производную от него.

Многоканальная формула [1]:

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

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

Сечение неупругого процесса:

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

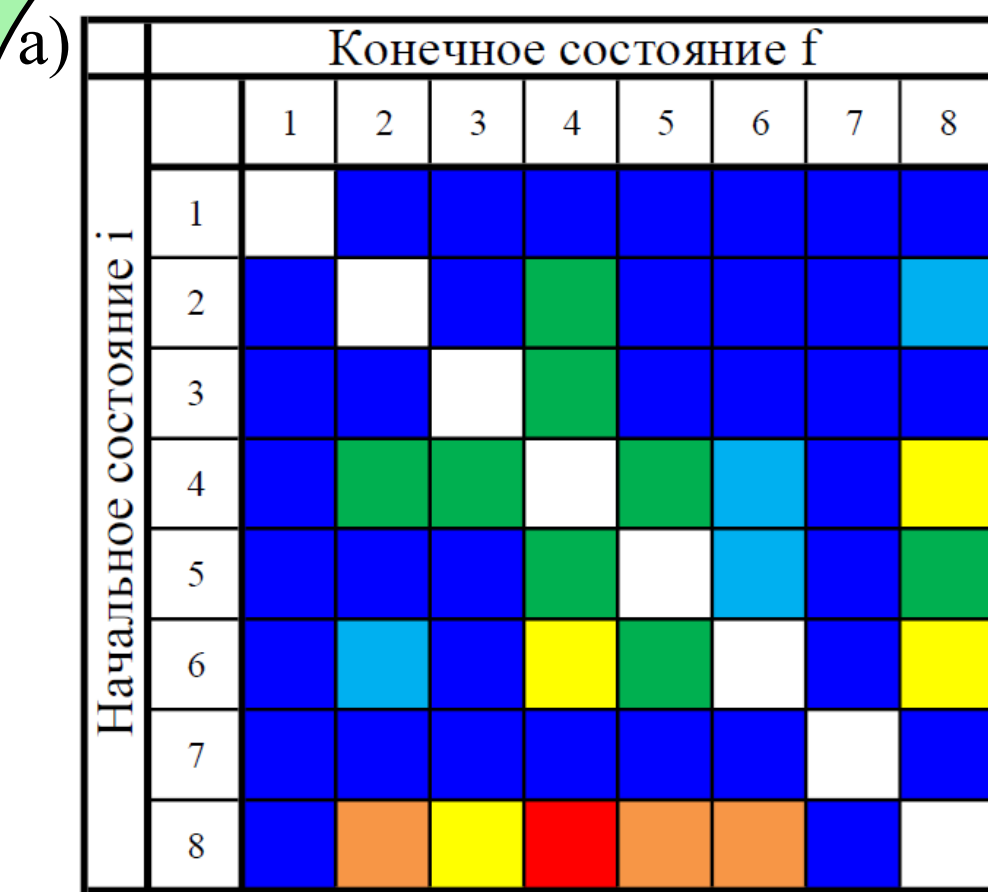
Константа скорости:

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

$$k_{fi}(T) = k_{if}(T) \frac{p_f^{stat}}{p_i^{stat}} \exp\left(-\frac{\Delta E_{if}}{k_B T}\right)$$

где p^{stat} — статистическая заселённость начального и конечного состояний i и f .

$BH(^1\Sigma^+)$ [2,3]



Константы скорости процессов $B(2s^23s\ ^2S) + H \rightarrow B(2s^22p\ ^2P^o) + H$ (дублет 249.677, 249.772 нм) и $B(2s2p^2\ ^2D) + H \rightarrow B(2s^22p\ ^2P^o) + H$ (триплет 208.889, 208.956 и 208.957 нм), без учёта тонкой структуры не превышают величины 10^{-29} см³/с, тогда как с учётом тонкой структуры имеют величины 1.03×10^{-13} , 3.52×10^{-12} (дублет 249.677, 249.772 нм), 8.0×10^{-18} , 2.06×10^{-16} , 1.62×10^{-16} (триплет 208.889, 208.956, 208.957 нм) см³/с соответственно.

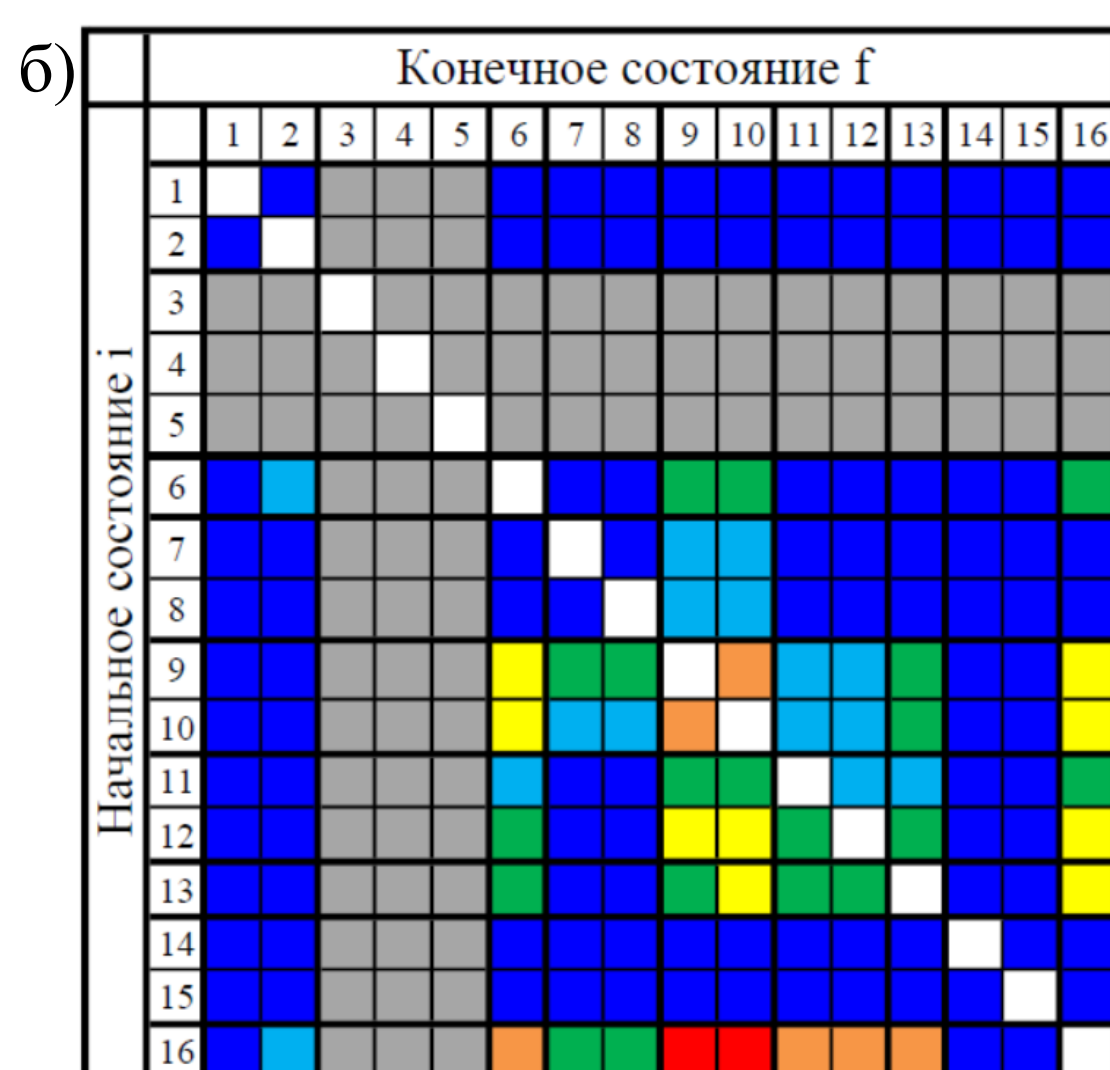


Рисунок 1. Графическое представление констант скорости неупругих процессов для столкновительной системы BH при температуре $T = 6000$ К:

- а) без учёта тонкой структуры энергетических уровней;
б) с учётом тонкой структуры энергетических уровней.

$BH^+(^2\Sigma^+)$

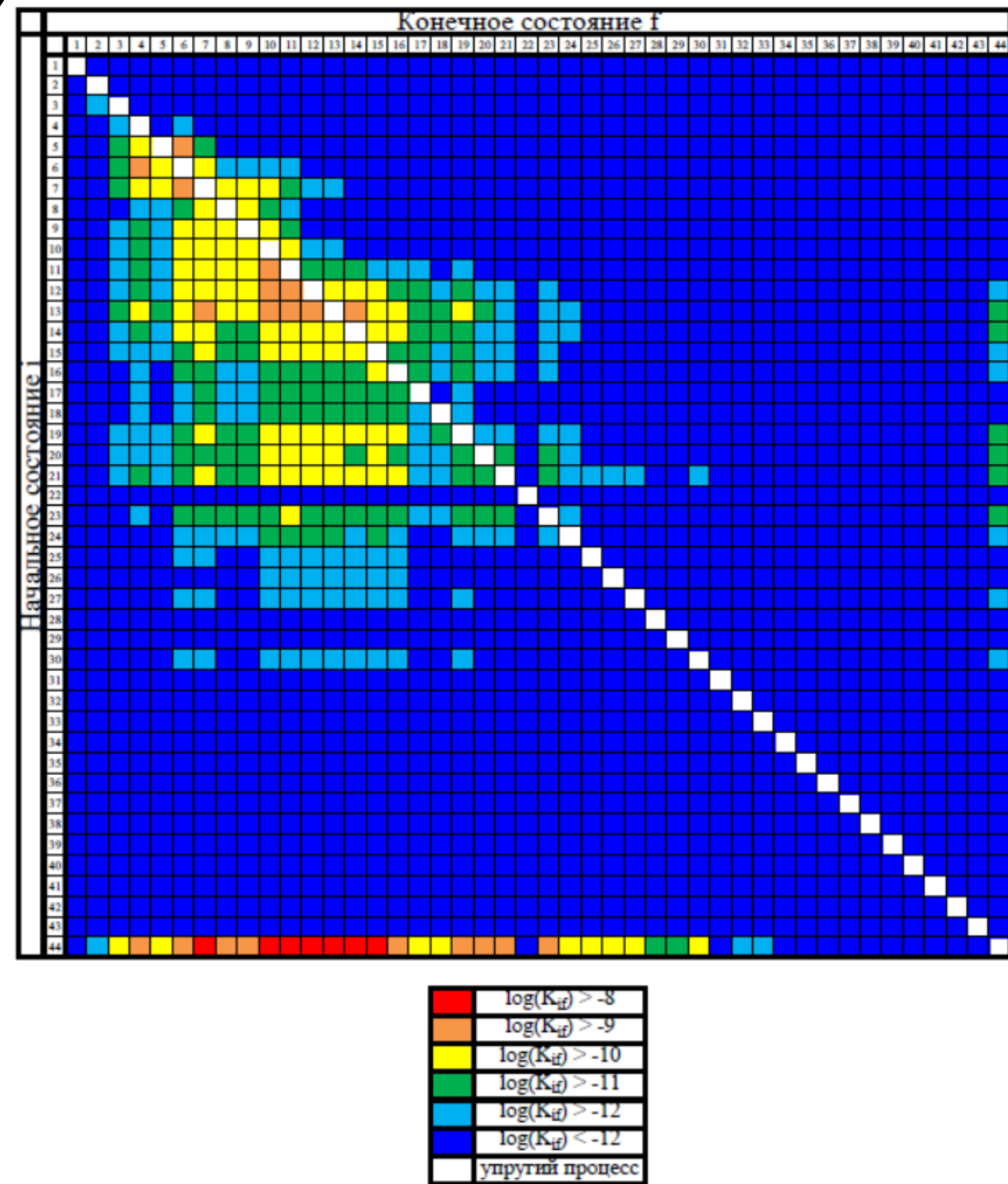


Рисунок 2. Графическое представление констант скорости неупругих процессов для столкновительной системы BH^+ при температуре $T = 6000$ К без учёта тонкой структуры энергетических уровней.

При температуре $T = 6000$ К наибольшие константы скорости ($>10^{-8}$ см³/с) соответствуют процессам нейтрализации в состояния $B^+(2s3s\ ^1S) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s3d\ ^3D) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s3d\ ^1D) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s4s\ ^3S) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s3s\ ^1S) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s4p\ ^1P^o) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s4p\ ^3P^o) + H(1s\ ^2S)$, $B^+(2s4d\ ^3D) + H(1s\ ^2S)$, с величинами в диапазоне $(1.19-2.94) \times 10^{-8}$ см³/с. Величина константы скорости процесса $B^+(2s2p\ ^1P^o) + H(1s\ ^2S) \rightarrow B^+(2s^2\ ^1S) + H(1s\ ^2S)$ (резонансная линия 136.246 нм), равна 5.01×10^{-16} см³/с.

Ссылки:

- [1] S. A. Yakovleva, Ya. V. Voronov, A. K. Belyaev. *Astronomy & Astrophysics*, 593, A27, 2016.
[2] Я. В. Воронов, А. К. Беляев. *Письма в астрономический журнал*, 48, № 3, с. 194-201, 2022.
[3] Ya. V. Voronov, S. A. Yakovleva, A. K. Belyaev. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 520, 1, p. 107–112, 2023.