

# Исследование процессов взаимной нейтрализации в столкновениях катионов магния с анионами водорода

Рыбась А. А., Яковлева С. А., Воронов Я. В., Беляев А. К.

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

Настоящее исследование посвящено расчету сечений процессов взаимной нейтрализации однозарядных катионов магния с анионами водорода  $Mg^+ + H^-$  и  $Mg^+ + D^-$  в рамках стандартного адиабатического подхода Борна-Оппенгеймера, а также вычислению констант скоростей соответствующих процессов. Молекулярные адиабатические потенциальные энергии столкновительной квазимолекулы  $MgH$  были рассчитаны в работе [1], точным квантово-химическим методом из первых принципов MRCI (Multi Reference Configuration Interaction). Ядерная динамика была исследована методом ветвящихся токов вероятности; вероятности неадиабатического перехода при однократном прохождении области неадиабатичности вычислены по модели Ландау-Зинера. Сечения взаимной нейтрализации рассчитаны в интервале энергий 0.001-100 эВ. Константы скорости для процессов взаимной нейтрализации катионов магния с анионами водорода рассчитаны в интервале температур 1 000-10 000 К.

## Теория

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

$$p_{j \rightarrow k}^{LZ} = \exp \left\{ -\frac{\xi^{LZ}}{v} \right\};$$

где  $v$  — скорость радиального движения в центре области неадиабатичности,  $\xi^{LZ}$  — параметр Ландау-Зинера:

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

где  $Z$  — энергетическое расщепление в центре области неадиабатичности  $R_c$ ,  $Z''$  — вторая производная от расщепления.

Ядерная динамика исследована методом ветвящихся токов вероятности.

Сечение:

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

Константа скорости:

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

## Электронная структура

№	Каналы реакции	Асимптотическая энергия (NIST), а.е.	Асимптотическая энергия, а.е.	Молекулярные симметрии	Статистический вес для $^2\Sigma^+$
1	$Mg(3s^2 \ ^1S) + H(1s \ ^2S)$	0	0	$^2\Sigma^+$	1,000
2	$Mg(3s3p \ ^3P) + H(1s \ ^2S)$	0,0997	0,0996	$2,4\Sigma^+; 2,4\Pi$	0,111
3	$Mg(3s3p \ ^1P) + H(1s \ ^2S)$	0,1597	0,1597	$^2\Sigma^+; 2\Pi$	0,333
4	$Mg(3s4s \ ^3S) + H(1s \ ^2S)$	0,1877	0,1877	$2,4\Sigma^+$	0,333
5	$Mg(3s4s \ ^1S) + H(1s \ ^2S)$	0,1982	0,1982	$^2\Sigma^+$	1,000
6	$Mg(3s3d \ ^1D) + H(1s \ ^2S)$	0,2114	0,2114	$^2\Sigma^+; 2\Pi; 2\Delta$	0,200
7	$Mg(3s4p \ ^3P) + H(1s \ ^2S)$	0,2178	0,2180	$2,4\Sigma^+; 2,4\Pi$	0,111
8	$Mg(3s3d \ ^3D) + H(1s \ ^2S)$	0,2185	0,2185	$2,4\Sigma^+; 2,4\Pi; 2,4\Delta$	0,067
9	$Mg(3s4p \ ^1P) + H(1s \ ^2S)$	0,2248	0,2247	$^2\Sigma^+; 2\Pi$	0,333
10	$Mg(3s5s \ ^3S) + H(1s \ ^2S)$	0,2363	0,2364	$2,4\Sigma^+$	0,667
11	$Mg(3s5s \ ^1S) + H(1s \ ^2S)$	0,2394	0,2395	$^2\Sigma^+$	1,000
Ион.	$Mg^+(3s \ ^2S) + H^-(1s^2 \ ^1S)$	0,2534	0,2533	$^2\Sigma^+$	1,000

Таблица 1. Каналы реакции для системы  $MgH$ ; асимптотические энергии из NIST [2] и работы [1]; молекулярные симметрии; статистические веса для  $^2\Sigma^+$ .

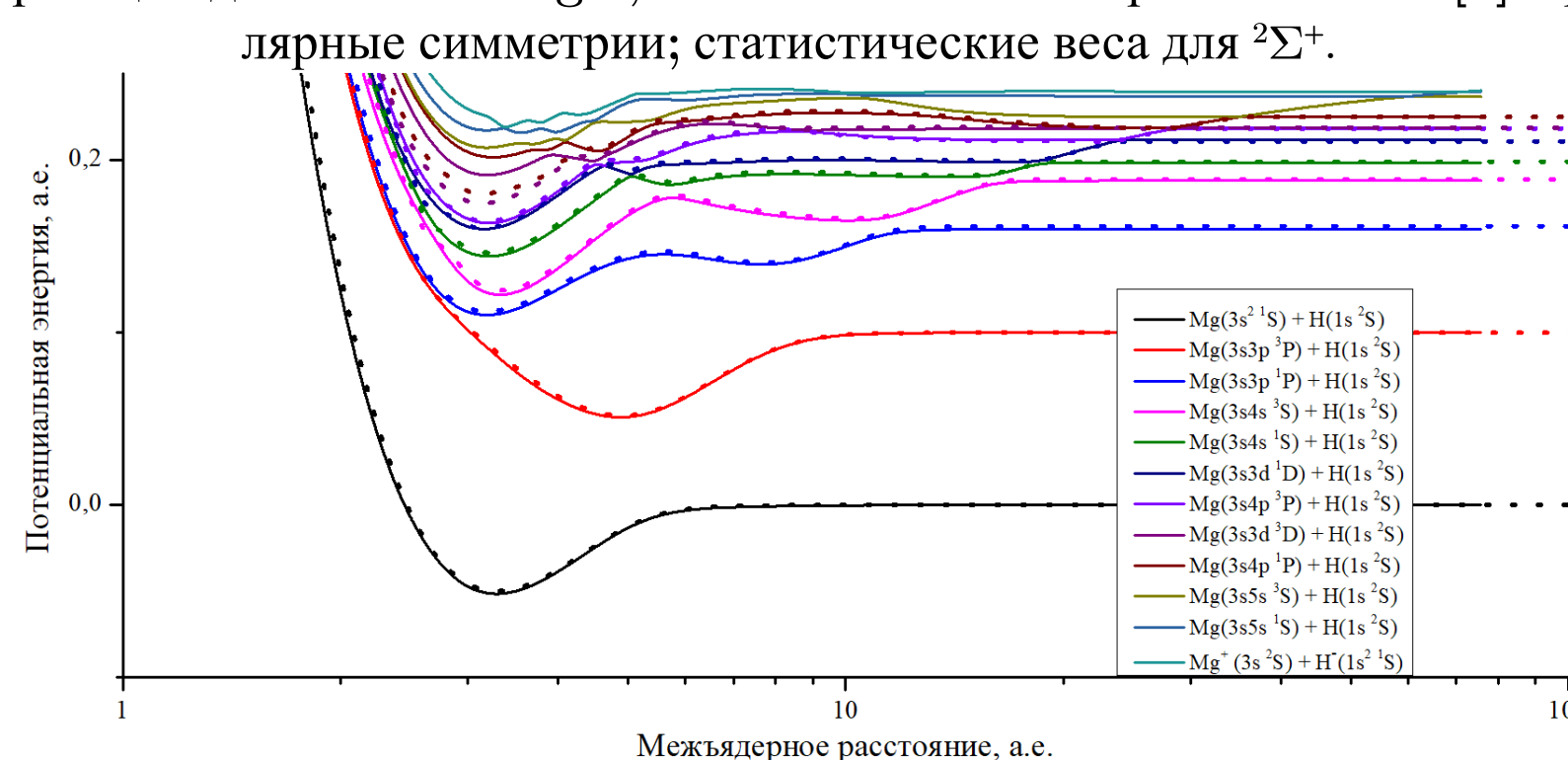


Рисунок 1. Адиабатические потенциальные энергии квазимолекулы  $MgH$ , полученные посредством точных квантово-химических расчетов [1], в зависимости от межъядерного расстояния.

## Результаты

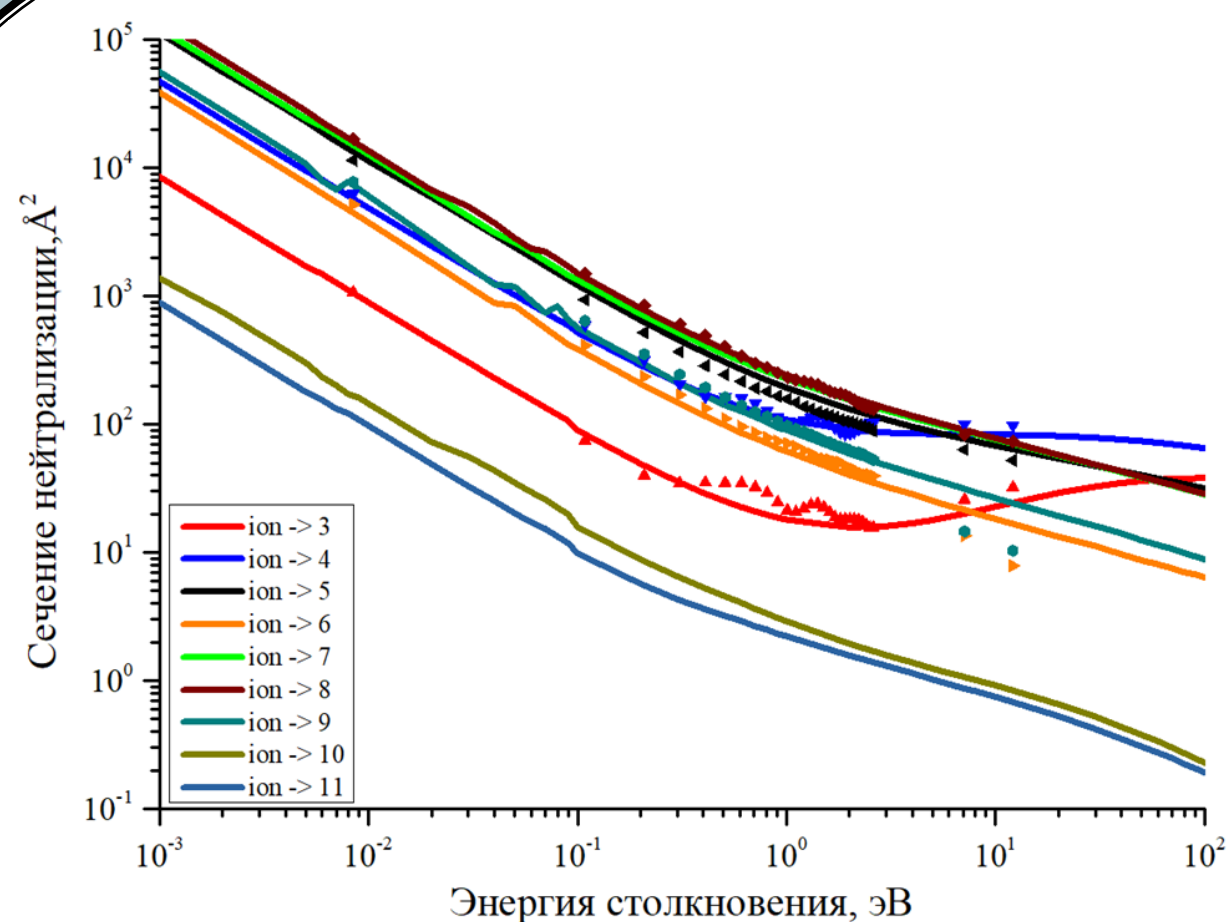


Рисунок 2. Сечения взаимной нейтрализации для системы  $MgH$  в сравнении с данными полученными в работе [3].

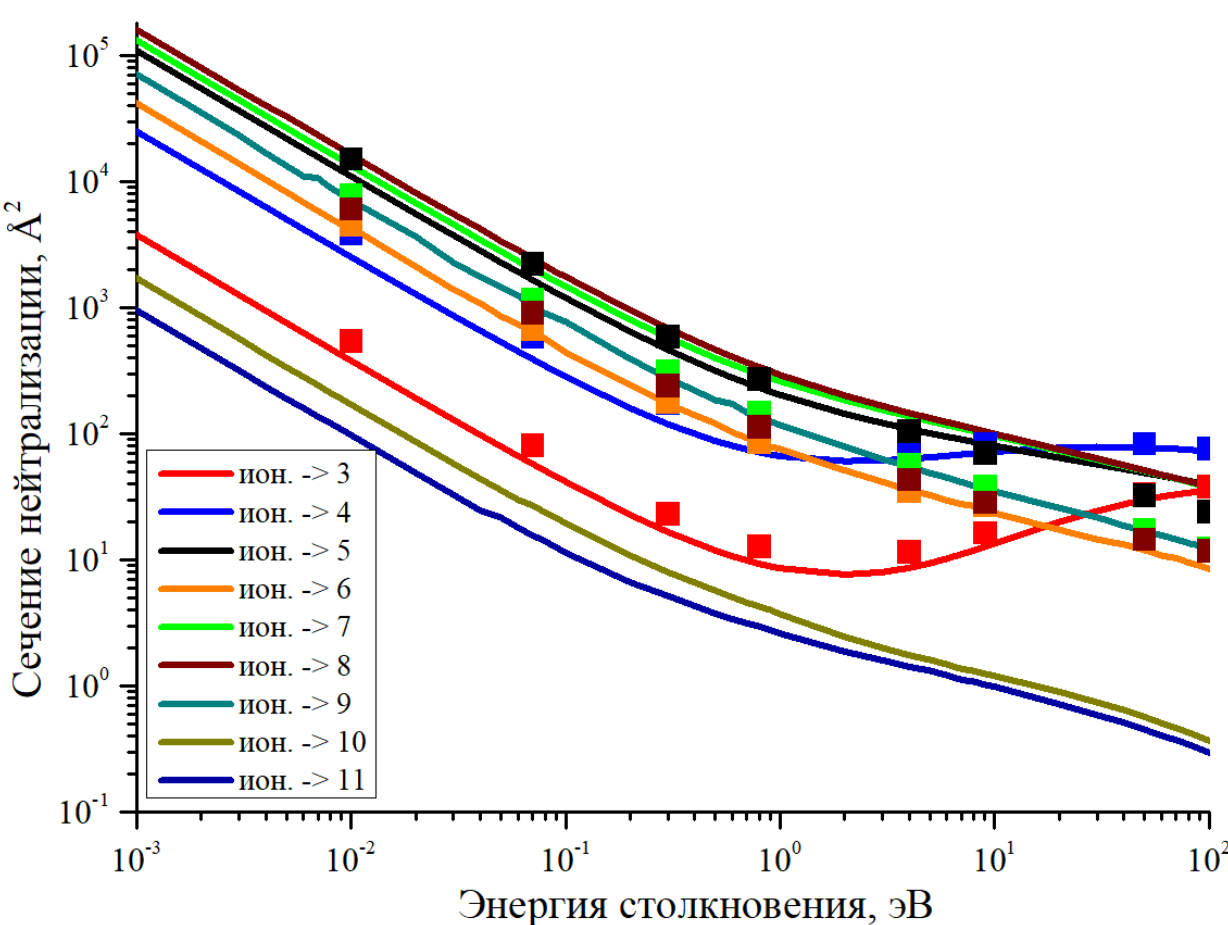


Рисунок 3. Сечения взаимной нейтрализации для системы  $MgD$  в сравнении с данными полученными в работе [5].

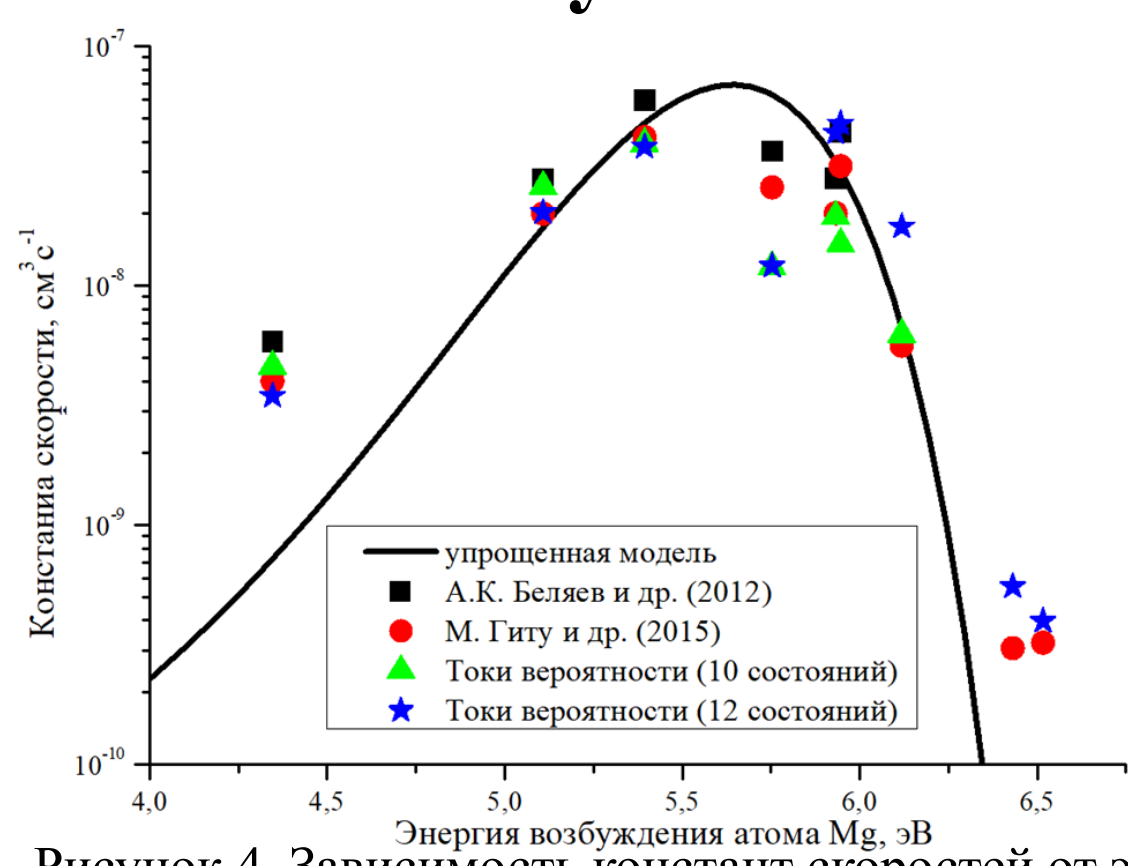


Рисунок 4. Зависимость констант скоростей от энергии возбуждения атома магния в сравнении с константами, полученными другими методами расчета ядерной динамики в работах [4], [3], [5] соотв.

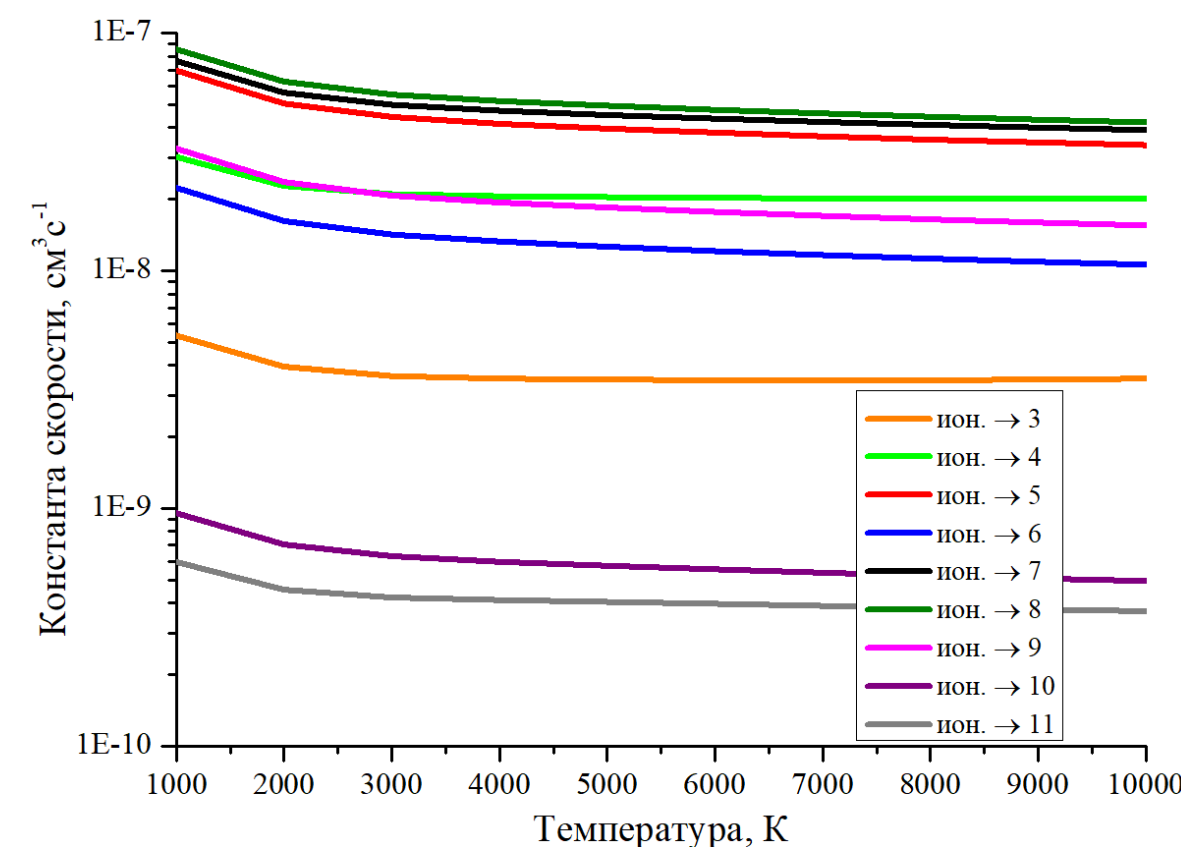
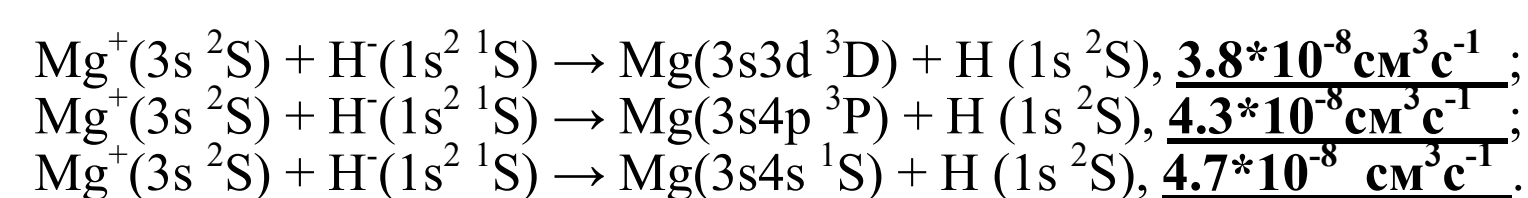
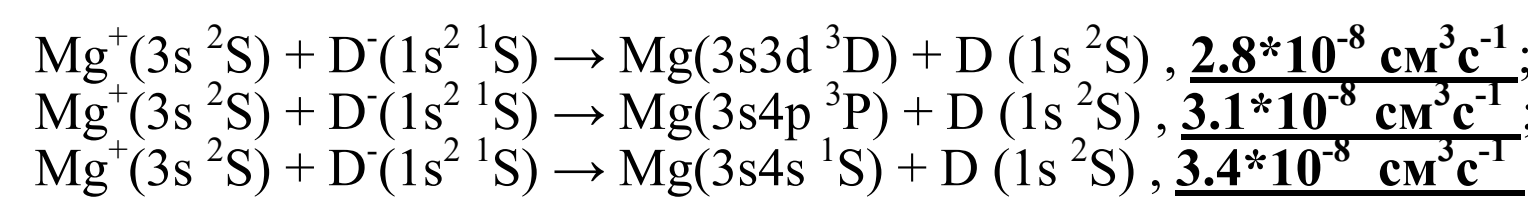


Рисунок 5. Температурная зависимость констант скоростей неупругого процесса взаимной нейтрализации системы  $MgH$ .

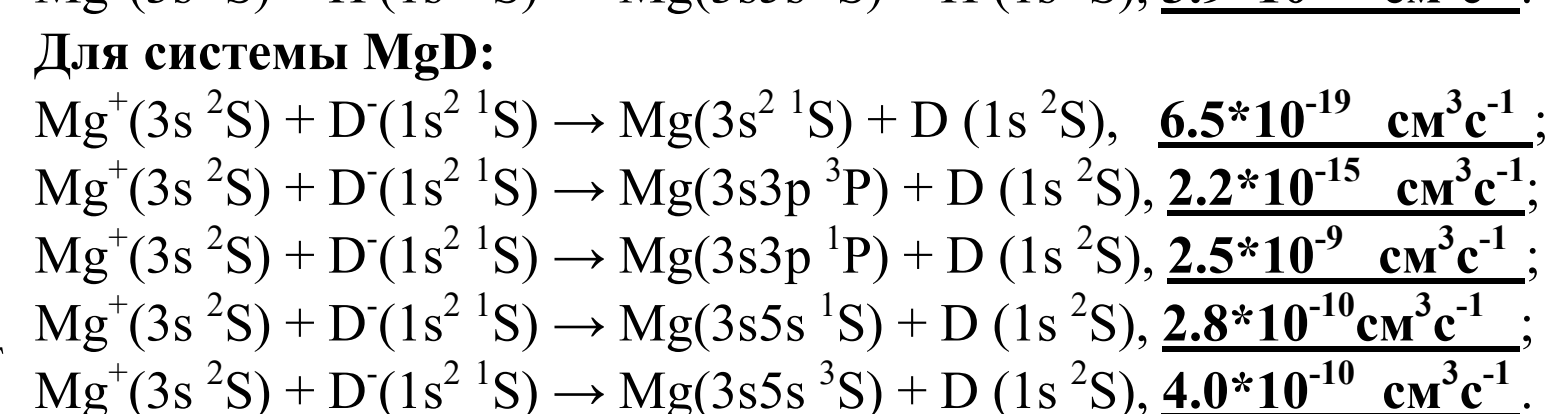
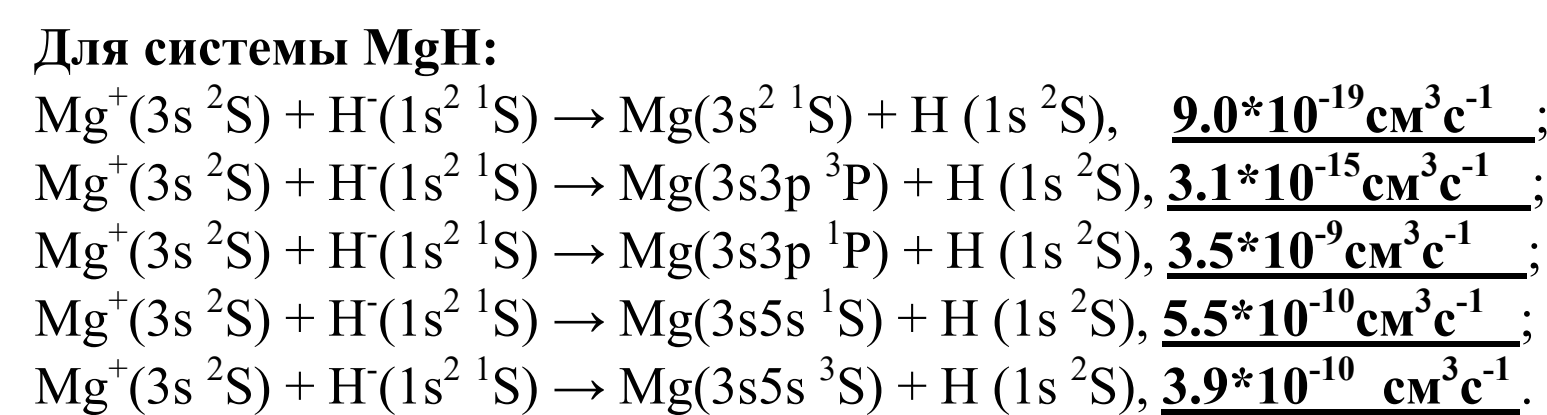
Исходя из полученных результатов исследования, можно сделать вывод, что наибольшие константы скоростей (при температуре 6 000 К) для системы  $MgH$  соответствуют процессам:



А для системы  $MgD$  наибольшие константы скоростей получены для следующих реакций взаимной нейтрализации:



Константы скоростей этих процессов получены при энергии столкновения от 0.001 эВ до 100 эВ. Самые маленькие значения констант скоростей (при температуре 6 000 К) процесса взаимной нейтрализации для реакций:



## Ссылки:

- [1] Mitrushchenkov A.O. et al. Private communication.
- [2] Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J. and NIST ASD Team (2023). *NIST Atomic Spectra Database* // DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
- [3] Guitou M., Spielfiedel A., Rodionov D. S., Yakovleva S. A., Belyaev A. K., Merle T., Thevenin F., Feautrier N. // *Chemical Physics* — 2015. — Vol. 462. — P. 94-103. DOI: 10.1016/j.chemphys.2015.06.003.
- [4] Belyaev A. K., Barklem P. S., Spielfiedel A., Guitou M., Feautrier N., Rodionov D. S., Vlasov D. V. // *Physical Review A* — 2012. — Vol. 85, №3. — Art. 032704. DOI: 10.1103/PhysRevA.85.032704.
- [5] Ya. V. Voronov et al. Private communication.