

ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВЫХ ПОДХОДОВ В ИССЛЕДОВАНИЯХ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АТМОСФЕР ЗВЕЗД

Илья Степанов

Яковлев М.Ю.

Воронов Я.В.

Беляев А.К.

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена

В данной работе оценивается точность модельных методов расчета констант скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов различных химических элементов с водородом. В качестве эталона рассматривается решение стационарного уравнения Шрёдингера в рамках метода сильной связи, т.е. решение системы связанных дифференциальных уравнений для ядерных радиальных волновых функций. Проведен ряд численных экспериментов по определению точности модельных подходов, таких как модель Ландау-Зинера, аналитическая многоканальная формула, метод прыгающих токов вероятности. Также проведено сравнение с точным квантовым подходом - методом волновых пакетов (решение временного уравнения Шрёдингера). Для достижения поставленных целей используются модели нескольких (минимум двух) областей неадиабатичности с вариацией указанных областей и параметров неадиабатичности в них.

Определение вероятности по формуле Ландау-Зинера:

$$P = \exp\left(-\frac{\xi LZ}{v}\right) \quad (1)$$

Определение вероятности при использовании метода волновых пакетов:

$$P = \int_0^\infty j(\tilde{x}, t) \quad (2)$$

$$j(\tilde{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}\left(\Psi^*(x, t) \frac{\delta\Psi(x, t)}{\delta x}\right) \Big|_{x=\tilde{x}} \quad (3)$$

Определение вероятности при решении системы связанных дифференциальных уравнений:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V_{jj}(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} - E^{tot}\right) F_j^{di}(R) = \sum_{j \neq k} V_{jk} F_k^{di}(R) \quad (4)$$

$$P_{j,k} = |S_{j,k}|^2 \quad (5)$$

