

Исследования неупругих процессов при столкновениях катионов лития с анионами изотопов водорода

Максим Юрьевич Яковлев, Ярослав Владимирович Воронов, Андрей Константинович Беляев,
Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург.

В данной работе представлены результаты исследования неупругих процессов, происходящих при столкновениях положительных ионов лития с отрицательными ионами водорода и дейтерия. Рассчитаны значения вероятностей и сечений неупругих процессов **точным квантовым методом – методом волновых пакетов** – с учётом 8 адиабатических потенциалов (7 ковалентных и 1 ионного) и недиагональных матричных элементов неадиабатической связи, полученных методами квантовой химии [1]. Проведён анализ и сравнение полученных сечений для процессов взаимной нейтрализации при столкновениях катионов лития с анионами дейтерия: с экспериментальными данными [2,3]; с результатами точных квантовых расчётов в рамках стационарного подхода [1]; с результатами модельных расчётов [4]. Проанализированы полученные результаты для столкновений катионов лития с анионами водорода, проведено сравнение с данными, полученными с помощью теоретических методов [4].

Метод волновых пакетов заключается в решении нестационарного уравнения Шрёдингера в рамках подхода Борна-Оппенгеймера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{R}, \vec{r}) = \hat{H} \psi(\vec{R}, \vec{r})$$

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{T}_N$$

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{j, M_j} Y_{j, M_j}(\theta, \varphi) \sum_j \frac{F_j(R, t)}{R} \varphi_j^{di}(\vec{r}, R)$$

Подстановка и преобразования приводят к системе уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} F_k(R, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} + H_{kk} \right) F_k(R, t) + \sum_{j \neq k} F_j(R, t) H_{kj}$$

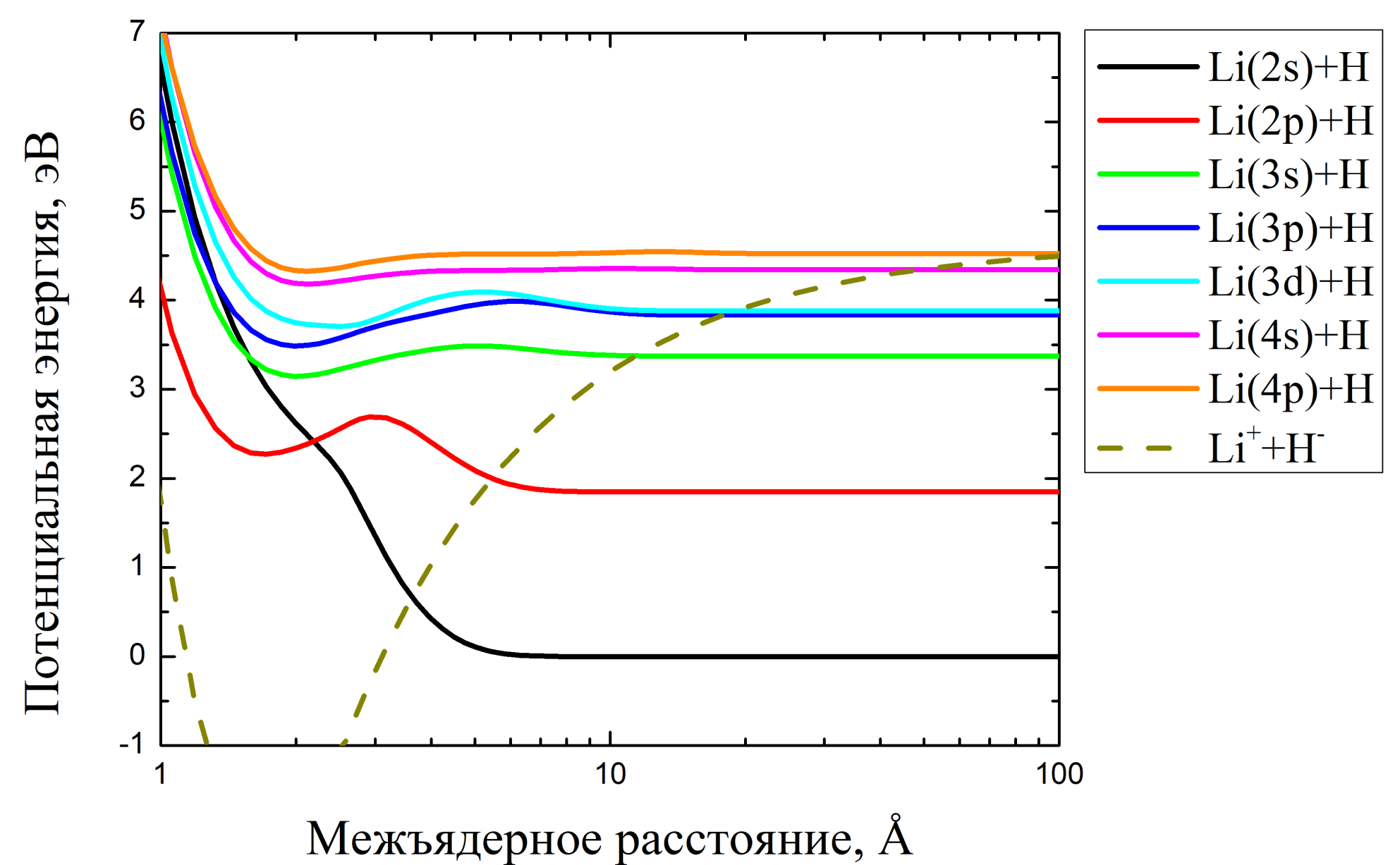
Решение системы уравнений записано с помощью матричной экспоненты:

$$\underline{F}(R, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) \underline{F}(R, t)$$

Ядерная волновая функция во входном канале в начальный момент времени задаётся волновым пакетом:

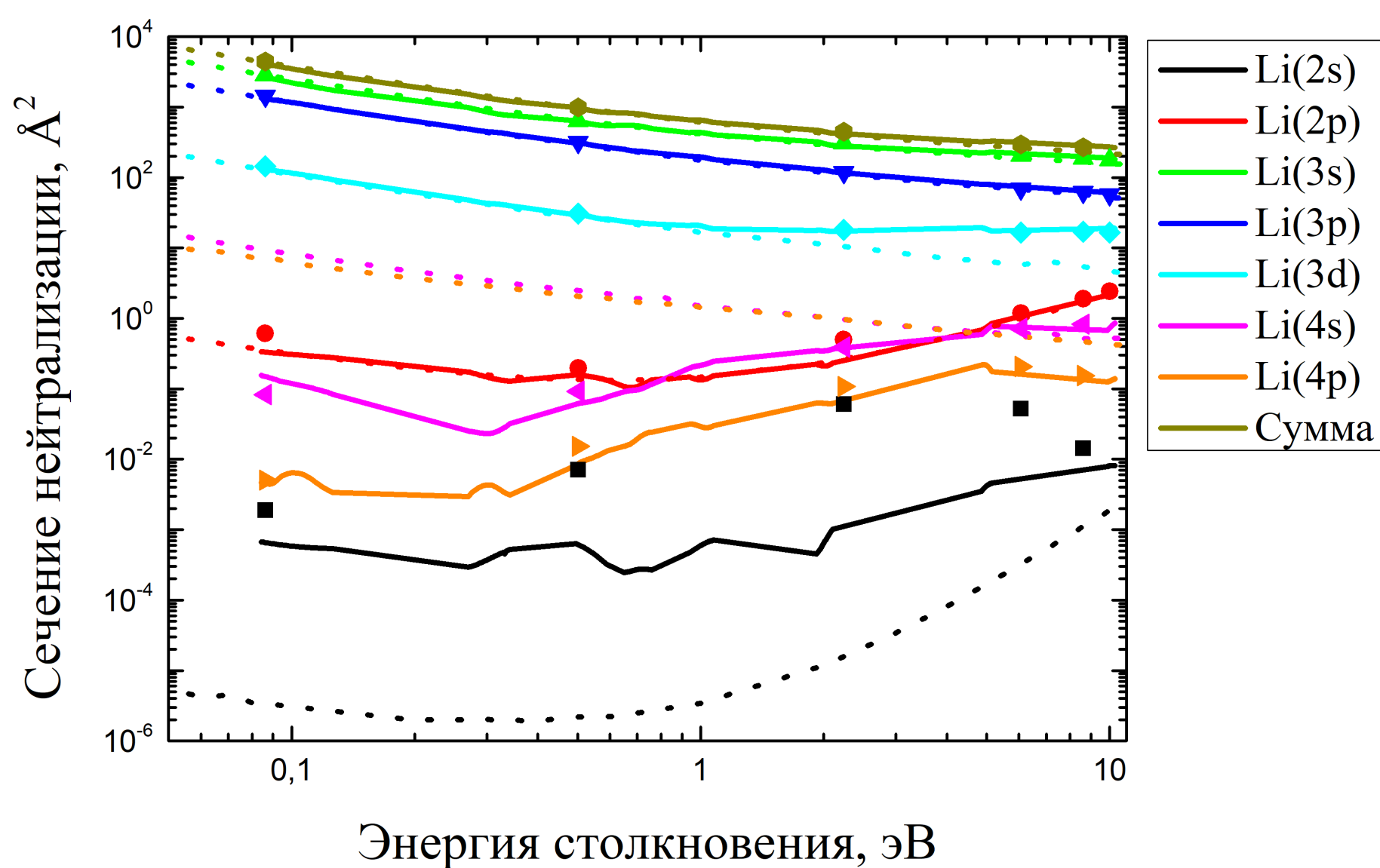
$$F_n(R, t) \Big|_{t=0} = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{R-R_0}{a}\right)^2 + ik_{0n} R\right)$$

Потенциальные энергии квазимолекулы LiH



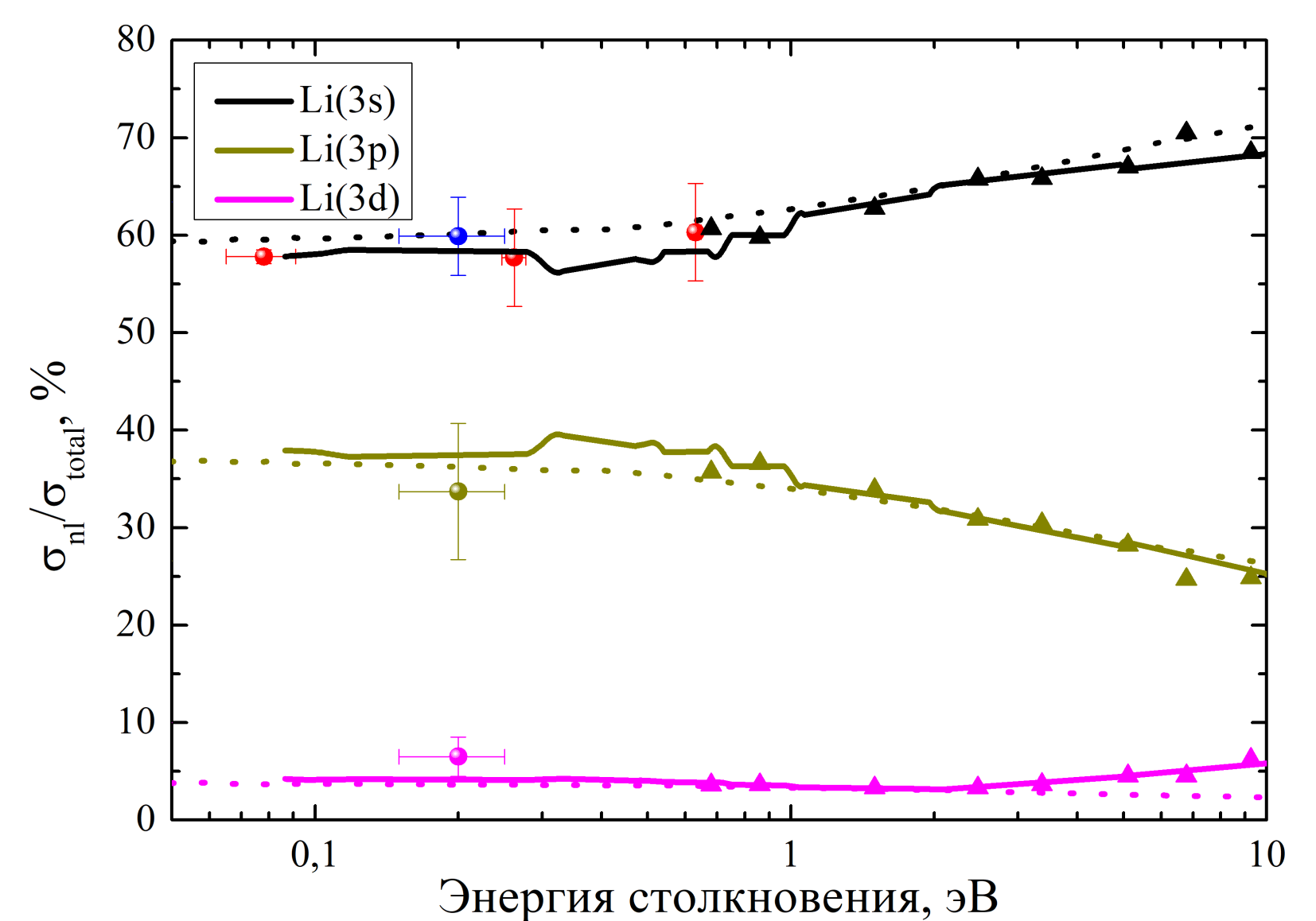
- Диабатические потенциальные энергии квазимолекулы LiH, рассчитанные точными методами квантовой химии из первых принципов [1].

Li⁺ + H⁻ → Li + H



- Сплошные линии — квантовые расчёты методом волновых пакетов
- Пунктирные линии — модельные расчёты методом токов вероятности [4]
- Символы — квантовые расчёты в рамках стационарного подхода

Li⁺ + D⁻ → Li + D



- Сплошные линии — квантовые расчёты методом волновых пакетов
- Пунктирные линии — модельные расчёты методом токов вероятности [4]
- Треугольники — квантовые расчёты в рамках стационарного подхода [1]
- Шары — экспериментальные данные: красные [2], синие, розовые и тёмно-жёлтые [3]

- 1) Croft H., Dickinson A. S., Gadea F. X. //Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 1999. – Т. 32. – №. 1. – С. 81.
- 2) Eklund G. et al. //Physical Review A. – 2020. – Т. 102. – №. 1. – С. 012823.
- 3) Launoy T. et al. //The Astrophysical Journal. – 2019. – Т. 883. – №. 1. – С. 85.
- 4) A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov // Physical Review A. – 2021. – Т. 104. – №. 2. – С. 022812.