

Тема: Исследование процессов неупругих СТОЛКНОВЕНИЙ

Научный руководитель: Беляев Андрей Константинович
Выполнила: Айкашева Юлия

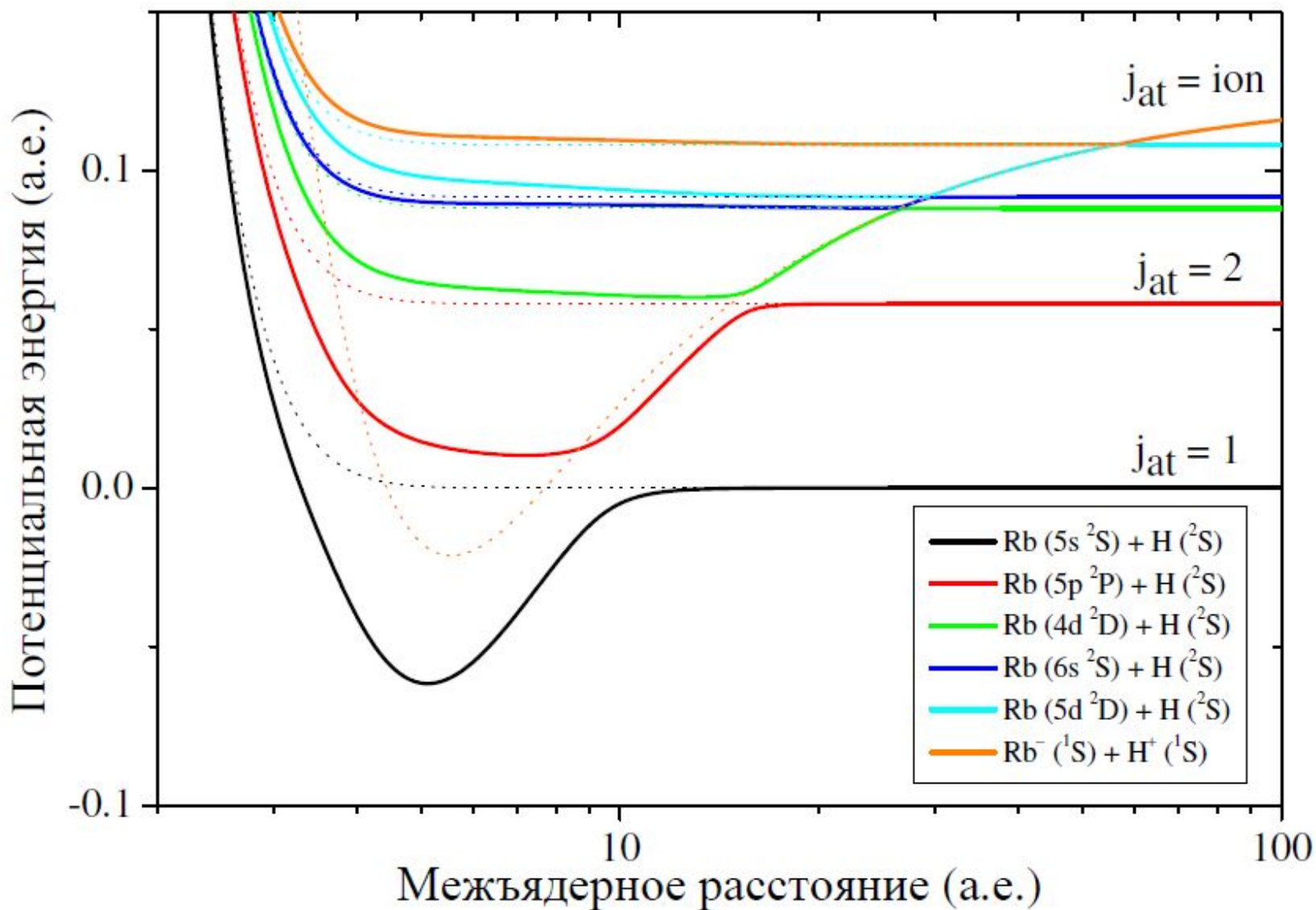
1 этап подхода Борна-Оппенгеймера

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

$$\hat{H}_e = \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \Delta_{\vec{r}_i} - \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{|\vec{R}_k - \vec{r}_i|} + \sum_{i,k} \frac{Z_i Z_k e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_k|} + \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}.$$

$$\hat{H}_e \psi_{j\Lambda}(\vec{r}, \vec{R}) = U_{j\Lambda}(R) \psi_{j\Lambda}(\vec{r}, \vec{R})$$

Электронная структура молекулы RbH



2 этап подхода Борна-Оппенгеймера

$$P_{if} = |a_f|^2$$

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

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

[1]

- [1] *Ab initio* cross section for low-energy inelastic Na+H collisions / A. Belyaev, J. Grosser, J. Hahne et al. // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 1999. Vol. 60, no. 3. P. 2151-2158.

Многоканальная модель Ландау-Зинера

$$p_{jk}^{LZ} = \exp(-\xi_{jk}/v)$$

$$\xi_{jk} = \frac{\pi}{2\hbar} \sqrt{\frac{Z_{jk}^3}{Z_{jk}''}} \Big|_{R=R_c}$$

[2], [3], [4]

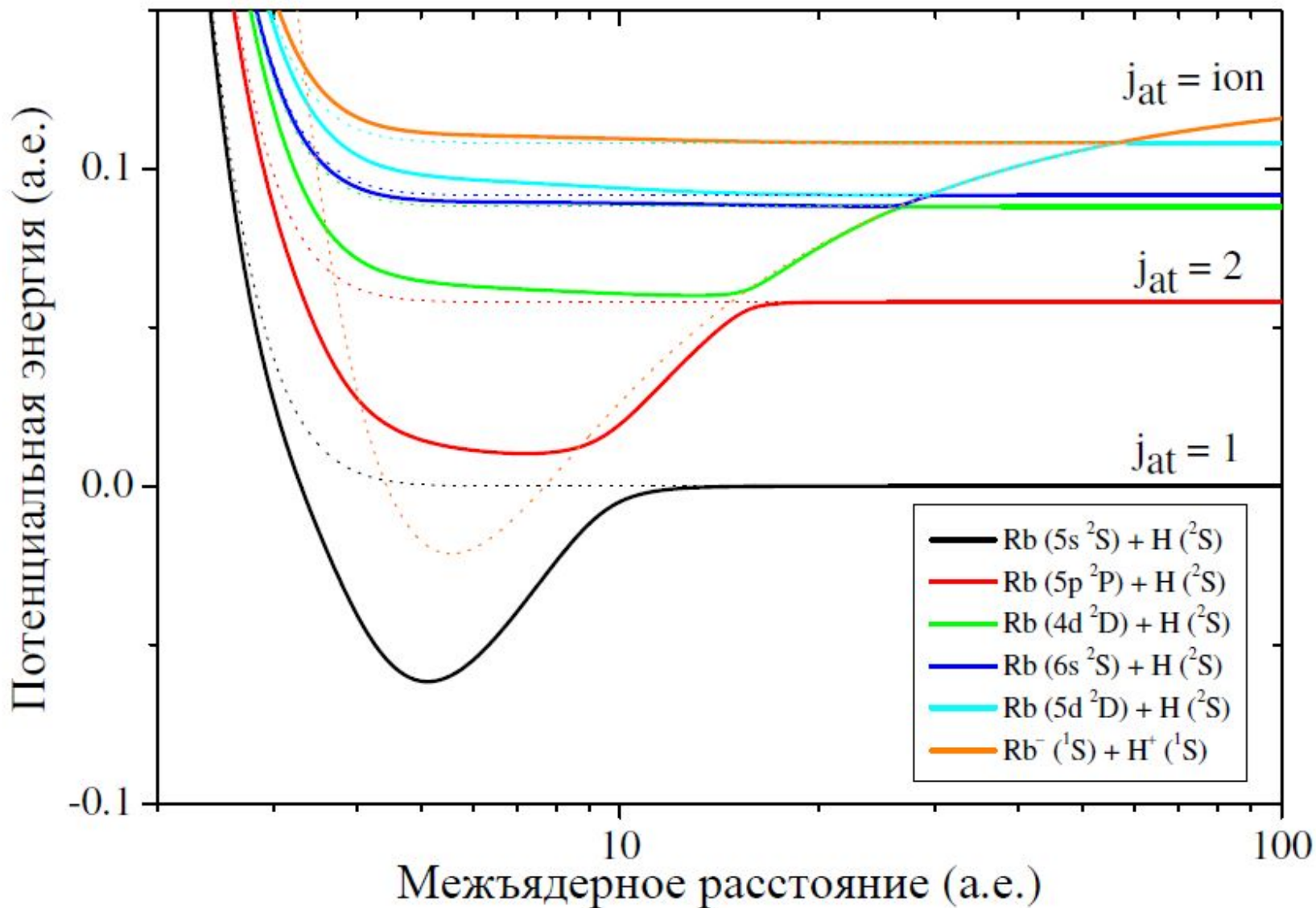
- [2] Belyaev A. Model approach for low-energy inelastic atomic collisions and application to Al + H and Al⁺ + H⁻ // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2013. Vol. 88, no. 5. p. 052704.
- [3] Belyaev A., Lebedev O. Nonadiabatic nuclear dynamics of atomic collisions based on branching classical trajectories // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2011. Vol. 84, no. 1. p. 014701.
- [4] Яковлева С. А. Модельные подходы в исследованиях неупругих процессов при медленных атомных столкновениях. 2015.

Многоканальная модель Ландау-Зинера

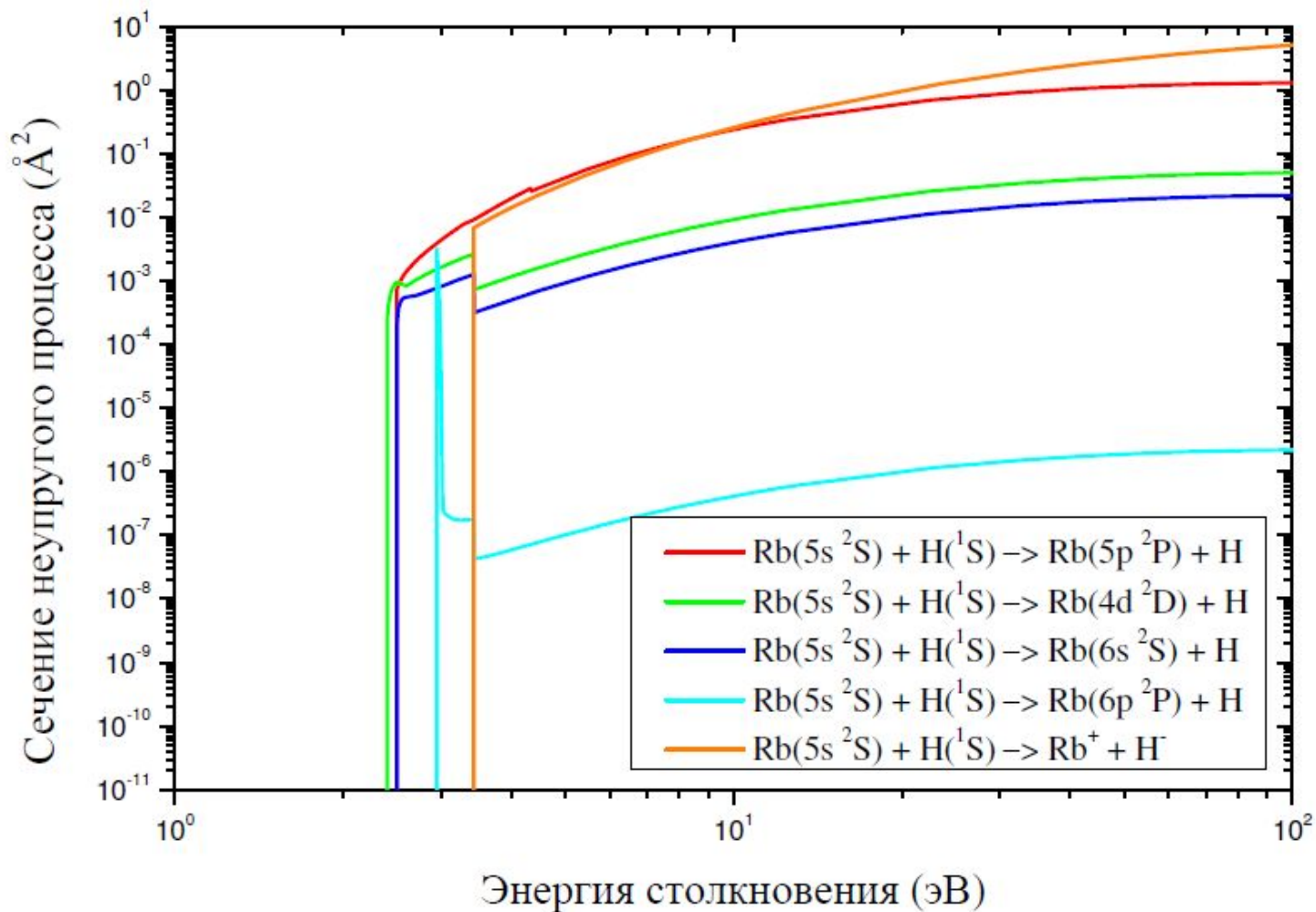
$$P_{if} = 2p_f(1 - p_f) \left\{ \prod_{k=f+1}^F p_k \right\} \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{2(f-1)} \prod_{k=1}^m \left(-p_{f-\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \right) \right\} \quad [4]$$

- [4] Яковлева С. А. Модельные подходы в исследованиях неупругих процессов при медленных атомных столкновениях. 2015.

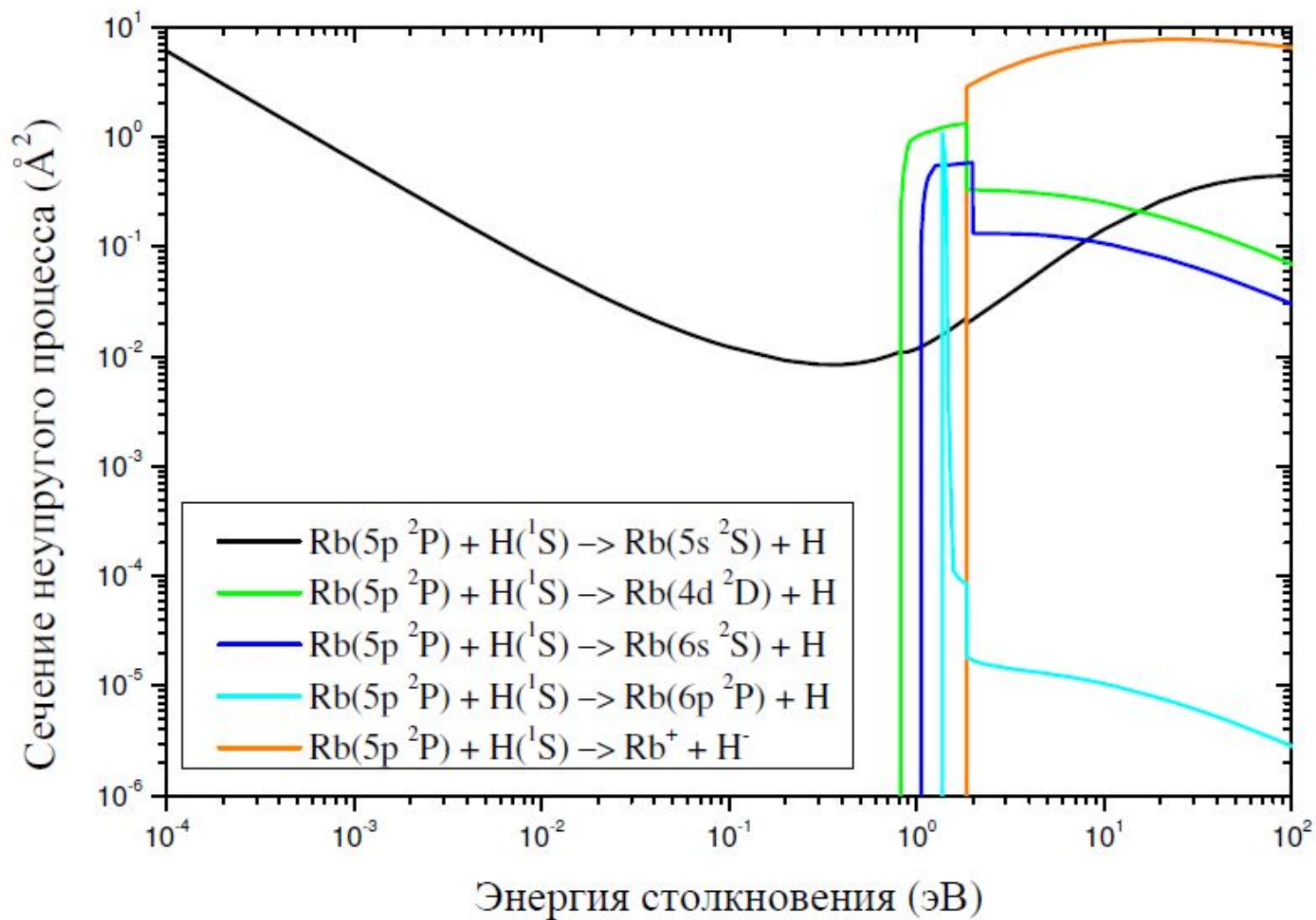
Электронная структура молекулы RbH



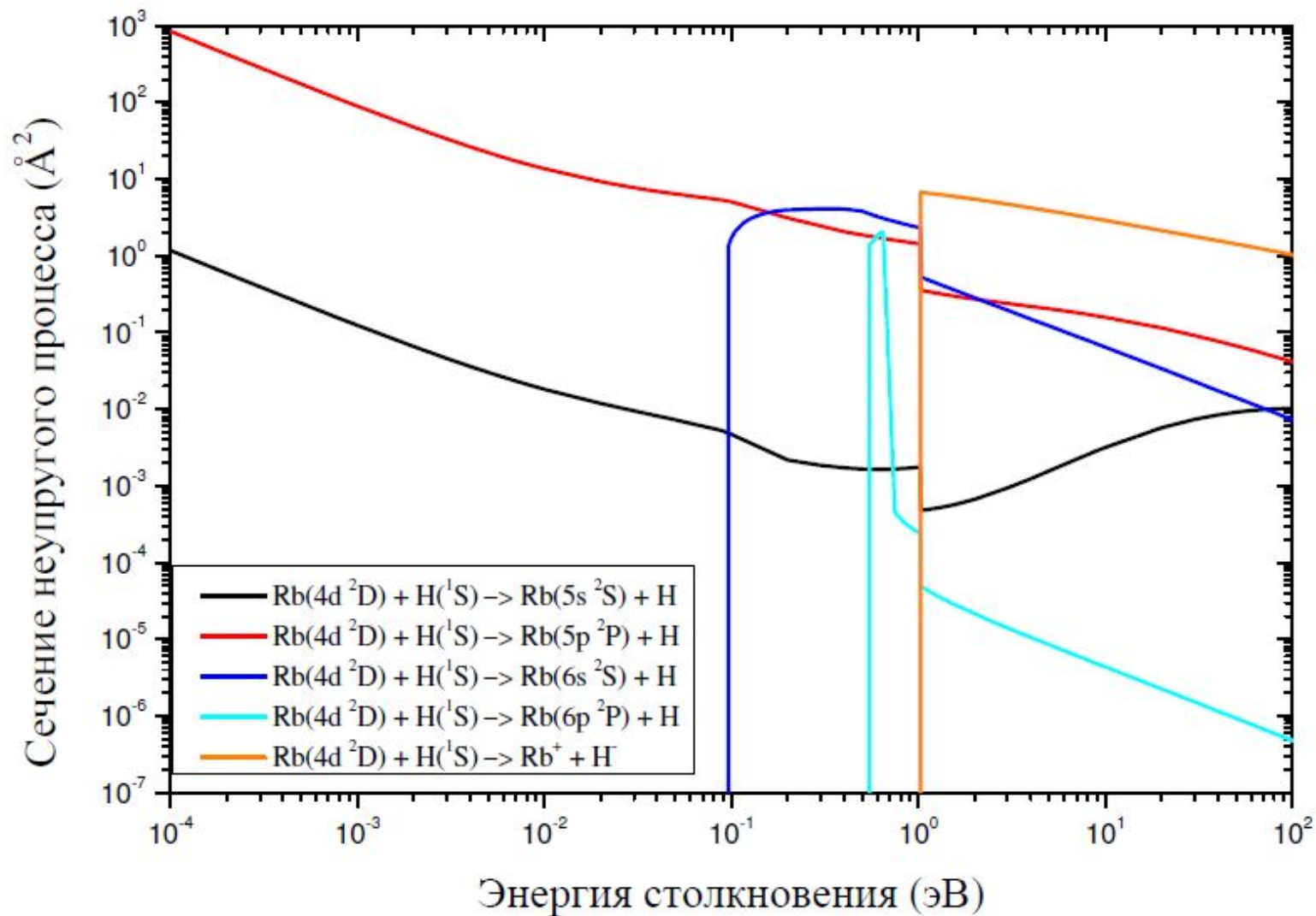
Сечение неупругих процессов из входного канала: $\text{Rb}(4p^6 5s^2 S) + \text{H}(1s^2 S)$



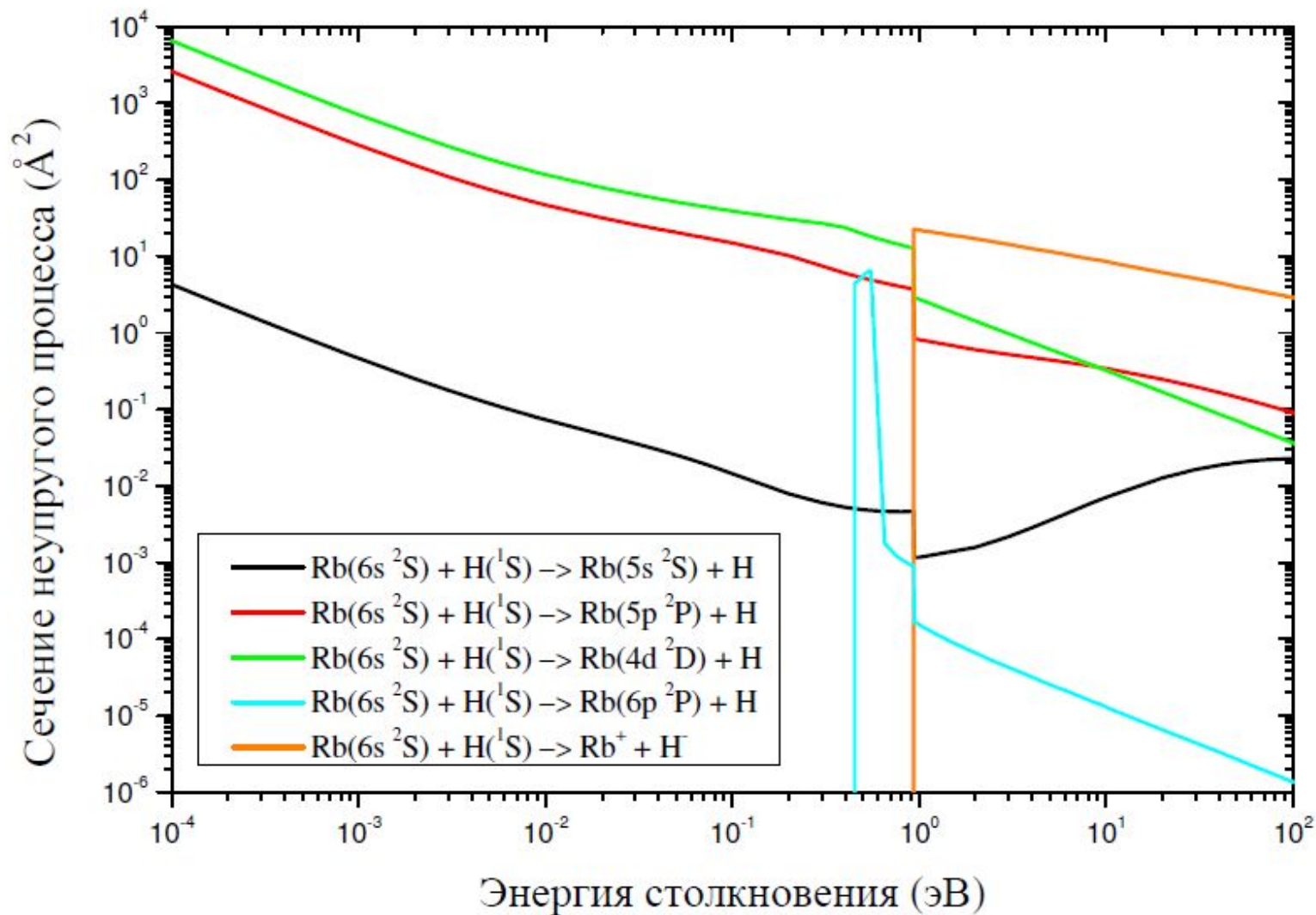
Сечение неупругих процессов из входного канала: $\text{Rb}(4p^6 5p^2 P) + \text{H}(1s^2 S)$



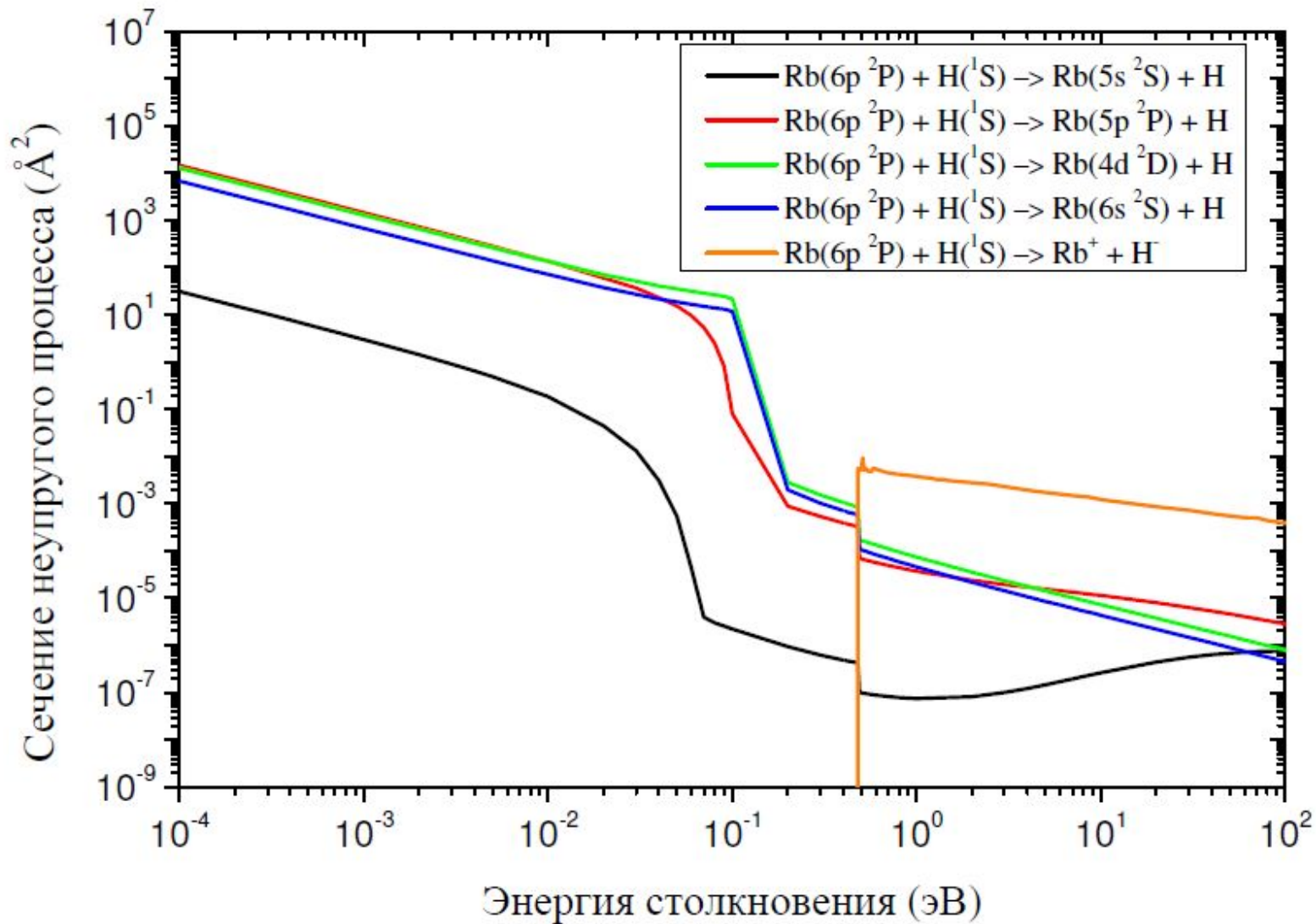
Сечение неупругих процессов из входного канала: $\text{Rb}(4p^6 5d^2 D) + \text{H}(1s^2 S)$



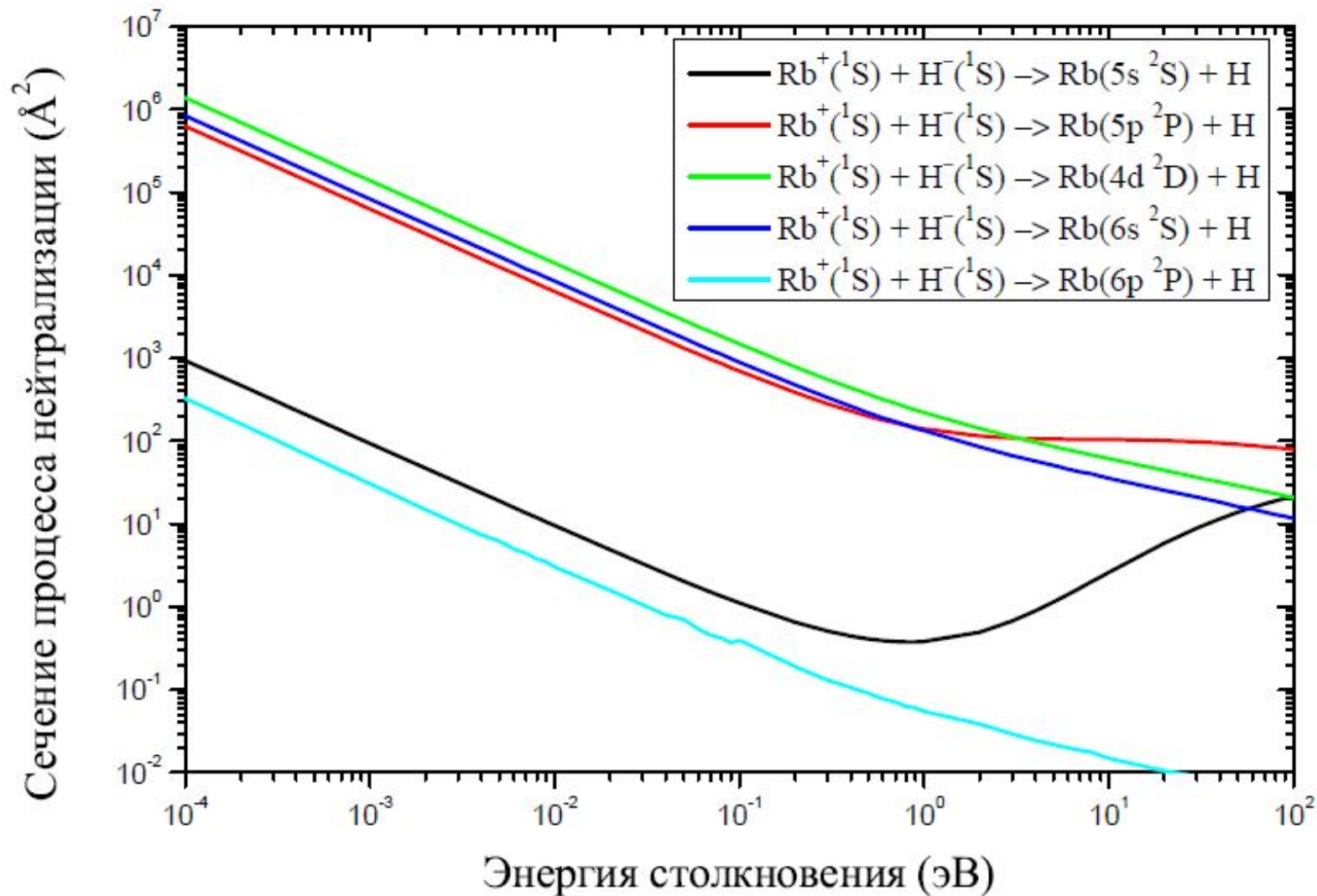
Сечение неупругих процессов из входного канала: $\text{Rb}(4p^6 6s^2 S) + \text{H}(1s^2 S)$



Сечения неупругих процессов из входного канала: $\text{Rb}(4p^6 6p^2 P) + \text{H}(1s^2 S)$



Сечение процессов взаимной нейтрализации



Константы скоростей при температуре $T = 6000\text{K}$

	$5s^2S$	$5p^2P$	$4d^2D$	$6s^2S$	$6p^2P$	$Rb^+ + H^-$
$5s^2S$	0.00E+00	3.26E-14	7.86E-16	3.57E-16	2.10E-17	6.05E-16
$5p^2P$	1.06E-12	0.00E+00	2.73E-11	1.18E-11	9.88E-13	9.74E-12
$4d^2D$	1.66E-13	1.77E-10	0.00E+00	2.53E-10	2.21E-11	1.20E-10
$6s^2S$	4.99E-13	5.07E-10	1.67E-09	0.00E+00	7.79E-11	4.77E-10
$6p^2P$	3.61E-14	5.22E-11	1.80E-10	9.60E-11	0.00E+00	2.40E-13
$Rb^+ + H^-$	5.03E-11	2.49E-08	4.71E-08	2.84E-08	1.16E-11	0.00E+00

