Stars-2025-AtomData001

Исследование неупругих процессов при столкновениях цинка и водорода методом токов вероятностей

Вероника В. Мазаева

veronika.mazaeva2000@mail.ru

Характеристики неупругих процессов столкновений атомов и ионов цинка с атомами и ионами водорода, такие как сечения и константы скоростей, важны для определения свойств газовых и плазменных сред. В работе рассчитаны сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов, с учетом тонкой структуры атомов цинка, методом токов вероятности. В расчетах использовался адиабатический подход Борна-Оппенгеймера, позволяющий разделить электронную и ядерную подсистемы. Работа включает 17 ковалентных и одно ионное состояния квазимолекулы ZnH. Для исследования электронной структуры применен асимптотический подход [1] с учетом тонкой структуры. Для низколежащих состояний использовались данные ab initio расчетов из работы [2]. Применен метод токов вероятности [1] для вычисления вероятностей неупругих процессов. Рассчитаны сечения неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, нейтрализации и образования ионной пары для энергий столкновения от 10^{-3} до 100 эВ, а также константы скоростей для температур от 1000 до 10 000 K. Полученные сечения и константы скоростей неупругих процессов столкновений системы ZnH позволят смоделировать форму спектральной линии в различных плазменных и газовых сред, содержащих эти элементы.

Список литературы:

[1] A. K. Belyaev 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. – Art. 052704.

[2] Zhao Shu-Tao, Liang Gui-Ying, Li Rui, Li Qi-Nan, Zhang Zhi-Guo, Yan Bing Theoretical study on the electronic structure and transition properties of excited state of ZnH molecule // Acta Physica Sinica. – 2017. – Vol. 66. – Art. 063103.