Stars-2025-AtomData006

Теоретические исследования неупругих процессов при атомных столкновениях.

Андрей К. Беляев[1]

[1] Herzen State Pedagogical University of Russia, Russia

andrey.k.belyaev@gmail.com

Элементарные процессы, происходящие на атомном и молекулярном уровне, например, неупругие столкновения атомов, ионов, молекул, а также взаимодействия этих частиц с электромагнитным излучением, в значительной степени определяют свойства газовых и плазменных сред. В свою очередь, характеристик указанных процессов, такие как сечения и константы скорости, позволяют моделировать указанные среды в условиях отклонения от термодинамического равновесия, не-ЛТР, и использовать эти знания в дальнейшем. Ярким примером указанной ситуации является не-ЛТР моделирование атмосфер звезд, что позволяет определять не только химический состав звезды, но и распространенности того или иного химического элемента во Вселенной. Как отмечается в ряде публикаций, см., например, [1], отсутствие знания характеристик констант скоростей для неупругих процессов столкновений того или иного элемента с атомами или ионами водорода вносит основную погрешность в не-ЛТР моделирования атмосфер звезд в силу наибольшей распространенности водорода во Вселенной. Таким образом, расчеты требуемых характеристик неупругих процессов при атомных, ионных, молекулярных столкновениях является важной и актуальной задачей, усложненной необходимостью рассчитывать характеристики для большого числа парциальных процессов, сотни, тысячи, и даже миллионы [1].

Излишне напоминать, что ожидаемые расчеты должны давать физически достоверные характеристики процессов. Эти ожидания привели к тому, что в астрофизике стала интенсивно использоваться так называемая формула Дравина [2,3], которая имеет простую зависимость константы скорости любого процесса от энергий начального и конечного состояний соответствующих атомов или ионов, а также от силы осцилляторов рассматриваемых переходов, не обращая внимания на отличия электронов от атомов и ионов, и ионов от атомов. Для того, чтобы применение формулы Дравина давала бы положительный эффект, было предложено ввести подгоночный фактор, варьирование которого на несколько порядков позволяло получить желаемый результат. Очевидно, что в таком случае не было возможности говорить о точности получаемых результатов. Критический анализ результатов, получаемых с использованием формулы Дравина, а также их сравнение с имеющимися редкими квантовыми данными показало [4], что, во-первых, формула Дравина не имеет физического основания, и во-вторых, она приводит к значениям, завышенным вплоть до 4 порядков величин, для одних парциальных процессов, и в то же время для других парциальных процессов указанная формула приводит к значениям, заниженным вплоть до 4 порядков величин по сравнению с редкими квантовыми данными. В связи с этим очевидно, что формула Дравина не может претендовать на какую-либо разумную точность получаемых чисел.

Разумной альтернативой формуле Дравина являются модели и методы, интенсивно и успешно развиваемые в квантовой химии, а также строгие квантовые подходы. Примерами могут выступать неадиабатические модели Ландау-Зинера [5-7], Демкова [8], Никитина [9], метод Хартри-Фока, подход Борна-Оппенгеймера [10], уравнения Фаддеева для решения проблемы 3-х частиц [11], и так далее. За столетие существования квантовой механики, отмечаемое в этом году, наибольшие применения получили подход Борна-Оппенгеймера, разделивший исследование процессов столкновений на электронную структуру и ядерную динамику, метод Хартри-Фока для расчетов электронных структур, и модель Ландау-Зинера для определения вероятностей неадиабатических переходов. Однако, несмотря на прорывной прогресс квантовой теории рассеяния, подход Борна-Оппенгеймера таит в себе скрытый дефект, связанный с так называемой проблемой молекулярных состояний, а именно с ненулевыми асимптотическими матричными элементами неадиабатических взаимодействий, приводящей, в частности, к бесконечно большим значениям сечений парциальных неупругих процессов. Квантовое решение указанной проблемы было

предложено в виде метода перепроецирования [12-14]. Таким образом, несмотря на скрытый дефект, подход Борна-Оппенгеймера позволяет рассчитывать физически надёжные сечения и константы скоростей неупругих процессов столкновений атомов, ионов, молекул с достаточно высокой точностью.

[1] M. Asplund, ARAA 43 (2005) 481.

[2] W. Steenbock, H. Holweger, A&A 130 (1984) 319.

[3] D. L. Lambert, Phys. Scr. T, 47 (1993) 186.

[4] P. S. Barklem, A. K. Belyaev, M. Guitou, N. Feautrier, F. X. Gadéa, and A. Spielfiedel, A&A 530 (2011) A94.

[5] L. D. Landau, Phys. Z. Sowietunion 1 (1932) 88.

[6] L. D. Landau, Phys. Z. Sowietunion 2 (1932) 46.

[7] C. Zener, Proc. Roy. Soc. A 137 (1932) 696.

[8] Y. N. Demkov, Sov. Phys. JETP 18 (1964) 138.

[9] E. E. Nikitin, Opt. Spectrosc. 13 (1962) 431.

[10] M. Born and J. R. Oppenheimer, Ann. Phys. 84 (1927) 457.

[11] L. D. Faddeev, Sov. Phys. JETP 12 (1961) 1014.

[12] J. Grosser, T. Menzel, and A. K. Belyaev, Phys. Rev. A 59 (1999) 1309.

[13] A. K. Belyaev, D. Egorova, J. Grosser, and T. Menzel, Phys. Rev. A 64 (2001) 052701.

[14] A. K. Belyaev, Phys. Rev. A 82 (2010) 060701(R).

This research has been supported by:

1. "РГПУ им. А. И. Герцена", grant Внутренний грант РГПУ им. А. И. Герцена (№ 46-ВГ).