Stars-2025-AtomData002

Исследование неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов хрома и водорода при низких энергиях.

Анастасия А. Мамонтова[1] , Светлана А. Яковлева[1]

[1] Herzen State Pedagogical University of Russia, Russia

fukk15tsumi07@gmail.com

Работа посвящена теоретическому исследованию низкоэнергетических неупругих процессов при столкновениях атомов и ионов хрома с атомами и ионами водорода с использованием модельного асимптотического подхода [1]. Изучение неупругих столкновений важно для спектроскопического анализа, понимания химических реакций и процессов в звёздных атмосферах. Применение подхода Борна-Оппенгеймера [2] позволяет разделить задачу на расчет электронной структуры и исследование ядерной динамики. Модель Ландау-Зинера [3] применяется для расчета вероятностей неадиабатических переходов, которые нужны для определения сечений неупругих столкновений и констант скоростей. В исследовании учтено 16 ковалентных состояний Cr(3d5nl 5,7L) +H и 1 ионное состояние Cr(3d5 6S) +H- , а также 38 ковалентных состояний Cr(3d4 4s nl 5,7L) +H и 1 ионное состояние Cr(3d4 4s 6D) +H-. Рассчитаны константы скоростей возбуждения, девозбуждения, взаимной нейтрализации и образования ионной пары для температур от 1000 до 10000 K. Актуальность исследования обусловлена недостатком экспериментальных данных в области низкоэнергетических столкновений CrH, что требует теоретических расчетов. Результаты исследования способствуют развитию моделей, описывающих химические и физические процессы в системах, содержащих хром и водород.

Список литературы:

[1] Belyaev A.K. Model approach for low-energy inelastic atomic collisions and application to Al+H and Al+ + H− / A.K. Belyaev // Physical Review A, V.88, 052704 (2013).

[2] Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln // Annalen der Physik. 1927. Vol. 389, no. 20. Pp. 457–484.

[3] L.D.Landau, Phys.Z. Sowietunion 1, 88 (1932); 46(1932); C.Zener, Proc.Roy. Soc. A 137, 696 (1932).

This research has been supported by:

1. "Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена", grant 46-VG