

На правах рукописи
УДК 539.186

Родионов Дмитрий Сергеевич

**НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ
ПРИ МЕДЛЕННЫХ АТОМНЫХ
СТОЛКНОВЕНИЯХ**

01.04.02 – теоретическая физика

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2014

Работа выполнена на кафедре теоретической физики и астрономии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Российский государственный педагогический университет имени А. И. Герцена»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор

Беляев Андрей Константинович

ведущий научный сотрудник отдела теоретической физики НИИ физики, заведующий кафедрой теоретической физики и астрономии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена».

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор

Иванов Вадим Константинович

заведующий кафедрой экспериментальной физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

кандидат физико-математических наук, доцент

Леднев Михаил Георгиевич

доцент кафедры Н4 «Физика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Балтийский государственный технический университет «Военмех» им. Д. Ф. Устинова»

Ведущая организация:

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Защита состоится «26» июня 2014 года в 17⁰⁰ часов на заседании Совета по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Д 212.199.21 при Федеральном государственной бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Российский государственный педагогический университет имени А. И. Герцена» по адресу: 191186, Санкт-Петербург, наб.р. Мойки, д.48, корп. 3, ауд.52.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена 91186, Санкт-Петербург, наб.р. Мойки, д.48, корп. 5

Автотреферат разослан «24» апреля 2014 года.

Ученый секретарь диссертационного совета

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Н. И. Анисимова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования неадиабатических переходов при медленных атомных столкновениях обусловлена необходимостью учитывать неадиабатические эффекты при расчете достоверных атомных и молекулярных данных, таких как сечения и константы скоростей неупругих процессов при столкновениях атомов, молекул и ионов. Сечения и константы скоростей необходимы для моделирования фотосфер звезд, например Солнца, для определения относительных и абсолютных распространенностей химических элементов, эволюции Вселенной, галактической археологии, понимания многих явлений в межзвездной среде и других фундаментальных аспектов современной астрофизики. Низкоэнергетические процессы столкновений тяжелых частиц вносят основную неопределенность при моделировании атмосфер звезд и межзвездной среды в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия. В настоящее время для оценки сечений в астрофизике широко используется формула Дроуина. Однако для оптически разрешенных атомных переходов формула Дроуина приводит к сечениям, завышенным на несколько порядков, в то время как для оптически запрещенных переходов, включая перезарядку, формула Дроуина дает или нулевые, или на несколько порядков заниженные сечения по сравнению с точными квантовыми расчетами, которые дают сравнимые сечения как для оптически разрешенных, так и для оптически запрещенных переходов. Кроме получения наиболее точных сечений процессов, при моделировании атмосфер звезд и межзвездной среды также необходимо учитывать процессы для всех переходов между всеми состояниями от основного до ионного. В связи с этим определение достоверных данных о сечениях и константах скоростей физических процессов является **актуальным**.

Объектом исследования являются неупругие атомные столкновения, а **предметом** исследования – характеристики процессов, происходящих при атомных столкновениях, в частности, неупругие сечения переходов.

Целью настоящей работы является исследование неупругих процессов, происходящих при низкоэнергетических атомных столкновениях, и расчеты достоверных сечений указанных процессов. Для достижения этих целей в диссертации:

1. Проведен анализ входных квантово-химических данных: адиабатических потенциалов и матричных элементов взаимодействия. Рассчитаны сечения неупругих процессов методом перепроецирования, проанализированы полученные сечения. Определены основные механизмы неадиабатических переходов. Проведены дополнительные расчеты для уточнения механизмов неупругих процессов.
2. Проведено исследование сходимости рассчитанных сечений по отношению к длине базиса учитываемых ядерных волновых функций.
3. Рассчитаны сечения неупругих процессов, происходящих при ионно-атомных столкновениях лития и гелия. Проведен анализ конкуренции радиационных и безызлучательных процессов.

Связь темы с планом научных работ. Диссертационная работа являлась частью научных исследований кафедры теоретической физики и астрономии, НОЦ «Передовые теоретические исследования» и лаборатории атомной и молекулярной физики НИИ физики РГПУ им. А.И. Герцена и выполнялась при поддержке грантов:

- Проект Минобрнауки РФ № 17/09-3Н «Разработка и применение квантовой теории неадиабатических переходов в молекулярной и химической физике» (исполнитель).
- Проект Минобрнауки РФ № 19/10-3Н «Применение квантовой теории неадиабатических переходов к исследованиям элементарных неупругих процессов» (исполнитель).
- Грант РФФИ 2010-2011 гг. № 10-03-00807-а «Неадиабатическая динамика и структура атомно-молекулярных систем» (исполнитель).
- Проект Минобрнауки РФ № 42/12–ГЗП «Расчеты сечений неупругих процессов и заселенностей состояний атомно-молекулярных систем» (исполнитель).
- Грант РФФИ 2013-2015 гг. № 13-03-00163-а «Исследование неадиабатической динамики атомно-молекулярных систем» (исполнитель).

Теоретическая значимость работы заключается в использовании точных квантовых методов учета неадиабатических эффектов при атомных и ионных столкновениях, что позволило получить новые знания о механизмах неупругих процессов.

Практическая значимость работы: рассчитанные квантовые сечения процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации, происходящих при столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода, использованы в работе [1] для моделирования спектральных линий атома магния в атмосферах Солнца и звезд класса А, таких как HD 48915 (Sirius), HD 172167 (Vega) HD 209459 (21 Peg). Рассчитанные квантовые сечения процессов столкновения атомов и ионов с атомами и ионами водорода обеспечивают достаточно точный и полный набор атомных данных, необходимый для моделирования атмосфер звезд. Рассчитанные квантовые сечения неупругих процессов при ионно-атомных столкновениях лития и гелия позволяют провести более точное моделирование межзвездной среды.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Квантовыми методами рассчитаны сечения процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации, происходящих при столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода, при этом рассмотрены все переходы для каналов столкновения, расположенных между основным и низколежащими возбужденными состояниями атома магния вплоть до ионного канала.
2. Определены механизмы процессов при столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода. Показано, что основной механизм процессов связан с ионно-ковалентным взаимодействием $^2\Sigma^+$ молекулярных состояний, хотя в некоторых случаях также необходимо учитывать $^2\Pi$ состояния.
3. Квантовыми методами исследованы безызлучательные процессы, происходящие при ионно-атомных столкновениях лития и гелия. Показано, что безызлучательные процессы доминируют над радиационными в тех же столкновениях при энергиях столкновений выше 5 эВ.

Апробация работы. Материалы диссертации апробированы на следующих конференциях и семинарах:

1. XXVII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2011), 27 July-2 August 2011, Belfast, Northern Ireland, UK
2. XX Конференция по Фундаментальной Атомной Спектроскопии (ФАС-XX), 23-27 сентября 2013, Воронеж, Россия
3. ФизикА.СПб Российская молодёжная конференция по физике и астрономии, 23-24 октября 2013, Санкт-Петербург, Россия
4. Городской межвузовский семинар по квантовой оптике на базе РГПУ им. А.И. Герцена.

Достоверность и научная обоснованность результатов и выводов диссертации обеспечивается четкой формулировкой поставленных задач, использованием надежных методов для расчета ядерной динамики, а также точных квантово-химических данных: потенциалов и матричных элементов взаимодействия.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней получены сечения неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов магния и водорода, необходимые для моделирования атмосфер звезд, в том числе и Солнца. Также в рамках данной работы исследованы механизмы неупругих процессов происходящих при указанных столкновениях.

Личный вклад автора в получение представленных в диссертации научных результатов состоит в том, что им проанализированы публикации по теме исследования, квантово-химические данные: адиабатические потенциальные энергии и матричные элементы неадиабатического взаимодействия, и проведен расчет неупругих сечений ряда физически значимых процессов. Проанализированы механизмы реакций и определены основные механизмы, базирующиеся на неадиабатических переходах между молекулярными состояниями гидрида магния. Исследован вопрос о сходимости используемых квантово-химических данных по отношению к базисным электронным волновым функциям, а также вопрос о сходимости рассчитываемых неупругих сечений по

отношению к длине базисных ядерных функций. Проведено сравнение рассчитанных сечений безызлучательных процессов с сечениями радиационных процессов, происходящих при ион-атомных столкновениях лития и гелия.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех содержательных глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 125 страницах машинописного текста, содержит 58 рисунков. Библиография содержит 81 наименование.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во «Введении» обоснованы выбор темы и актуальность исследования, сформулированы цель работы, научная новизна полученных результатов, практическая значимость работы и основные положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** «Теория неадиабатических переходов для медленных столкновений» рассмотрены стандартный адиабатический подход Борна-Оппенгеймера и метод перепроецирования в рамках данного подхода. Показано, что метод перепроецирования позволяет получать надежные неупругие сечения при наличии ненулевых матричных элементов неадиабатического взаимодействия в асимптотической области.

Основным подходом при рассмотрении медленных атомных столкновений является стандартный адиабатический подход Борна-Оппенгеймера. Этот подход базируется на идее Борна-Оппенгеймера о разделении всей системы на быструю (электроны) и медленную (ядра) подсистемы [2]. Математически это означает разложение полной (электронной и ядерной) волновой функции по базису электронных волновых функций при фиксированных ядрах. Оценить, насколько движение ядерной подсистемы является медленным, позволяет так называемый параметр Мессии ξ , величина которого определяет применимость данного приближения. Параметр Мессии определяется через изменение энергии электронов $\Delta U(R)$ при столкновении, характерные размеры атомов a и скорость их сближения V :

$$\xi = \frac{\Delta U(R)a}{\hbar V}. \quad (1)$$

Критерием адиабатичности выступает условие $\xi \gg 1$. Данное условие соответствует малым скоростям ядер по сравнению со скоростями электронов. При этом полагается, что в системе не происходит неадиабатических переходов. Если в какой-то области межъядерных расстояний R этот параметр

становится близким к единице, то адиабатичность нарушается и возрастает вероятность неадиабатического перехода из одного состояния в другое, что сопровождается изменением внутренней энергии всей системы. Однако параметр Мессии не является универсальным критерием для подобных оценок.

В ходе квантово-химических расчетов, выполненных с началом электронных координат в центре масс ядер, могут получаться такие матричные элементы неадиабатичности, которые в асимптотической области ($R \rightarrow \infty$) не обращаются в ноль [3–5].

Попытка применить адиабатический подход с ненулевыми матричными элементами в асимптотической области приводит к выводу о возможности неадиабатических переходов даже при бесконечно большом расстоянии между атомами. Наличие ненулевых матричных элементов неадиабатического взаимодействия является фундаментальным свойством стандартного подхода Борна-Оппенгеймера. В связи с этим матрицу рассеяния необходимо получать из решения системы связанных уравнений с ненулевыми асимптотическими матричными элементами неадиабатичности. В рамках метода перепроецирования уравнения связанных состояний могут быть решены с ненулевыми асимптотическими взаимодействиями, сохраняющими неадиабатические переходы между молекулярными состояниями в асимптотической области, но процедура перепроецирования позволяет исправить асимптотические волновые функции и удаляет переходы между атомными состояниями в асимптотической области, что приводит к физически правильным результатам.

Данное исследование использует метод перепроецирования, поскольку это позволяет рассматривать столкновения атомов с произвольным числом электронов и не требует дополнительных квантово-химических расчетов, требуются только адиабатические потенциалы и матричные элементы неадиабатического взаимодействия, полученные в системе координат с началом в центре масс ядер, которые получаются в результате стандартных квантово-химических расчетов.

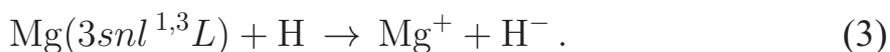
Во **второй главе** «Неупругие процессы, происходящие в результате переходов между $^2\Sigma^+$ состояниями при столкновениях атомов магния и водорода» проведено теоретическое исследование столкновений атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода. Квантовым методом перепроецирования проведены систематические наибо-

лее точные расчеты сечений неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации при низкоэнергетических столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода. В данной работе изучены следующие процессы:

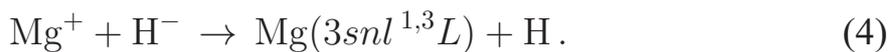
1. Процессы возбуждения и девозбуждения



2. Процессы образования ионной пары



3. Процессы взаимной нейтрализации



Как показано в работе [6], на примере столкновений $\text{Li} + \text{H}$ процессы образования ионной пары и взаимной нейтрализации важны при моделировании звезд.

В данной главе описываются необходимые для квантового расчета неупругих сечений квантово-химические данные: адиабатические потенциальные энергии и матричные элементы неадиабатического взаимодействия. Детальный анализ квантово-химических данных показал, что точность трех верхних термов не достаточно высока, в связи с чем квантово-химические данные были скорректированы в асимптотической области на экспериментальные атомные энергии ($3s3d^1D$) и ($3s4p^3P$) атомных состояний магния. Для того чтобы рассмотреть ионный канал, необходимо, чтобы один из термов соответствовал взаимодействию $\text{Mg}^+ + \text{H}^-$. В связи с чем верхний потенциал имеет вид соответствующего диабатического терма, асимптотически выходящего на ионный предел $\text{Mg}^+ + \text{H}^-$.

Неадиабатические переходы определяются матричными элементами неадиабатического взаимодействия. Хотя потенциалы были скорректированы, матричные элементы не были изменены, за исключением области больших

расстояний, где происходит взаимодействие между ионной и высоколежащими ковалентными конфигурациями. Для восьми $^2\Sigma^+$ молекулярных состояний, которые рассматриваются в данной работе, существует пять асимптотических матричных элементов неадиабатичности, отличных от нуля. Это матричные элементы между молекулярными состояниями, которые асимптотически соответствуют переходам между атомными состояниями с отличным от нуля дипольным моментом (оптически разрешенные переходы).

Сечения рассчитаны для всех переходов, включающих семь ковалентных низколежащих молекулярных состояний и ионное состояние гидрида магния. Необходимость учета большого числа процессов связана с моделированием неравновесных газовых сред, плазмы, фотосфер звезд, включая Солнце. Для указанных выше процессов детально проанализированы механизмы реакций и определены несколько основных механизмов, базирующихся на неадиабатических переходах между молекулярными состояниями гидрида магния. Показано, что основным механизмом исследуемых процессов, приводящим к наибольшим значениям сечений, является механизм, связанный с взаимодействием ионной и ковалентных конфигураций. С другой стороны, другие механизмы, в частности, петлеобразный механизм, определяют в значительной степени неупругие процессы, характеризующиеся промежуточными значениями неупругих сечений. Показано, что среди эндотермических процессов наибольшим значением сечений обладает парциальный процесс образования ионной пары при столкновениях $\text{Mg}(3s4s^1S) + \text{H}$. Сечение указанного процесса достигает значения 100 \AA^2 . Соответственно, среди экзотермических процессов наибольшим сечением обладает процесс взаимной нейтрализации $\text{Mg}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{Mg}(3s4s^1S) + \text{H}$.

В третьей главе «Расширенное изучение неупругих столкновений атомов магния и водорода» исследован вопрос о сходимости используемых квантово-химических данных по отношению к базисным электронным волновым функциям, а также вопрос о сходимости рассчитываемых неупругих сечений по отношению к длине базисных ядерных функций. В связи с этим по уточненным квантово-химическим данным проведены расчеты сечений неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации при низкоэнергетичных столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода с учетом восьми

низколежащих ковалентных состояний и одного ионного состояния симметрии $^2\Sigma^+$ гидрида магния, а также пяти ковалентных состояний симметрии $^2\Pi$. Показано, что сечения для переходов между низколежащими ковалентными состояниями, а также переходы между ковалентными и ионным состояниями в основном устойчивы по отношению к изменению длины используемых базисных функций, хотя в отдельных случаях переходы между $^2\Pi$ состояниями вносят заметные поправки.

Как отмечалось выше, точность трех верхних термов оказалась не достаточно высокой и нуждались в корректировке. В связи с этим, проведены дополнительные квантово-химические расчеты и получены новые адиабатические потенциальные энергии и матричные элементы неадиабатического взаимодействия для девяти $^2\Sigma^+$ состояний (верхнее из которых асимптотически соответствует ионному взаимодействию $\text{Mg}^+ + \text{H}^-$) и пяти нижних $^2\Pi$ состояний молекулы MgH . Настоящие квантово-химические данные рассчитаны с большей точностью в связи с чем отсутствует необходимость производить указанную выше коррекцию адиабатических потенциальных энергий. Также, в отличие от предыдущих расчетов [7], получены квантово-химические данные и неупругие сечения переходов между $^2\Pi$ состояниями.

Уточненные квантово-химические данные использованы для расчета ядерной динамики. Проведен расчет неупругих сечений с использованием уточненных адиабатических потенциалов и матричных элементов неадиабатичности для девяти $^2\Sigma^+$ и пяти $^2\Pi$ состояний. Рассчитанные сечения являются более точными.

Сравнение неупругих сечений с предыдущим расчетом показывает, что расчеты стабильны, хотя некоторые сечения немного отличаются из-за более точных квантово-химических данных. Процесс образования ионной пары $\text{Mg}(3s4s^1S) + \text{H} \rightarrow \text{Mg}^+ + \text{H}^-$ имеет наибольшее неупругое сечение среди эндотермических процессов, примерно 107 \AA^2 . Предыдущие расчеты для этого же процесса привели к значению около 100 \AA^2 [7], разница в пределах нескольких процентов. Это укладывается в ожидаемую точность в 20 % [8].

Неадиабатические переходы между $^2\Pi$ состояниями MgH могут влиять на сечения переходов между возбужденными состояниями, но не на сечения процесса образования ионной пары и взаимной нейтрализации. Необходимо отметить, что не все атомные состояния MgH могут порождать молекуляр-

ные состояния $^2\Pi$ симметрии. Таким образом, включение дополнительных каналов $^2\Pi$ молекулярной симметрии может увеличивать сечения неупругих процессов для тех переходов, которые могут произойти как в $^2\Pi$, так и в $^2\Sigma^+$ симметриях.

Также были проведены модельные оценки сечений. Проведен расчет неупругих сечений с помощью модели Ландау-Зинера. Необходимо отметить, что модельные оценки сечений учитывают только области неадиабатичности при больших межъядерных расстояниях, связанные с ионно-ковалентным взаимодействием. Результаты анализа полученных сечений указывают на то, что основным механизмом рассматриваемых неупругих процессов является механизм неадиабатических переходов в результате наличия областей неадиабатичности из-за ионно-ковалентного взаимодействия.

В четвертой главе «Неупругие процессы при ионно-атомных столкновениях лития и гелия» методом перепроецирования рассчитаны сечения безызлучательных процессов перезарядки, возбуждения, девозбуждения и перезарядки в возбужденное состояние, происходящих при низкоэнергетических ион-атомных столкновениях лития и гелия. Проведено сравнение рассчитанных сечений безызлучательных процессов с сечениями радиационных процессов, происходящих при тех же столкновениях. Показано, что при низких энергиях столкновений доминирующими являются радиационные процессы, в то время как при достаточно высоких энергиях столкновений, выше 5 эВ, доминирующими являются безызлучательные процессы, что необходимо учитывать при моделировании процессов, происходящих в межзвездной среде.

В настоящем исследовании изучены эндотермические переходы при столкновениях литий-гелиевых молекулярных катионов. В данном исследовании рассматривались как синглетные, так и триплетные состояния LiHe^+ .

Для переходов в основное состояние $\text{Li}^+(1s^2\ ^1S) + \text{He}(1s^2\ ^1S)$ были проведены оценки сечений, которые показали, что безызлучательные переходы в данное состояние приводят к пренебрежимо малым значениям сечений. Все рассчитанные сечения переходов между синглетными состояниями, кроме одного, имеют значения не более 10^{-2} \AA^2 . Среди процессов, происходящих между синглетными состояниями, самое большое сечение соответствует процессу $\text{Li}^+(1s^2\ ^1S) + \text{He}(1s2s\ ^1S) \rightarrow \text{Li}(1s^22p\ ^2P) + \text{He}^+(1s^2\ ^1S)$ со значением по-

рядка нескольких \AA^2 . Данное сечение обусловлено наличием области неадиабатичности в районе межъядерного расстояния 3.5 а. е.

Для переходов между триплетными состояниями процесс $\text{Li}^+(1s^2\ ^1S) + \text{He}(1s2p\ ^3P) \rightarrow \text{Li}(1s^22p\ ^2P) + \text{He}^+(1s\ ^2S)$ имеет наибольшее сечение, с величиной порядка $26\ \text{\AA}^2$ при энергии 10 эВ. Оно обусловлено наличием области неадиабатичности при $R \approx 24.7$ а. е. Остальные сечения значительно меньше.

В работах [9,10] получены сечения для различных радиационных переходов в столкновениях $\text{Li}^+ + \text{He}$ и $\text{Li} + \text{He}^+$. Анализ полученных сечений показал, что эндотермические процессы разрушения исследованных в указанных работах состояний доминируют над радиационными механизмами разрушения. Таким образом, можно сделать вывод о том, что при малых энергиях столкновений доминирующими являются радиационные процессы, а при достаточно больших энергиях безызлучательные процессы доминируют над радиационными. Соответственно, при моделировании межзвездной среды необходимо учитывать безызлучательные неадиабатические переходы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты, полученные в настоящей работе.

1. Квантовым методом перепроецирования проведены систематические наиболее точные расчеты сечений неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации при низкоэнергетичных столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода. Сечения рассчитаны для всех переходов, включающих семь ковалентных низколежащих молекулярных состояний и ионное состояние гидрида магния.

2. Для указанных выше процессов детально проанализированы механизмы реакций и определены несколько основных механизмов, базирующихся на неадиабатических переходах между молекулярными состояниями гидрида магния. Показано, что основным механизмом исследуемых процессов, приводящим к наибольшим значениям сечений, является механизм, связанный с взаимодействием ионной и ковалентных конфигураций. С другой стороны, другие механизмы, в частности, петлеобразный механизм, определяют в значительной степени неупругие процессы, характеризующиеся промежуточными значениями неупругих сечений.

3. Показано, что среди эндотермических процессов наибольшим значением сечений обладает парциальный процесс образования ионной пары при столкновениях $\text{Mg}(3s4s^1S) + \text{H}$. Сечение указанного процесса достигает значения 100 \AA^2 . Соответственно, среди экзотермических процессов наибольшим сечением обладает процесс взаимной нейтрализации $\text{Mg}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{Mg}(3s4s^1S) + \text{H}$.

4. Исследован вопрос о сходимости используемых квантово-химических данных по отношению к базисным электронным волновым функциям, а также вопрос о сходимости рассчитываемых неупругих сечений по отношению к длине базисных ядерных функций. В связи с этим проведены уточненные расчеты сечений неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации при низкоэнергетичных столкновениях атомов и положительных ионов магния с атомами и отрицательными ионами водорода с учетом восьми ковалентных низколежащих ковалентных состояний и одного ионного состояния симметрии $^2\Sigma^+$ гидрида магния, а также пяти ковалентных состояний симметрии $^2\Pi$. Показано, что сечения для переходов между низколежащими ковалентными состояниями, а также переходы между ковалентными и ионными состояниями в основном устойчивы по отношению к изменению длины используемых базисных функций, хотя в отдельных случаях переходы между $^2\Pi$ состояниями вносят заметные поправки.

5. Рассчитанные в настоящей работе наиболее точные квантовые сечения неупругих процессов при столкновениях атомов и ионов магния с атомами и ионами водорода приводят к более точному моделированию атмосфер звезд, включая Солнце, чем моделирование, базирующееся на неупругих сечениях, рассчитанных по формуле Дроуина. В частности, наибольшее отличие наблюдается для переходов с изменением спиновых состояний атома магния при столкновениях с атомами водорода.

6. Методом перепроецирования рассчитаны сечения безызлучательных процессов перезарядки, возбуждения, девозбуждения и перезарядки в возбужденное состояние, происходящих при низкоэнергетических ион-атомных столкновениях лития и гелия. Показано, что парциальные процессы характеризуются сечениями вплоть до 26 \AA^2 . Проведено сравнение рассчитанных сечений безызлучательных процессов с сечениями радиационных процессов, происходящих при тех же столкновениях. Показано, что при низких энергиях

столкновений доминирующими являются радиационные процессы, в то время как при достаточно высоких энергиях столкновений, выше 5 эВ, доминирующими являются безызлучательные процессы, что необходимо учитывать при моделировании процессов, происходящих в межзвездной среде.

Публикации: по теме диссертации опубликовано 4 работы, из них 3 статьи - в рецензируемых научных журналах:

[¹] Родионов Д.С. Применение модели Ландау-Зинера к столкновениям Na + H / Д.С. Родионов // Физический вестник РГПУ им. А.И. Герцена, Сборник научных статей. Санкт-Петербург, 2010. С. 15-20.

[²] **Rodionov D.S. Cross sections for low-energy inelastic Mg + H and Mg⁺ + H⁻ collisions / A.K. Belyaev, P.S. Barklem, A. Spielfiedel, M. Guitou, N. Feautrier, D.S. Rodionov, D.V. Vlasov.// Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2012. V.85. Num.3. Art.032704.**

[³] **Rodionov D.S. Ab Initio Cross Sections for Low-Energy Inelastic Mg + H Collisions / A.K. Belyaev, P.S. Barklem, M. Guitou, A. Spielfiedel, N. Feautrier, D.V. Vlasov, D.S. Rodionov // Journal of Physics: Conference Series. 2012. V.388. Num.9. Art.092002.**

[⁴] **Rodionov D.S. Extended study of low-energy inelastic magnesium-hydrogen collisions / D.S. Rodionov, A.K. Belyaev, M. Guitou, A. Spielfiedel, N. Feautrier, P.S. Barklem. // Известия Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена. СПб., 2014. N. 165. С.63 - 71.**

Список используемой литературы

1. Mashonkina L. Astrophysical tests of atomic data important for the stellar Mg abundance determinations / L. Mashonkina // Astronomy & Astrophysics. 2013. V.550. P.A28.
2. Born M. Zur Quantentheorie der Molekeln / M. Born, R. Oppenheimer // Annalen der Physik. 1927. V.389. Num.20. Pp.457–484.
3. Belyaev A.K. The dependence of nonadiabatic couplings on the origin of electron coordinates / A.K. Belyaev, A. Dalgarno, R. McCarroll // The Journal of Chemical Physics. 2002. V.116. Num.13. Pp.5395–5400.

4. Grosser J. Approach to electron translation in low - energy atomic collisions / J. Grosser, T. Menzel, A.K. Belyaev // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 1999. V.59. Pp.1309–1316.
5. Belyaev A.K. Electron translation and asymptotic couplings in low - energy atomic collisions / A.K. Belyaev, D. Egorova, J. Grosser, and T. Menzel //Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2001. V. 64. Art. 052701.
6. Barklem P.S Inelastic $H + Li$ and $H^- + Li^+$ collisions and non-LTE Li in line formation in stellar atmospheres / P.S. Barklem, A.K. Belyaev, M. Asplund // Astronomy & Astrophysics. 2003. V.409. Num.2. Pp.L1-L4.
7. Belyaev A.K. Cross sections for low-energy inelastic $Mg + H$ and $Mg^+ + H^-$ collisions / A.K. Belyaev, P.S. Barklem, A. Spielfiedel, M. Guitou, N. Feautrier, D.S. Rodionov, D.V. Vlasov // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2012. V.85 Art.032704.
8. Barklem P.S. Inelastic $Mg+H$ collision data for non-LTE applications in stellar atmospheres / P.S. Barklem, A.K. Belyaev, A. Spielfiedel, M. Guitou, N. Feautrier // Astronomy & Astrophysics. 2012. V.541. P.A80.
9. Augustovičová L. Radiative association of $LiHe^+$ / L. Augustovičová, V. Špirko, W.P. Kraemer, P. Soldán // Chemical Physics Letters. 2012. V.531. Pp.59–63.
10. Augustovičová L. Depopulation of Metastable Helium by Radiative Association with Hydrogen and Lithium Ions / L. Augustovičová, W.P. Kraemer, P. Soldán // The Astrophysical Journal. 2014. V.782 Num.1. P.46.