

# Неупругие процессы при столкновении железа и водорода

Выполнила студент 2 курса магистратуры кафедры ТиМФ

Петрова Мария Ивановна

Научный руководитель: д.ф.-м.наук, профессор

Беляев Андрей Константинович

# Введение

- Целью данной работы заключается в исследовании неупругих процессов столкновении атомов и иона железа с атомами водорода.

# Задачи

- Определить молекулярные симметрии для каждого терма, усреднение энергии, расчет энергий связи электрона в каждом состоянии, вычислить статистические веса для каждого молекулярного состояния.
- Определить константы скоростей и сечения

# Подход Борна-Оппенгеймера

Подход Борна-Оппенгеймера решается в два этапа:

- Решение электронной задачи при фиксированных ядрах.
- Решение ядерной динамики с полученными результатами в первой части.

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_{tot}\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{H}_e = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{R}} \right) + (\hat{T}_e + \hat{U})$$

$$\hat{H}_e \phi_j(\vec{r}, R) = U_j(R) \phi_j(\vec{r}, R)$$

$$(\hat{T}_n + \hat{H}_e) \sum_j \chi_j(\vec{R}) \phi_j(\vec{r}, R) = E_{tot} \sum_j \chi_j(\vec{R}) \phi_j(\vec{r}, R)$$

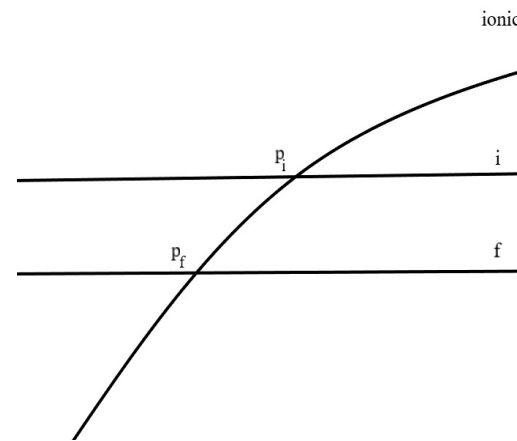
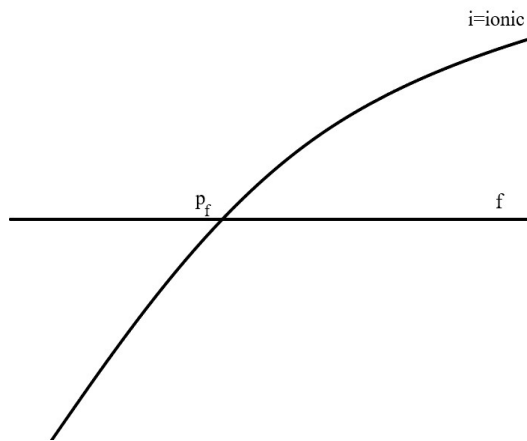
# Диабатические элементы матрицы гамильтониана

- $H_{ionic}(R) = E_{H-} - \frac{Z+1}{R}$
- $H_{jj}(R) = E_j$
- $H_{ionic j} = \frac{\sqrt{-E_j} + \sqrt{-E_{H-}}}{\sqrt{2}} \sqrt{E_j E_{H-}} R_j \times \exp\left(-0.86 R_j \frac{\sqrt{-E_j} + \sqrt{-E_{H-}}}{\sqrt{2}}\right)$

Центр неадиабатической области

- $R_j = \frac{Z+1}{E_{H-} - E_j}$

# Диабатические термы



Вероятность перехода из одного состояния в другое

$$P_{if}^{N,\wedge}(J, E) = 2p_f(1 - p_f)$$

$$P_{if}^{D,\wedge}(J, E) = 2p_f(1 - p_f)(1 - p_i)$$

# Модель Ландау-Зинера

- $P_{if} = \exp\left(-\frac{\xi}{v}\right)$ , где  $\xi = \frac{2\pi H_{ionic\ j}^2}{\hbar |H'_{ionic} - H'_{jj}|}$

- $p_j = \exp\left(-\frac{2\pi H_{ionic\ j}^2}{\hbar |H'_{ionic} - H'_{jj}| v}\right)$

- $p_j = \exp\left(-\frac{2\pi H_{ionic\ j}^2 (Z+1)^2}{(E_{H-} - E_j)^2 \hbar v}\right)$

Скорость радиального движения

- $v = \sqrt{\frac{2}{\mu} \left( E_{tot} - U_0(R) - \frac{J(J+1)}{2\mu R_0^2} \right)}$

## Константа скорости и сечение взаимной нейтрализации

- $N_f^\Lambda(T; E_f) = \sqrt{\frac{8}{\pi\mu(k_B T)^3}} \int_0^\infty \sigma_f^{N,\Lambda}(E) E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE,$
- $\sigma_f^{N,\Lambda}(E) = \frac{\pi\hbar^2}{2\mu E} \sum_{J=0}^{J_{max}} P_{if}^{N,\Lambda}(J, E)(2J + 1)$

## Константа скорости и сечение возбуждения-девозбуждения

- $D_{if}^\Lambda(T; E_i; E_f) = \sqrt{\frac{8}{\pi\mu(k_B T)^3}} \int_0^\infty \sigma_{if}^{D,\Lambda}(E) E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE,$
- $\sigma_{if}^{D,\Lambda}(E) = \frac{\pi\hbar^2}{2\mu E} \sum_{J=0}^{J_{max}} P_{if}^{D,\Lambda}(J, E)(2J + 1)$