

НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ НЕУПРУГИЕ АТОМНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ КАЛЬЦИЯ И ВОДОРОДА

Д.С. Родионов, Д.В. Власов, С.А. Яковлева, А.К. Беляев, Я.В. Воронов

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия
dsrodionov@herzen.spb.ru

LOW-ENERGY INELASTIC ATOMIC COLLISIONS OF CALCIUM AND HYDROGEN

D.S. Rodionov, D.V. Vlasov, S.A. Yakovleva, A.K. Belyaev, Ya.V. Voronov

Herzen State Pedagogical University of Russia, Saint Petersburg, Russia

Аннотация. Кальций является альфа-элементом, производимым сверхновыми, и представляет интерес при изучении звездных атмосфер в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия (не-ЛТЭ); при моделировании фотосферы Солнца и газовых лазеров. Проанализированы доступные квантово-химические данные для системы $\text{Ca} + \text{H}$ и $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$. Для проведения динамических расчётов проведена процедура диабатизации квантово-химических данных и сконструированы атомные данные в гибридном представлении. Представлены результаты расчетов вероятностей неупругих переходов, сечений и констант скоростей, необходимых при моделировании атмосфер звезд.

Ключевые слова: неадиабатические переходы, неупругие столкновения, константы скоростей, метод перепроецирования, диабатизация, модель Ландау—Зинера, атомные столкновения.

Abstract. Calcium is an alpha element produced by supernovae and is of interest for non-local thermodynamic equilibrium (non-LTE) modeling of stellar atmospheres. In addition to astrophysical interest, the processes of mutual neutralization for various elements are of interest from both the fundamental and practical points of view, for example, for modeling the solar photosphere and gas lasers. The available quantum-chemical data for the system $\text{Ca} + \text{H}$ and $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$ are analyzed. For nuclear dynamical calculation, the diabaticization procedure was performed and atomic data were constructed in a hybrid representation. We are presented the calculated inelastic transition probabilities, cross sections and rate coefficients, the data required for modeling of stars's atmospheres.

Keywords: nonadiabatic transitions, inelastic collisions, rate constants, reprojection method, diabaticization, Landau—Zener model, atomic collisions.

Введение

Исследования атмосфер звезд, включая Солнце, базирующиеся на отклонениях от локального термодинамического равновесия (не-ЛТЭ) являются актуальными фундаментальными исследованиями современной астрофизики [Asplund, 2005; Mashonkina, 2013] и связаны с такими фундаментальными проблемами, как определение относительных и абсолютных распространенностей химических элементов, эволюция Вселенной, галактическая археология, понимание многих явлений в космосе, космическая миссия ГАИА (GAIA), в которой планируется исследовать более 100 тысяч звезд, и т. д. В связи с такими проектами по наблюдению возникла необходимость детального описания химического состава наблюдаемых звезд. В идеале для описания профиля спектральных линий необходим детальный учет физических процессов, влияющих на формирование спектра. Используемые нами модели позволяют учесть эффекты, связанные с отклонением от термодинамического равновесия, и эффекты грануляции в атмосферах звезд с помощью переноса излучения и 3-х мерных гидродинамических симуляций [Steffen et al., 2015; Klevas et al., 2016].

Не-ЛТЭ эффекты определяются конкуренцией физических процессов с участием атомов, ионов, молекул, а именно, процессов испускания и поглощения фотонов, и процессов, происходящих при столкновениях атомов, ионов и молекул с электро-

нами и другими атомами и ионами, в первую очередь с атомами и отрицательными ионами водорода. Характеристики процессов поглощения и испускания фотонов достаточно хорошо измерены экспериментально и доступны в базах данных, например, NIST. Столкновительные процессы изучены значительно меньше, особенно низкоэнергетические процессы столкновений тяжелых частиц, что вносит основную неопределенность при моделировании атмосфер звезд. В первую очередь речь идет о процессах возбуждения, девозбуждения, перезарядки, взаимной нейтрализации, образовании ионных пар и т. д. при столкновениях атомов и положительных ионов различных химических элементов с атомами и отрицательными ионами водорода, как наиболее распространенного химического элемента. Экспериментальные данные для низких температур практически отсутствуют, в связи с чем единственным источником получения информации являются теоретические расчеты.

Среди наблюдаемых элементов кальций играет важную роль, так как он является альфа-элементом, и используется в исследованиях химической эволюции звезд.

Квантово-химические данные и ядерная динамика

Моделирование спектральных линий в условиях отклонения от локального термодинамического

равновесия, как отмечалось выше, является важным для многих фундаментальных проблем в астрофизике [Asplund, 2005]. Это позволяет измерить химический состав и другие свойства звезд [Asplund, 2005]. Потребность в данных для неупругих низкоэнергетических столкновений атома водорода с атомом кальция была мотивирована в работах [Mashonkina et al., 2007; Belyaev et al., 2016], так как кальций наряду с магнием является одним из наиболее хорошо наблюдаемых элементов в спектрах [Mashonkina et al., 2007; Guitou et al., 2010; Rodionov et al., 2014; Guitou et al., 2015].

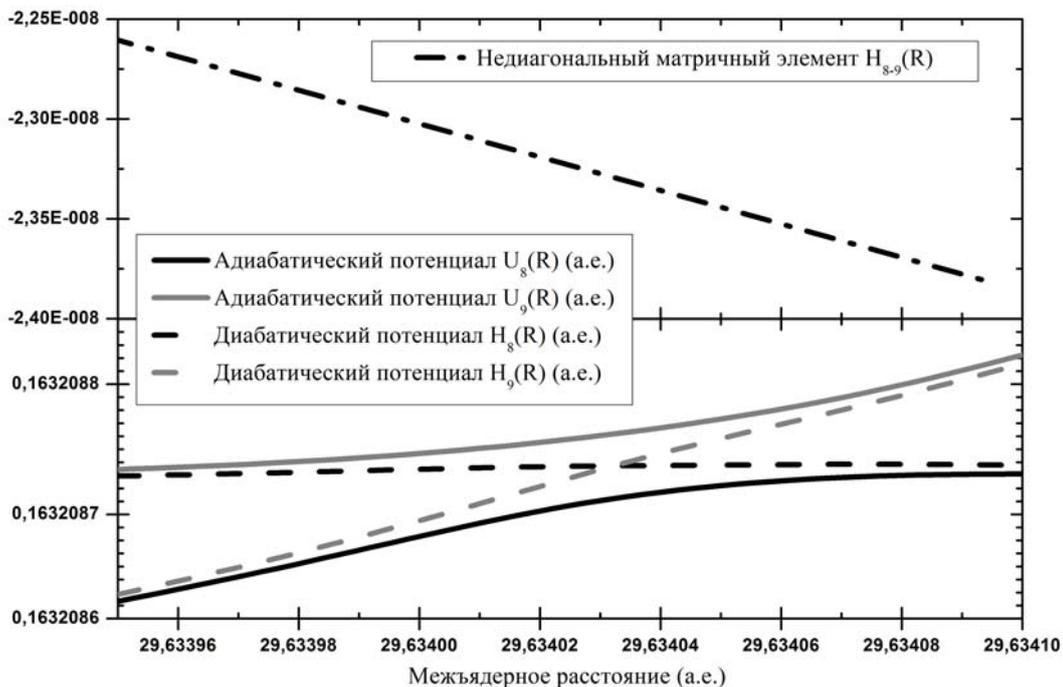
В работах [Belyaev et al., 2016; Mitrushchenkov et al., 2017] представлены наиболее точные *ab initio* расчеты для десяти нижних ковалентных $^2\Sigma^+$ состояний молекулы CaH и одного ионного $\text{Ca}^+ + \text{H}^-$ состояния. Адиабатические потенциалы использованы для получения сечений различных неупругих процессов в рамках модельных представлений с использованием как многоканальных, так и ветвящихся вероятностных токов [Mitrushchenkov et al., 2017]. Использование указанных методов позволило нам оценить сечения с большими и средними значениями, а также показать, что учет короткодействующих взаимодействий неадиабатической связи слабо влияет на сечения с большими значениями, которые определяются взаимодействиями при больших межъядерных расстояниях [Mitrushchenkov et al., 2017].

Анализ квантово-химических данных для рассматриваемой столкновительной системы показал наличие узких областей неадиабатичности не только в области больших межъядерных расстояний (ионно-ковалентное взаимодействие), но и в области

малых расстояний (взаимодействие между ковалентными термами). Узкие области неадиабатичности в адиабатическом представлении, так и ненулевые матричные элементы неадиабатического взаимодействия, приводят к проблемам при решении ядерной динамики. В данной столкновительной системе присутствуют ненулевые асимптотические радиальные матричные элементы взаимодействия. В связи с этим необходимо провести расчет ядерной динамики с учетом всех областей неадиабатичности как при больших, так и при малых межъядерных расстояниях и с учетом ненулевых асимптотических взаимодействий наиболее строгим квантовым методом перепроецирования [Belyaev, 2010].

Ввиду наличия узких областей неадиабатичности необходимо провести процедуру диабатизации и перейти в диабатическое представление для описания квантово-химической части задачи. Однако обычные процедуры диабатизации не учитывают ненулевые матричные элементы взаимодействия, обнаруженные в данной системе. Для решения этой проблемы необходимо провести диабатизацию с учетом ненулевых матричных элементов взаимодействия, в частности, в узких областях.

В качестве примера рассмотрим область неадиабатичности в окрестности $R \approx 29.63$ а.е. В указанной области расщепление адиабатических потенциалов равно $5 \cdot 10^{-8}$ а.е. и соответствующий пик радиального матричного элемента взаимодействия имеет величину порядка 12 000 а.е. Для этой области проведена процедура диабатизации. На рисунке представлен пример проведенной диабатизации, а



Пример проведенной диабатизации. Адиабатические (сплошная линия), диабатические (штриховая линия) потенциальные энергии и недиагональный матричный элемент (штрих-пунктирная линия) как функции межъядерного расстояния для области неадиабатичности с центром при $R \approx 29.63$ а.е.

именно — адиабатические (сплошная линия), диабатические (штриховая линия) потенциальные энергии и недиагональный матричный элемент (штрихпунктирная линия) как функции межъядерного расстояния для области неадиабатичности с центром при $R \approx 29.63$ а.е. Видно, что в диабатическом представлении и диагональный, и недиагональный матричные элементы гамильтониана являются плавными функциями межъядерного расстояния в отличие от адиабатического представления, что удобно для исследования ядерной динамики.

В результате получены квантово-химические данные в гибридном представлении. Вне интересующих нас узких областях квантово-химические данные получены в адиабатическом представлении. В узких областях, которые корректнее описывать в диабатическом представлении, проведена процедура двухканальной диабатизации с учетом ненулевых матричных элементов неадиабатического взаимодействия (где они есть). Это позволило учитывать ненулевые матричные элементы взаимодействия, а также правильно учитывать неадиабатические переходы в узких областях, которые корректно описываются в диабатическом представлении.

Заключение

Построены данные в гибридном представлении для проведения необходимые для проведения наиболее точных квантово-химических расчетов методом перепроецирования.

Область применения: сечения и константы скоростей процессов, полученные в ходе данного исследования, являются достаточным набором данных для астрофизических приложений. Результаты могут быть использованы при моделировании фотосфер звезд, газовых лазеров и низкотемпературной плазмы.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 17-13-01144

Список литературы

Asplund M. New light on stellar abundance analyses: Departures from LTE and homogeneity // *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 2005. V. 43, N. 1. P. 481–530.

Belyaev A.K. Revised Born-Oppenheimer approach and a reprojection method for inelastic collisions // *Phys. Rev. A.* 2010. V. 82. Art.060701.

Belyaev A.K., Yakovleva S.A., Guitou M., et al. Model estimates of inelastic calcium-hydrogen collision data for non-LTE stellar atmospheres modeling // *Astron. Astrophys.* 2016. V. 587. Art.A114.

Guitou M., Spielfiedel A., Feautrier N. Accurate potential energy functions and non-adiabatic couplings in the Mg+H system // *Chemical Phys. Lett.* 2010. V. 488, iss.4–6. P. 145–152.

Guitou M., Spielfiedel A., Rodionov D.S., et al. Quantum chemistry and nuclear dynamics as diagnostic tools for stellar atmosphere modeling // *Chemical Phys.* 2015. V. 462. P. 94–103.

Klevas J., Kucinskas A., Steffen M., Caffau E., Ludwig H.-G. Lithium spectral line formation in stellar atmospheres. The impact of convection and NLTE effects // *Astron. Astrophys.* 2016. V. 586. Art.A156.

Mashonkina L. Progress in NLTE calculations and their application to large data-sets // *Proc. Intern. Astron. Union.* 2013. Iss. 9(S298). P. 355–365.

Mashonkina L., Korn A.J., Przybilla N. A non-LTE study of neutral and singly-ionized calcium in late-type stars // *Astron. Astrophys.* 2007. V. 461. P. 261–275.

Mitrushchenkov A., Guitou M., Belyaev A.K., et al. Calcium-hydrogen interactions for collisional excitation and charge transfer // *J. Chemical Phys.* 2017. V. 146. P. 014304.

Rodionov D., Belyaev A., Guitou M., et al. Extended study of low-energy inelastic magnesium-hydrogen collisions // *Izvestia of Herzen University.* 2014. V. 165. P. 63–71.

Steffen M., Prakačavicius D., Caffau E., et al. The photospheric solar oxygen project IV. 3D-NLTE investigation of the 777 nm triplet lines // *Astron. Astrophys.* 2015. V. 583. Art.A57.