**Юрова, Инна Юрьевна.**

**Комбинированное полуклассическое приближение в теории тепловых атомных столкновений : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.02. - Санкт-Петербург, 2000. - 280 с. : ил.**

**Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Юрова, Инна Юрьевна**

**В работе рассматриваются столкновения атомных частиц при тепловых энергиях. Под энергией столкновения мы будем подразумевать энергию относительного движения рассеивающихся частиц в системе центра масс. Рассмотрим сперва классификацию процессов столкновения по кинетическим энергиям сталкивающихся частиц.**

**В.1 Классификация процессов столкновения по кинетическим энергиям рассеивающихся Частиц.**

**Различные процессы рассеяния можно классифицировать по энергиям столкновений Есоц. В зависимости от Есо11 используются те или иные методы теоретического и экспериментального исследования процесса столкниовений. Если рассматривать процессы столкновений без электронного возбуждения в начальном состоянии, то наиболее часто употребляется следующая классификация по энергиям столкновений[1~**

**3]:**

**1. Ультрахолодные, Есоц < 1К (В.1) Данный интервал включает в себя процессы Возе-конденсации и процессы переходов между состояниями сверхтонкой структуры атомов^ также явление сверхпроводимости.**

**2. Холодные, 1К < ЕсоП < 100# (В.2)**

**В данном интервале обычно рассматриваются процессы перехода между состояниями тонкой структуры атомов. В столкновении с участием молекул имеют место переходы между колебательными и вращательными состояниями.**

**3. Тепловые (медленные), 100Я" < Е^ < 10ЬК (В.З) При данных энергиях кроме процессов, имеющих место в интервале**

**В.2), возможны изменения электронных состояний частиц и их зарядов, а также перегруппировка частиц при столкновения^ включая диссоциативные и ассоциативные процессы, процессы рекомбинации противоположно заряженных частиц.**

**4. Промежуточные , 10ЬК(ШУ) < ЕсоН < ЬООеУ (В.4)**

**В данном интервале энергий активизируются процесссы ионизации и диссоциации , активно происходят процессы возбуждения электронных состояний атомов и молекул при столкновениях.**

**5. Средние , ЬООеУ < Е^ < 500КеУ (В.5)**

**В данном интервале энергий к прицессам, происходящих при энергиях (В.2)-(В.4), присоединяются процессы ионизации из внутренних оболочек, Оже-переходы и пенниговская ионизация.**

**6. Быстрые, Ь№КеУ < ЕсоЦ . (В.6)**

**Отметим, что границы интервалов энергии (В.1)-(В.6) имеют условный характер.**

**Например, нижние границы интервалов (В.2)-(В.4) расширяются, если включить в рассмотрение процессы, в которых в начальном состоянии частицы находились в электронных возбужденных состояниях. Также в данных областях энергий возможны процессы с участием внутренних оболочек атомных частиц и с проявлением релятивистских эффектов в процессах рассеяния.**

**В данной работе исследуется область, лежащая между интервалами низких (В.2) и промежуточных (В.4) энергий - область тепловъьх энергий столкновений (В.З).**

**В.2 Причина появления комбинированного полуклассического приближения .**

**В настоящее время достаточно хорошо разработаны методы теории для получения численных характеристик процессов столкновений как в интервале средних высоких энергий (В.5)-(В.6), так и низких (В.2) энергий. Для теоретического описания процесса холодных столкновений используются методы квантовой теории, такие, как метод сильной связи каналов, связанный с численными методами решения систем интегродифференциальных уравнений, вариационные методы и т.д. [10]. Для высоких энергий столкновения также используются методы квантовой механики, такие, как борновское приближение, метод искаженных волн [11], а также методы классической механики [12а]. Однако для интервала тепловых энергий (В.З) применение вышеперечисленных методов наталкивается на определенные трудности.**

**В методе сильной связи возникает слишком большое число связанных интегродифференциальных уравнений [13], затрудняющее использование численные методов их решения даже при помощи современных ЭВМ для описания процессор столкновений много^лектрон-ных атомов, находящихся в возбужденных состояниях. Например, для решения задачи о столкновении" двух возбужденных атомов натрия в приближении эффективного потенциала, ограничиваясь рассмотрением только валентных электронов, при энергии столкновений 300°К понадобится система сильной связи, включающая не менее тысячи уравнений (см. главу 1, п. 1.2). Если учесть, что требуется получить сечения рассеяния в не менее, чем в сотне точек энергии, то применение метода сильной связи каналов потребовало бы от месяца до года непрерывной работы ЭВМ.**

**С другой стороны, квантовые методы, пригодные для расчетов при больших значениях энергии столкновений, оказываются неточны в интервале энергий (В.З) . Например, первое борновское приближение и метод искаженных волн оказываются неприменимы, так как тепловые энергии недостаточно велики, чтобы оператор атом-атомного взаимодействия рассматривать как возмущение [14].**

**Классическое приближение, применяемое для описания движения атомных электронов, не может быть использовано для объяснения квантовых эффектов, таких, как эффекта спиновой или орбитальной поляризации атомов, эффекта влияния на процесс столкновения тонкой структуры электронных состояний атомов и т.д. [14]. Кроме того, методы классической механики оказываются неприменимыми для описания процессов неупругих переходов между квантовыми состояниями, если дефект энергии не является малой величиной по сравнению с энергией столкновения [15]. Данная ситуация возникает в случаях переходов между возбужденными электронными состояниями атомов при тепловых столкновениях, когда энергия возбуждения сравнима по величине или незначительно превосходит энергию столкновений, однако именно подобные случаи и составляют предмет исследования данной работы.**

**В настоящее время в теории тепловых столкновений возникло направление, в котором одновременно используются методы, предназначенные для низкоэнергетического рассеяния и методы, применяемые для рассеяния при высоких энергий. Данные методы совмещают классическую механику для описания движения тяжелых частиц - ядер, и квантовую механику для описания движения легких частиц - электронов. Однако в некоторых задачах молекулярной динамики классическая и квантовая механика используется для описания движения с участием различных степеней свободы одних только ядерных координат [15-19]. Одновременное использование методов классической и квантовой механики лежат в основе так называемого комбинированного полукласси ческого приближения. Схематически положение данного приближения среди других методов теории показано на рис.1.**