

Вычисления в задачах физики медленных атомных столкновений

Группа теории атомных столкновений

Дмитрий Власов

Кафедра теоретической физики и астрономии
РГПУ им. А. И. Герцена

Санкт-Петербург
2018

грант РФФИ № 17-13-01144

Практическая значимость

- *фундаментальные исследования*
- *астрофизические расчёты*
- рабочие среды газовых лазеров
- плазменные среды

Предыдущие исследования

- Столкновительные системы

- $H+Li$
- $H+Na$
- $H+Mg$
- $H+Ca$

- методы

- методы классических траекторий
- метод модельного приближения
- *последовательный квантовый подход*

Решаемая задача

- приближение Борна-Оппенгеймера \rightarrow разделение ядерной и электронной задач
- входные данные: квантово-химические данные столкновительной системы
 - в адиабатическом представлении
 - в гибридном (квазиadiaбатическом) представлении
- решение ядерной задачи через решение системы связанных уравнений в приближении связанных каналов
- вычисление вероятностей неадиабатических переходов и сечений рассеяния между каналами

Общая постановка задачи

Гамильтониан

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \sum_{\beta=1}^{N_e} \frac{1}{2m_{\beta}} \Delta_{\mathbf{r}_{\beta}} + \hat{H}_{\text{int}}(\{\mathbf{r}_{\beta}\}, \mathbf{R}), \quad (2)$$

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2m_e} \sum_{\beta=1}^{N_e} \Delta_{\mathbf{r}_{\beta}} + \hat{H}_{\text{int}}(\{\mathbf{r}_{\beta}\}, \mathbf{R}), \quad m_{\beta} \approx m_e \quad (3)$$

Волновая функция

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = Y_{J\tilde{M}}(\Theta, \Phi) \sum_k \frac{F_k(R)}{R} |\phi_k(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle \quad (4)$$

Система связанных уравнений

Адиабатическое представление

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{J(J+1)}{2MR^2} + (U_j(R) - E) \right\} F_j =$$

$$= \frac{1}{M} \sum_k \left\langle \phi_j \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \phi_k \right\rangle \frac{d}{dR} F_k + \frac{1}{2M} \sum_k \left\langle \phi_j \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| \phi_k \right\rangle F_k \quad (5)$$

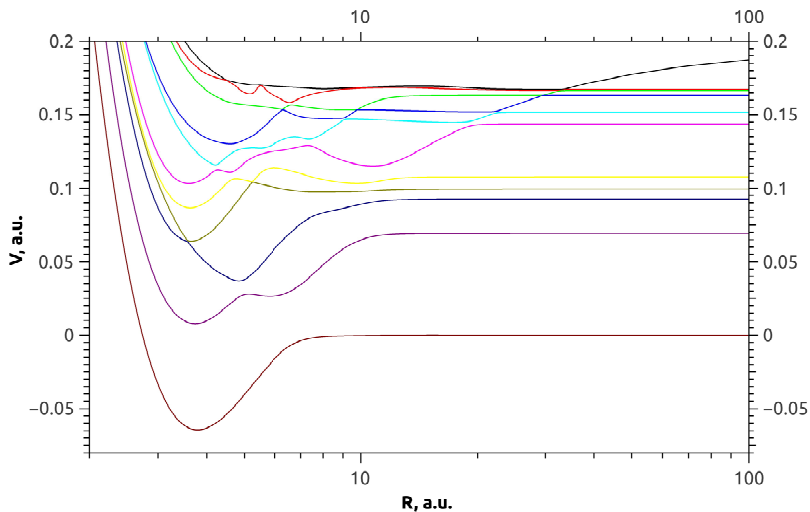
Диабатическое представление

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{J(J+1)}{2MR^2} - E \right\} F_j =$$

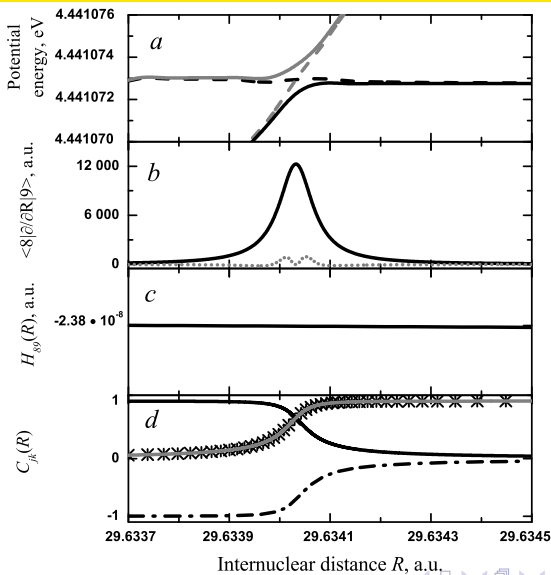
$$= \frac{1}{M} \sum_k \left\langle \chi_j \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \chi_k \right\rangle \frac{d}{dR} F_k + \frac{1}{2M} \sum_k \left\langle \chi_j \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| \chi_k \right\rangle F_k -$$

$$\sum_k \left\langle \chi_j \left| \hat{H}_e \right| \chi_k \right\rangle F_k \quad (6)$$

Система связанных уравнений - адиабатические потенциалы



δ -образные пики матричных элементов $\langle \phi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_k \rangle$



Порядок решения

- 1 анализ входных квантово-химических данных
- 2 процесс гибридной диабатизации входных квантово-химических данных
- 3 сглаживание накопленного численного "шума"
- 4 численное решение системы связанных уравнений в приближении связанных каналов
- 5 вычисление вероятностей и сечений неадиабатических переходов

Гибридный метод диабатизации

Модельный матричный элемент неадиабатичности

$$P_{jk}^{LZ}(R) = \frac{\tau}{(R - R_0)^2 + 4\tau^2}, \quad (7)$$

$$\tau = \frac{H_{jk}}{|dH_{jj}/dR - dH_{kk}/dR|}, \quad (8)$$

$$P_{jk}^{LZ} \equiv \left\langle \phi_j \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \phi_k \right\rangle \quad (9)$$

Система уравнений для матрицы смены представления

$$\frac{d}{dR} C = -P^m C \quad (10)$$

$C_0 = I$ при некотором межъядерном расстоянии R_0 (справа)

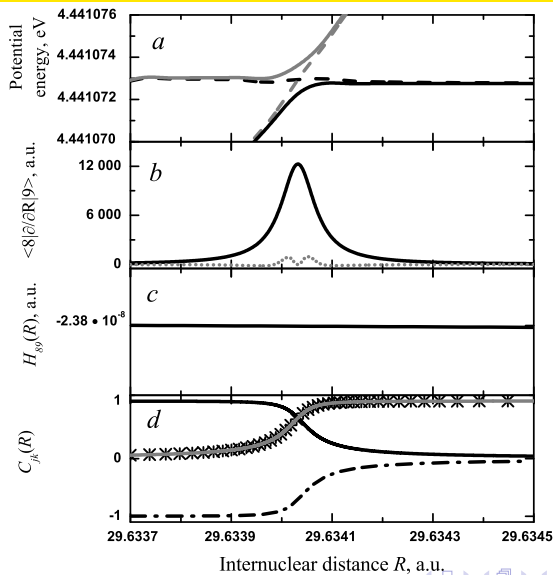
Гибридный метод диабатизации

Смена представления

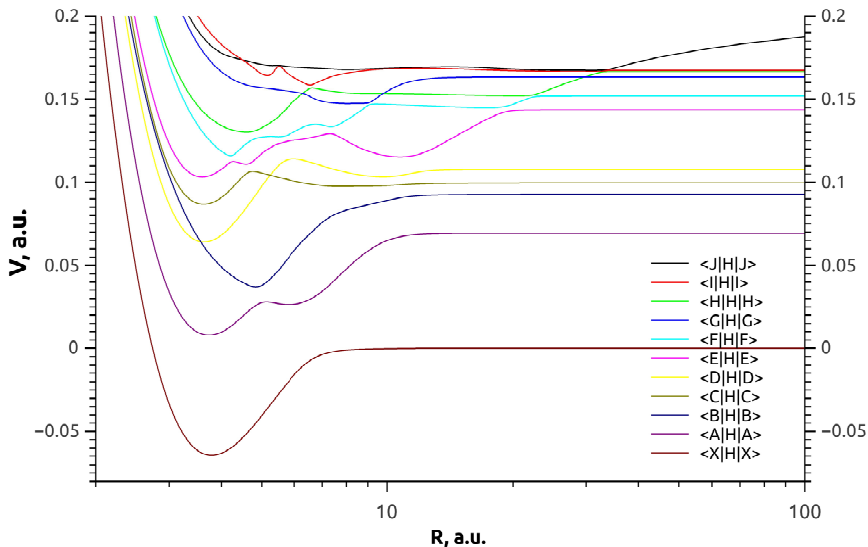
$$\begin{aligned}
 P_{\chi} &= C^+ \left(P_{\phi} C + \frac{d}{dR} C \right) = C^+ (P_{\phi} C - P^m C) = \\
 &= C^+ (P_{\phi} - P^m) C = C^+ P^{\text{res}} C \quad (11)
 \end{aligned}$$

$$H_{\chi} = C^+ H_{\phi} C \quad (12)$$

Результаты диабатизации - $\langle \chi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \chi_k \rangle$



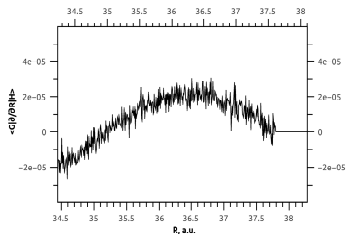
Результаты диабатизации - $\langle \chi_i | H | \chi_i \rangle$



Программа Diabatizem.jl

- поиск областей неадиабатичности с одиночными пиками в $\langle \phi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_k \rangle$ при одновременном квазипересечениями адиабатических потенциалов $\langle \phi_i | H | \phi_i \rangle$
- определение примерных границ таких областей по заданным параметрам в конфигурации
- подбор параметров модельных кривых для матричных элементов неадиабатичности $\langle \phi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_k \rangle$
- определение интервалов решения системы уравнений типа $\frac{d}{dR} C = -P^m C$ и количества уравнений для каждой такой области
- численное решение системы уравнений $\frac{d}{dR} C = -P^m C$ для заданных областей
- преобразование входных матричных элементов потенциалов и элементов неадиабатичности по найденной итоговой матрице смены представления

Постобработка данных диабатизации



- в настоящий момент делается вручную
- используемые средства: QtiPlot, Origin, Julia

Пример кода на языке Julia

```

info("Making new {·|∂/∂R|·}...")
for R ∈ ∂_∂R_arg
    S = matf2mat(R, Svf)
    ∇S = Dierckx.derivative.(Svfsp, R; nu=1)
    S-1 = S'

    ∂_∂RA = matf2mat(R, ∂_∂R); ∂_∂RM = matf2mat(R, ∂_∂Rmodel)
    ∂_∂RD = S-1 * ∂_∂RA * S + S-1 * ∇S

```


Численное решение системы связанных уравнений

Общий вид системы

$$\begin{aligned}
 \left\{ -\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{J(J+1)}{2MR^2} - E \right\} F_j = \\
 = \frac{1}{M} \sum_k \left\langle \chi_j \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \chi_k \right\rangle \frac{d}{dR} F_k + \frac{1}{2M} \sum_k \left\langle \chi_j \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| \chi_k \right\rangle F_k - \\
 \sum_k \left\langle \chi_j \left| \hat{H}_e \right| \chi_k \right\rangle F_k \quad (13)
 \end{aligned}$$

Вычисление вероятностей переходов и сечений рассеяния

Вероятности

$$F = R \times \frac{dF}{dR} \quad (14)$$

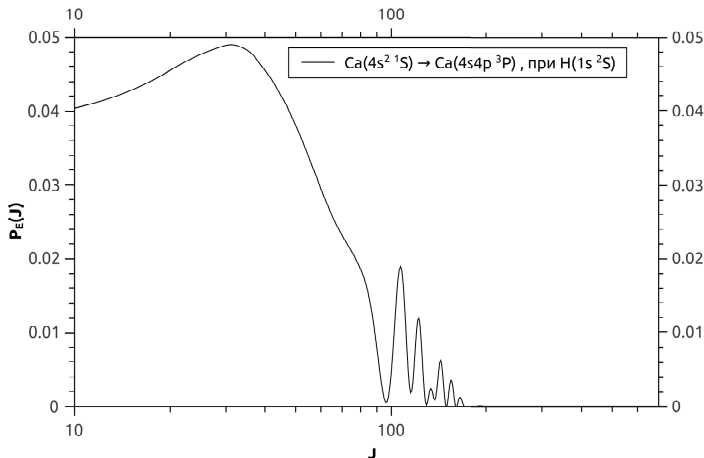
$$S = (-1)^J \exp(-i\kappa R) \kappa^{\frac{1}{2}} (\tau^+ - iR\tau^+\kappa)^{-1} \times (\tau^- + iR\tau^-\kappa) \kappa^{-\frac{1}{2}} \exp(i\kappa R) \quad (15)$$

$$P_{if} = |S_{if}|^2 \quad (16)$$

Сечения рассеяния

$$\sigma_{if} = \frac{\pi p_i^{\text{stat}}}{2ME} \sum_J P_{if}(J, E) (2J+1) \quad (17)$$

Пример графика вероятности неадиабатического перехода



Полученные результаты

- предложен метод гибридной диабатизации входных квантовохимических данных
- разработана программа автоматического определения областей диабатизации (язык Julia)
- получены гибридные диабатизированные данные для столкновительной системы $\text{Ca} + \text{H}$
- разработана программа для решения системы связанных уравнений для ядерной части задачи атомных столкновений (язык C++)
- проведена часть расчётов вероятностей возбуждений и сечений рассеяния для системы CaH
- подробные расчёты сечений предполагается представить на конференции «Звезды, планеты и их магнитные поля»: <https://events.spbu.ru/events/stars-2018/>

Благодарности

- Российский научный фонд, грант № 17-13-01144
- VI Международный балтийский морской форум
- Соавторы и коллектив кафедры теоретической физики и астрономии, РГПУ им. А. И. Герцена

Ссылки

- Belyaev A.K. // Eur. Phys. J. D. 2007. V. 44. P. 497. doi 10.1140/epjd/e2007-00203-9
- Belyaev A.K. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2002. V. 76. Suppl. 1, P. 68.
- Belyaev A. K. // Phys. Rev. A. 2010. V. 82. P. 060701. doi 10.1103/PhysRevA.82.060701
- Беляев А.К., Власов Д.В., Касьянова А.М. // Опт. и спектр. 2007. Т. 103. № 6. С. 956; Belyaev A.K., Vlasov D.V., Kas'yanova A.M. // Opt. Spectr. 2007. V. 103. N 6. P. 920. doi 10.1134/S0030400X07120144
- Mitrushenkov A.O., Palmieri P., Puzzarini C., Tarroni R. // Mol. Phys. 2000. V. 98. P. 1677.
- Zanchet A., Bañares L., Senent M. L., García-Vela A. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2016. V. 18. P. 33195. doi 10.1039/c6cp05960k

Ссылки

- Roos J.B., Orel A.E., Larson A. // Phys. Rev. A. 2009. V. 79. P. 062510. doi 10.1103/PhysRevA.79.062510
- Roos J.B., Larsson M., Larson A, Orel A.E. // Phys. Rev. A. 2009. V. 80. P. 012501. doi 10.1103/PhysRevA.80.012501
- Власов Д.В., Родионов Д.С., Беляев А.К. // Опт. и спектр. 2018. Т. 124, № 5, С. 579. doi 10.21883/OS.2018.05.45935.221-17