Метод прыгающих токов вероятности

Постановка задачи:

$$\sigma_{if}(E) = \frac{const}{E} \sum_{J=0}^{\infty} (2J + 1)\, P_{if}(J, E)\,, \qquad (1)$$

где P_{if} - вероятность перехода из состояния i в состояние f.

Асимптотическая область

Полная волновая функция есть сумма падающей и расходящейся волн:

$$\Psi \sim \sin(kr) \sim a^{+} \exp(ikr) + a^{-} \exp(-ikr)\,, \qquad (2)$$

где $a^{\pm}$ - амплитуды.

$$\Psi_{JM_J}^{tot} \sim \sum_j \frac{1}{\sqrt{K_j}} [a_j^{+} \exp\left(iK_j R\right) + a_j^{-} \exp\left(-iK_j R\right)]\,, (3)$$

где j – номер состояния.

Метод токов вероятности

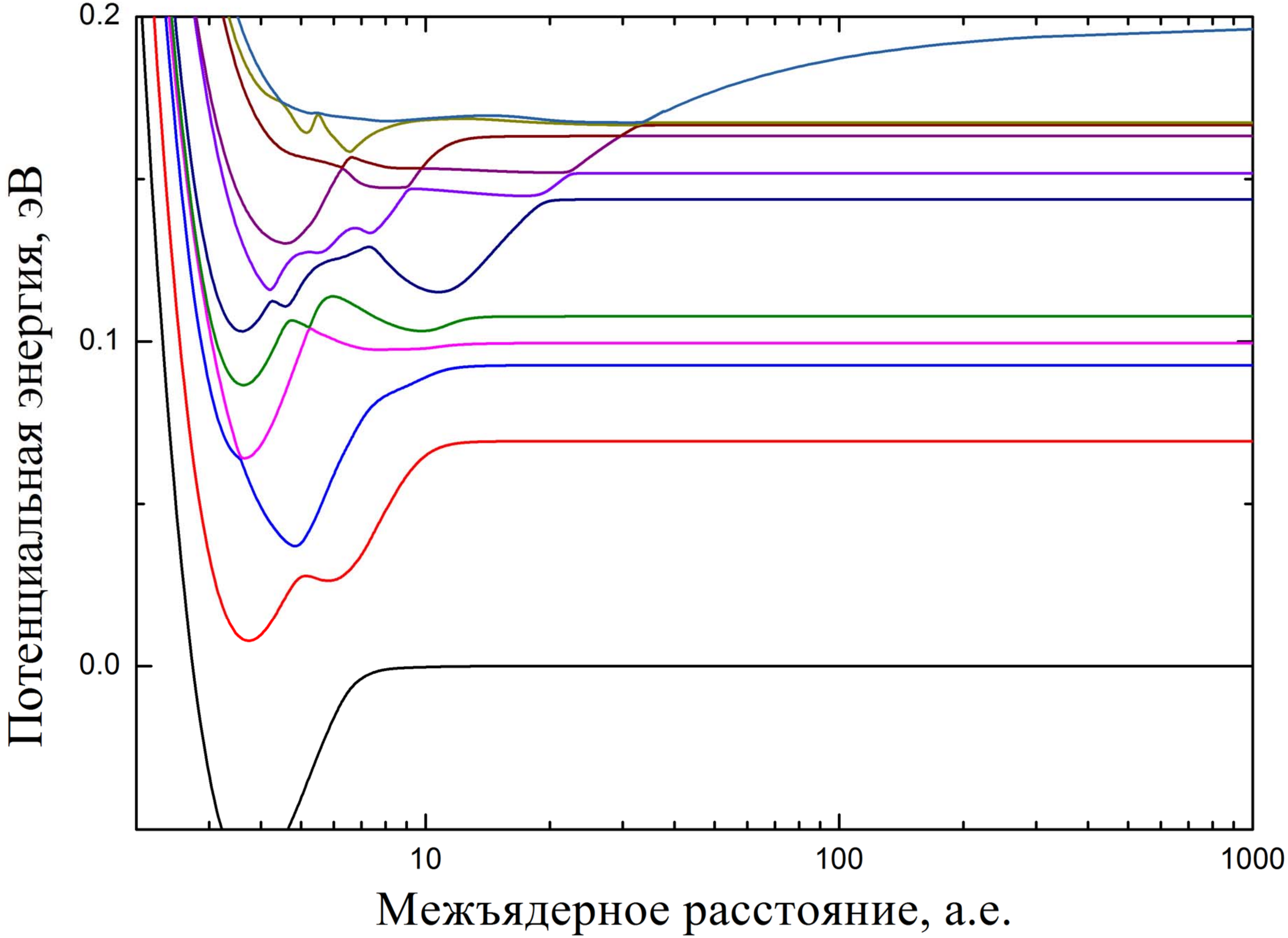
Асимптотическая область: $\tau_j^{\pm} = \left|a_j^{\pm}\right|^2$ - токи вероятности, входящие и исходящие;

$$P_{if}(J,E) = \tau_f^{+}\ , \tag{4}$$

при начальных условиях:

$$a_i^{-} = 1\ , \quad a_{j\neq i}^{-} = 0 \tag{5}$$

Потенциальные энергии (система CaH)



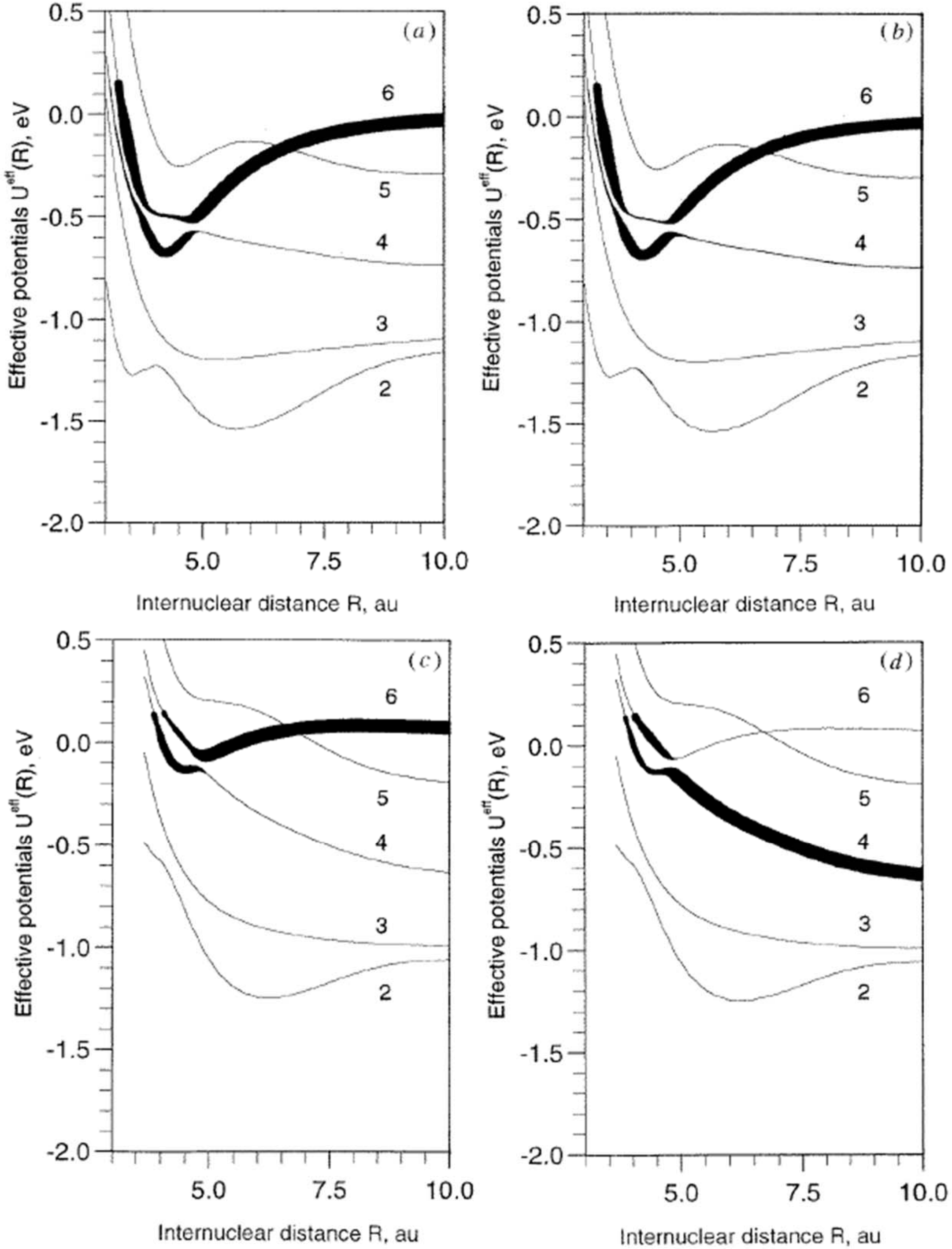
Определение полной вероятности неадиабатического перехода

Вероятность перехода в каждой области неадиабатичности определяется в рамках модели Ландау-Зинера. Полная вероятность перехода:

$$P_{if}(J, E) = \tau_f^+ = \frac{N_f}{N_{tot}}\ , \qquad (6)$$

где N_f – количество токов вероятности, попавших в конечное состояние f, N_{tot} – полное количество токов вероятности.

$$\sum_{i=1}^{n} \tau_i^+ = 1 \qquad (7)$$


(a)
(b)
(c)
(d)
Effective potentials U^eff(R), eV
Internuclear distance R, au
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-2.0
5.0
7.5
10.0
6
5
4
3
2

b=0

b=8.30 a.u.