

# Utjecaj neradijativnog prijelaza na oblik apsorpcijskog spektra dvoatomskih molekula: Landau-Zennerov model

Berislav Horvatić, Robert Beuc, Mladen Movre

[horvatic@ifs.hr](mailto:horvatic@ifs.hr) [beuc@ifs.hr](mailto:beuc@ifs.hr) [movre@ifs.hr](mailto:movre@ifs.hr)

Institut za fiziku, Bijenička cesta 46, p.p. 304, HR-10001 Zagreb

## ŠTO:

Utjecaj

- **izbjegnutog presijecanja** dijabatskih potencijalnih krivulja molekularnih stanja iste simetrije &
- **neradijativnih prijelaza** među rezultirajućim adijabatskim stanjima na **apsorpcijske** spektre dvoatomskih molekula ili atoma pri binarnom sudaru

## KAKO:

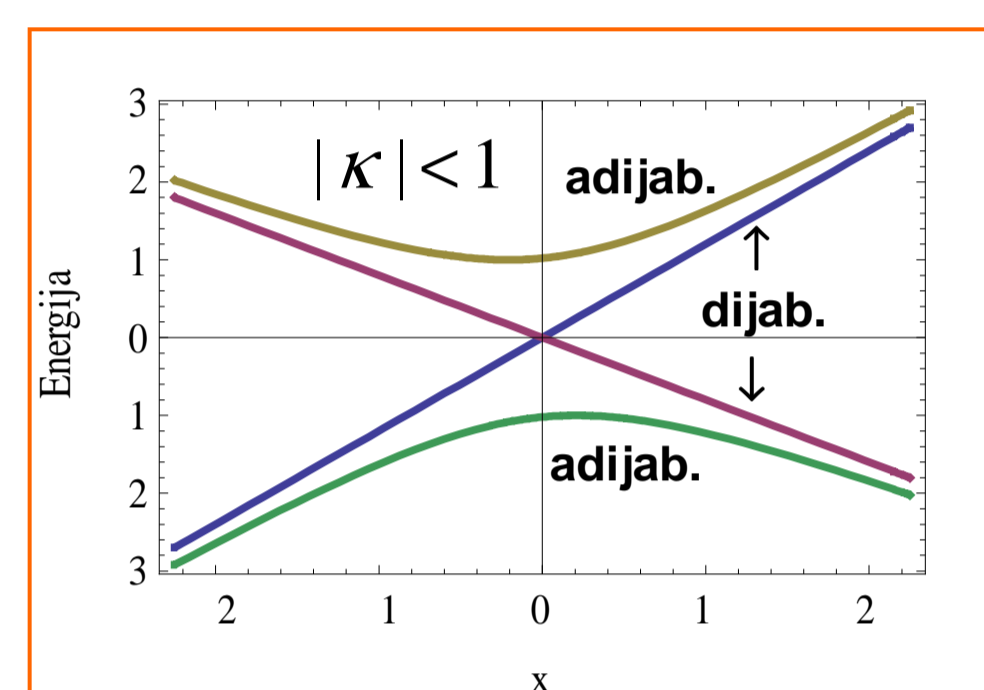
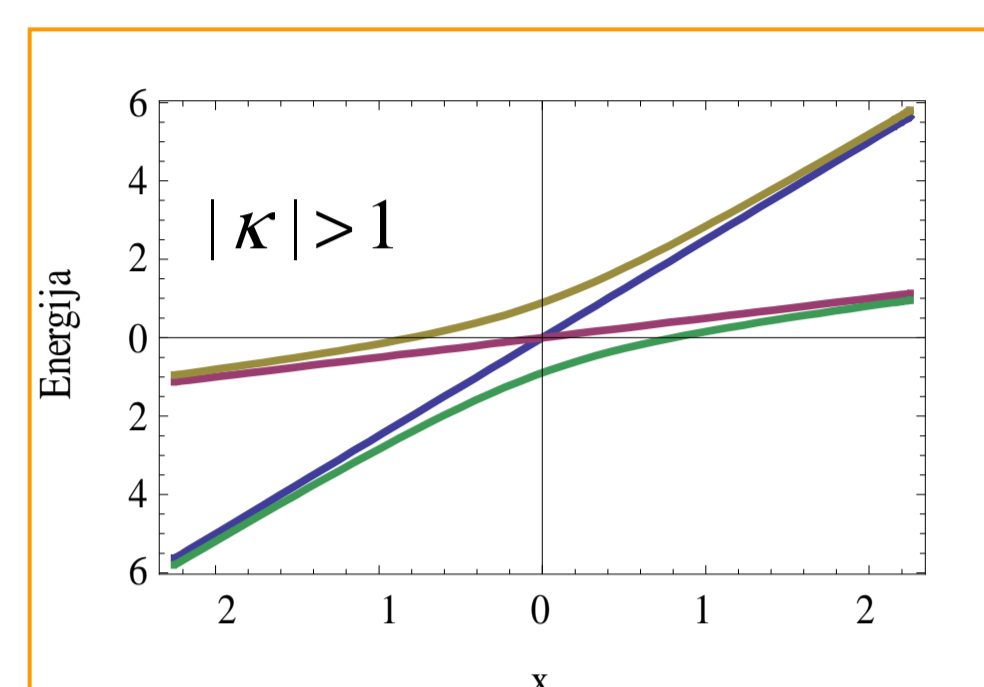
Poluklasično,

u okviru Landau-Zennerovog modela,

- uniformnom Airy aproksimacijom nekoherentno zbrojenih spektara prijelaza
- “coupled-channel” računom

## ZAŠTO:

Zna se.



$$\kappa = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{|\alpha_1 - \alpha_2|}$$

$\alpha_i$  su koeficijenti smjera dijabatskih diferentnih potencijala u presjecištu

Apsorpcijski koeficijent:

$$I(\omega) \propto \gamma \left[ \frac{\bar{d}_1^2}{|\kappa+1|} + \frac{\bar{d}_2^2}{|\kappa-1|} \right] L(\omega) + 2 \frac{\bar{d}_1 \cdot \bar{d}_2}{\sqrt{|\kappa^2-1|}} L_{\text{int}}(\omega)$$

Landau-Zennerov parametar:  $\gamma = \frac{V^2}{v|\alpha_2 - \alpha_1|}$

Vjerojatnost neradijativnog prijelaza između dvaju adijabatskih stanja:  $P = e^{-2\pi\gamma}$ ,  $0 \leq P \leq 1$

(1) Ako **zanemarimo** neradijativno miješanje:

• u **dijabatskoj** repr.  $\forall \kappa$ :  $L(\omega) = 1$ ,  $L_{\text{int}}(\omega) = 0$

• u **adijabatskoj** repr. za  $|\kappa| > 1$ :  $L(\omega) = 1$ ,  $L_{\text{int}}(\omega) = 0$  ali za  $|\kappa| < 1$ :

$$L(\omega) = H_+(\omega) + H_+(-\omega), \quad L_{\text{int}}(\omega) = H_-(\omega) - H_-(-\omega)$$

$$H_{\pm}(\omega) = \sqrt{\frac{|\omega+1|}{|\omega-1|}} [\zeta(\omega)]^{\frac{1}{2}} \{Ai[\zeta(\omega)]\}^2 \pm \sqrt{\frac{|\omega-1|}{|\omega+1|}} [\zeta(\omega)]^{\frac{1}{2}} \{Ai'[\zeta(\omega)]\}^2$$

$$\zeta(\omega) = \left( \frac{3}{4} \gamma \int_0^{\omega} \sqrt{x^2 - 1} dx \right)^{\frac{2}{3}}$$

(2) U “coupled-channel” računom uključeno je neradijativno miješanje dijabatskih stanja.

Za  $|\kappa| > 1$ :  $L(\omega) = 1$ ,  $L_{\text{int}}(\omega) = 0$

→ u okviru Landau-Zennerovog modela neradijativno miješanje ne utječe na oblik spektra.

Za  $|\kappa| < 1$ :

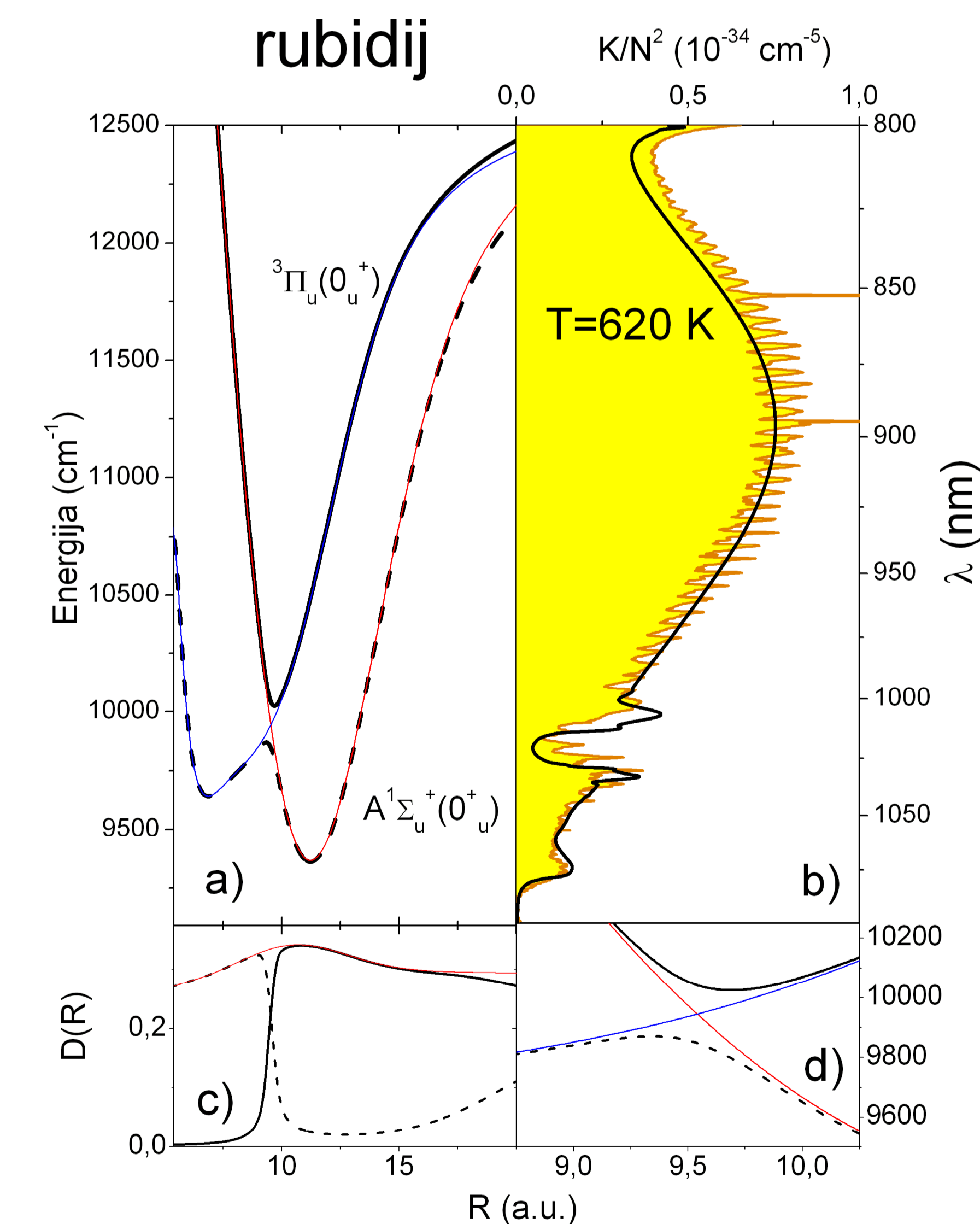
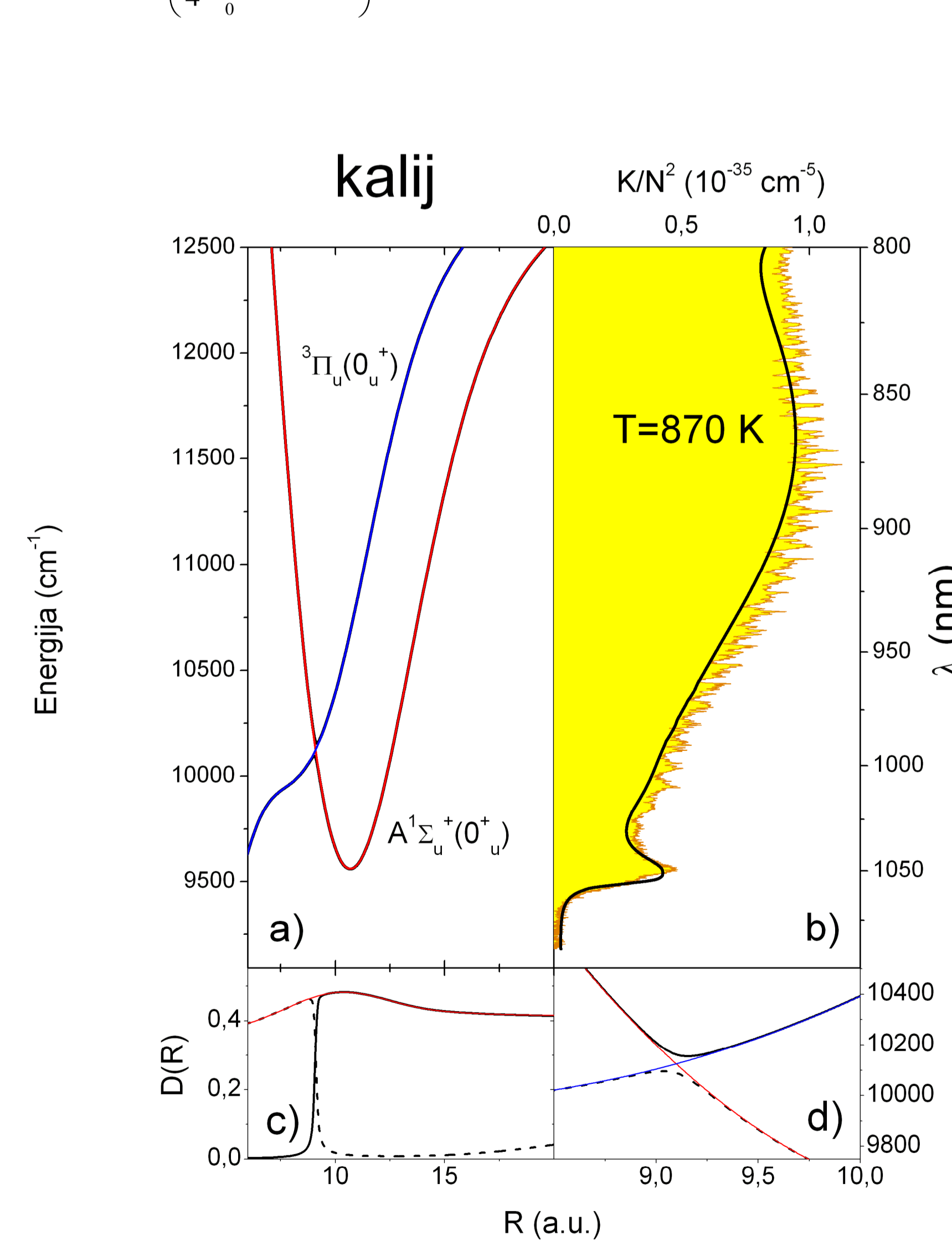
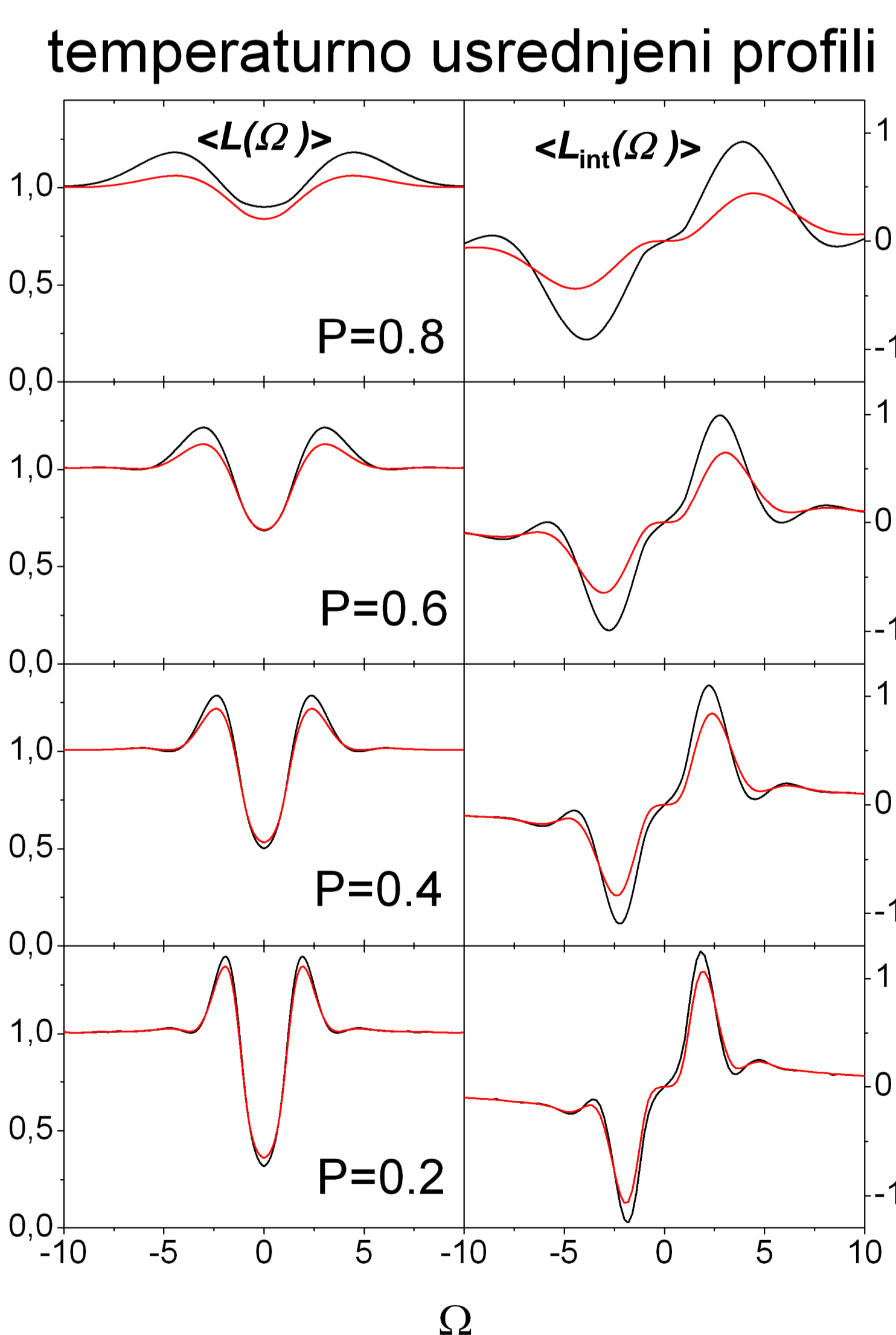
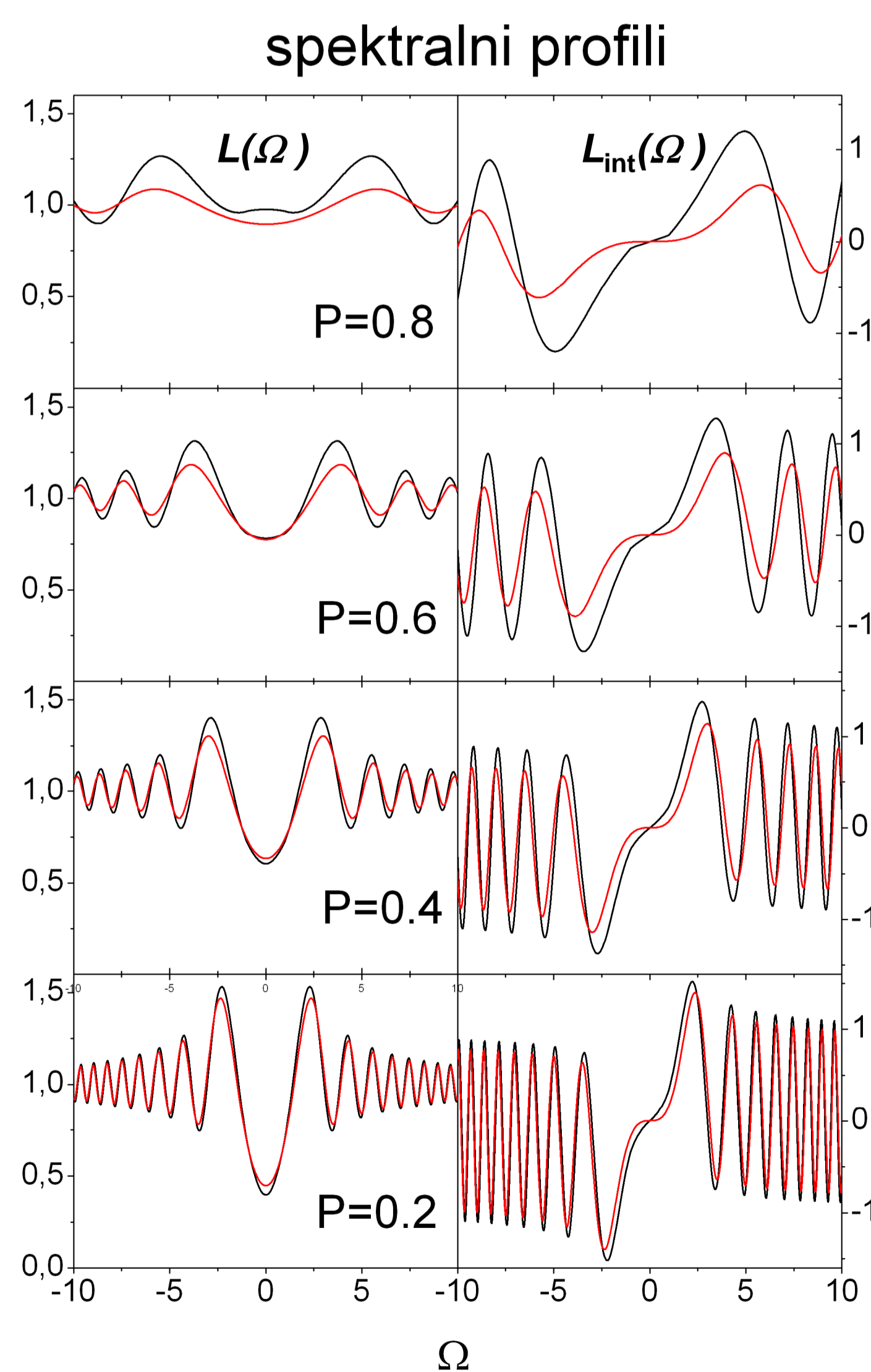
$$H_+(\omega) = \left| e^{-\frac{3\pi\gamma}{4}} D_{-i\gamma} \left( e^{-\frac{i\pi}{4}} 2\sqrt{\gamma\omega} \right) \right|^2 - \frac{P}{2}$$

$$H_-(\omega) = \text{Re} \left[ e^{-\frac{3\pi\gamma}{2}} e^{i\pi} D_{-i\gamma} \left( e^{-\frac{i\pi}{4}} 2\sqrt{\gamma\omega} \right) D_{-i\gamma-1}^* \left( e^{-\frac{i\pi}{4}} 2\sqrt{\gamma\omega} \right) \right]$$

Usporedba rezultata “coupled-channel” računom i uniformne Airy aproksimacije:

→ Učinak **neradijativnog miješanja** na oblik **apsorpcijskog** spektra je **zanemariv** i za  $|\kappa| < 1$  ako je vjerojatnost neradijativnog prijelaza između dvaju adijabatskih stanja “razumno mala”.

→ Učinak samog **izbjegnutog presijecanja** može biti znatan.



Spektralni profili  $L(\Omega)$  i  $L_{\text{int}}(\Omega)$  dobiveni **uniformnom Airy aproksimacijom** nekoherentno zbrojenih spektara prijelaza i “coupled-channel” računom, za nekoliko vrijednosti vjerojatnosti neradijativnog prijelaza između dvaju adijabatskih stanja

Usporedba teorijskih simulacija spektara dobivenih **uniformnom Airy aproksimacijom** s **eksperimentalnim** spektrima kalija na  $T = 870$  K [Č. Vadla & al., Eur. Phys. J. D 37 (2006) 37-49] i rubidija na  $T = 620$  K [R. Beuc & al., Phys. Rev. A 75 (2007) 032512]