

**Νέες μέθοδοι για την εύρεση θεμελιωδών χαρακτηριστικών της
αλληλεπίδρασης ατόμων και μορίων με ηλεκτρομαγνητικά πεδία**

Κ. Δημητρίου^{1,2}, Β. Κωνσταντούδης³, Θ. Μερκούρης², Γ. Κομνηνός², Ι. Φαμέλης⁴, Ζ. Αναστάσης⁵, Ν. Πιάγκος², Χ. Τσίτουρας⁶, Θ. Σίμος⁵, Γ. Παπαγεωργίου¹ και Κλ. Α. Νικολαΐδης^{1,2,*}

¹Τμήμα Φυσικής, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Τμήμα Φυσικής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα

²Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα

³Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Αθήνα

⁴Τμήμα Μαθηματικών, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, ΤΕΙ Αθηνών, Αθήνα

⁵Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υπολογιστών, Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Πανεπιστήμιο Πελοποννήσου, Τρίπολη

⁶Γενικό Τμήμα Θετικών Επιστημών, ΤΕΙ Χαλκίδας, Ψαχνά

*Τηλέφωνο: 210-7722923, Φαξ: 210-7273808, E-mail: caan@eie.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ: Στόχος του προγράμματος είναι η λύση μετωπικών προβλημάτων Φυσικής και Υπολογιστικών Μαθηματικών που προκύπτουν όταν μελετάται θεωρητικά η λύση εξισώσεων τύπου Schrödinger. Στη περίπτωση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger, οι εφαρμογές περιλαμβάνουν την ποσοτική κατανόηση των αποτελεσμάτων της αλληλεπίδρασης ισχυρών παλμών λέιζερ με άτομα και μόρια. Εδόθη έμφαση σε προβλήματα για πολλά σώματα και για πολυκαναλικά συνεχή φάσματα. Επί πλέον, για την μελέτη της πολυφωτονικής διάσπασης διατομικών μορίων, εφαρμόσαμε προηγμένες μεθόδους της Κλασικής Μηχανικής όπου προκύπτουν πολύπλοκα θέματα μη γραμμικής και χαοτικής μηχανικής, που πλέον διαφαίνεται ότι σχετίζονται με ορισμένα κβαντικά χαρακτηριστικά. Όσον αφορά την μελέτη θεμάτων μαθηματικών και αριθμητικής ανάλυσης, η προσπάθεια εστιάστηκε στην ανάπτυξη μεθόδων μεγάλης ακρίβειας στα πλαίσια των μεθοδολογιών μονοβηματικών τύπου Runge-Kutta-Nyström και διβηματικών τύπου υβριδικών-Numerov.

Λέξεις Κλειδιά: Εξίσωση Schrödinger, κβαντική μηχανική, κλασική μηχανική, πολυφωτονικός ιονισμός/διάσπαση.

ABSTRACT: The aim of the present project is to solve problems encountered in Physics and Computational Mathematics, which arise when we solve Schrödinger type equations. In the case of the time-dependent Schrödinger equation, we are interested in the quantitative understanding of phenomena resulting from the interaction of strong laser pulses with atoms and molecules. We focused on problems involving systems with many electrons and many open channels. In addition, for the study of molecular dissociation, we applied recent methods of classical nonlinear and chaotic dynamics. The obtained results showed that some quantum features are also predicted by Classical Mechanics. Regarding the mathematical and numerical analysis of the Schrödinger equation, we developed methods of Runge-Kutta-Nyström and Numerov type that aim at high accuracy.

Keywords: Schrödinger equation, Quantum Mechanics, Classical Mechanics, multiphoton ionization/dissociation.

Τα τελευταία χρόνια, η κατανόηση της αλληλεπίδρασης ισχυρών πεδίων λέιζερ με άτομα και μόρια αποτελεί πεδίο έρευνας πολύ έντονου επιστημονικού ενδιαφέροντος, ιδιαίτερα με την κατασκευή εξαιρετικά βραχύχρονων και ισχυρών παλμών λέιζερ [1]. Επιδίωξη είναι όχι μόνον να γίνουν κατανοητά ποσοτικά τα φαινόμενα που εμφανίζονται αλλά και να ελέγχεται η συμπεριφορά των ατόμων και μορίων συναρτήσει των παραμέτρων των παλμών λέιζερ, με προφανείς τεχνολογικές προεκτάσεις. Η προϋπόθεση για την λύση των σχετικών προβλημάτων είναι η θεωρία και η υπολογιστική μεθοδολογία να είναι μη διαταρακτική και να λαμβάνονται υπ' όψιν τα χαρακτηριστικά των παλμών αυτών. Για τον σκοπό αυτό εφαρμόσαμε προηγμένες μεθόδους της Κβαντικής (QM) και της Κλασικής (CM) μηχανικής, κι' επί πλέον νέες υπολογιστικές μεθόδους για την λύση εξισώσεων που συνδέονται με τέτοια προβλήματα.

Ως προς την QM, χρησιμοποιήσαμε δύο τρόπους για να υπολογισθούν και να εξηγηθούν η προβλεφθούν νέα φαινόμενα. Ο ένας απαιτεί την λύση της time-dependent Schrödinger equation (TDSE)

$$i \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = (H_0 + H_L(t)) \Psi(t) \quad (1)$$

όπου H_0 η Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου ατόμου/μορίου και $H_L(t)$ η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης του ατόμου/μορίου με έναν η περισσότερους παλμούς λέιζερ. Η επίλυση της TDSE πραγματοποιήθηκε με βάση την *State-Specific Expansion Approach* (SSEA) [2], αναπτύσσοντας την κυματοσυνάρτηση του συστήματος $\Psi(t)$ στη βάση των ιδιοκαταστάσεων του δέσμιου και του συνεχούς φάσματος του αδιατάρακτου ατόμου/μορίου (H_0) με συντελεστές εξαρτωμένων από τον χρόνο. Η αριθμητική επίλυση της TDSE απαιτείται όταν οι ισχυροί παλμοί λέιζερ είναι βραχύχρονοι. Ο άλλος τρόπος αφορά μακρόχρονους παλμούς λέιζερ και βασίζεται στην λύση της complex eigenvalue Schrödinger equation [3], όπου τα προβλήματα μετατρέπονται σε μη Ερμιτιανά και οι

I. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

μιαδικές λύσεις περιέχουν την πληροφορία για την ενέργεια και την δυναμική.

Ως προς την CM, επιλύσαμε αριθμητικά τις εξισώσεις κίνησης του Χάμιλτον για την περίπτωση όπου ένα διατομικό μόριο αλληλεπιδρά με έναν παλμό λέιζερ. Εφαρμόσαμε σύγχρονες μεθόδους από τον χώρο της μη γραμμικής-χαιτικής δυναμικής [4,5] για να εξηγήσουμε το φαινόμενο φωτοδιάσπασης διατομικού μορίου και πως αυτό εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά του παλμού. Σε συνδυασμό με τους νέους κβαντικούς υπολογισμούς που πραγματοποιήσαμε, επιτύχαμε μία βαθύτερη κατανόηση όσον αφορά την θεωρητική πρόβλεψη δυνατότητας ελέγχου της φωτοδιάσπασης καθώς και την πολύπτυχη σχέση μεταξύ QM και CM σε πραγματικά συστήματα.

Φαινόμενα που διερευνήσαμε με την βοήθεια των μεθόδων που αναπτύξαμε παρουσιάζονται στο δεύτερο μέρος του άρθρου και αφορούν:

- α) τον 'συμφωνο έλεγχο' (coherent control) του πολυφωτονικού ιονισμού,
- β) τον χρονοεξαρτώμενο σχηματισμό της κατατομής υψηλά διηγεμένων καταστάσεων από ολιγόχρονους παλμούς λέιζερ και
- γ) την πολυφωτονική διάσπαση διατομικών μορίων.

Το ενδιαφέρον δεδομένο είναι ότι, λόγω της δομής των σχετικών εξισώσεων και των μεγάλων υπολογιστικών απαιτήσεων, υπάρχουν ανοικτά προβλήματα υπολογιστικής-αριθμητικής φύσης και ότι τέτοια προβλήματα προκαλούν ενδιαφέρον σε μαθηματικούς εφαρμογών οι οποίοι μελετούν εξισώσεις τέτοιας ή παρόμοιας μορφής. Οι μέθοδοι που βελτιώθηκαν και εφαρμόστηκαν παρουσιάζονται στο τρίτο μέρος του άρθρου και είναι μονοβηματικές τύπου Runge-Kutta-Nyström και διβηματικές τύπου υβριδικές-Numerov

II. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

A. Σύμφωνος έλεγχος (coherent control) του πολυφωτονικού ιονισμού

Ασχοληθήκαμε με το πρόβλημα του συμφώνου ελέγχου (coherent control) του πολυφωτονικού ιονισμού του αρνητικού ιόντος του υδρογόνου (H^-) εντός πεδίου τριών μακρόχρονων παλμών λέιζερ. Αυτή η περίπτωση επιτρέπει την διατύπωση του προβλήματος σε μορφή που είναι ανεξάρτητη του χρόνου.

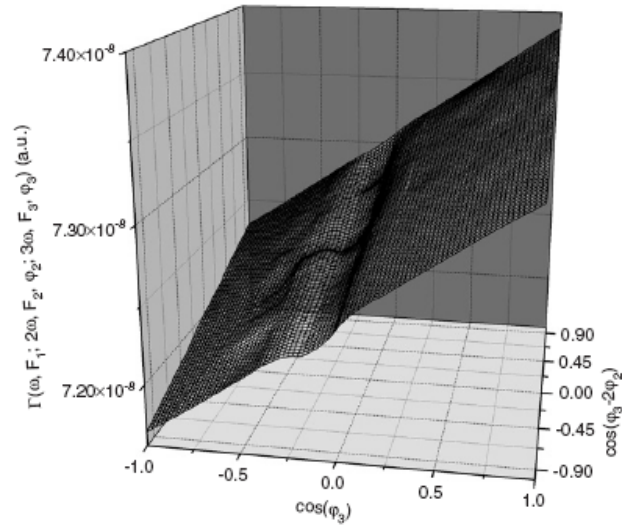
Οι σχετικές βασικές εξισώσεις που λύθηκαν σε μορφή ιδιοτιμών πινάκων, είναι εξισώσεις του Schrödinger με μιγαδικές ιδιοτιμές, $\zeta = \epsilon - i\Gamma/2$, οι οποίες είναι προϊόντα μη Ερμιτιανών κατασκευών, καταλλήλων για την περιγραφή καταστάσεων συντονισμού στο συνεχές φάσμα που προκύπτουν από τη θεωρία των μιγαδικών συντεταγμένων, γνωστή ως MEMPT (Many-Electron Many-Photon Theory, [3]). Οι ιδιοτιμές είναι συναρτήσεις των εντάσεων και των συχνοτήτων της ακτινοβολίας. Το Γ αντιστοιχεί στον

ρυθμό πολυφωτονικού ιονισμού του H^- και το ϵ περιέχει την πληροφορία για την επαγόμενη πόλωσή του.

Αποδείξαμε ότι ο πολυφωτονικός ρυθμός ιονισμού υπακούει σε απλούς κανόνες σαν συνάρτηση των φάσεων των τριών πεδίων των μακρόχρονων παλμών λέιζερ. Παραδείγματος χάριν, ο πολυφωτονικός ρυθμός ιονισμού (Γ) κυριαρχείται από τρεις όρους:

$$\Gamma(\omega_1 = \omega, F_1; \omega_2 = 2\omega, F_2, \phi_2; \omega_3 = 4\omega, F_3, \phi_3) \sim D + E \cos(2\phi_2) + F \cos(\phi_3 - \phi_2)$$

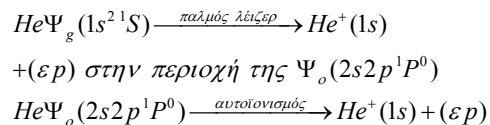
Προς επιβεβαίωση τούτου, στο Σχήμα 1 παραθέτουμε τα αποτελέσματα της MEMPT όπου δείχνεται η εξάρτηση του πολυφωτονικού ρυθμού ιονισμού του H^- από απλές τριγωνομετρικές συναρτήσεις των φάσεων ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 των τριών πεδίων λέιζερ (θεμελιώδης συχνότητα $\omega_1 = \omega = 0.272$ eV, $\omega_2 = 2\omega, \omega_3 = 3\omega$).



Σχήμα 1 – Πολυφωτονικός ρυθμός ιονισμού Γ (σε ατομικές μονάδες) του H^- 1S που αλληλεπιδρά με τρεις παλμούς λέιζερ εντάσεων $I_1=1.4 \times 10^7$ W/cm², $I_2=3.15 \times 10^7$ W/cm², $I_3=5.6 \times 10^7$ W/cm² (βλ. Κείμενο).

B. Χρονοεξαρτώμενος σχηματισμός της κατατομής (profile) υψηλά διηγεμένων καταστάσεων από ολιγόχρονους παλμούς λέιζερ

Σ' αυτήν την ερευνητική δραστηριότητα δίνουμε ακριβή αποτελέσματα για την ενέργεια και τον χρονοεξαρτώμενο σχηματισμό της κατατομής (profile) της διαφορικής πιθανότητας ιονισμού $P(\epsilon, t)$ της βασικής κατάστασης του He $1s^2$ 1S από την σύμφωνη διέγερση και διάσπαση της διπλά διηγεμένης κατάστασης He $2s2p$ $^1P^o$ που επάγεται από ένα ολιγόχρονο παλμό λέιζερ. Οι φυσικές διαδικασίες που εμπλέκονται στο πρόβλημα είναι:

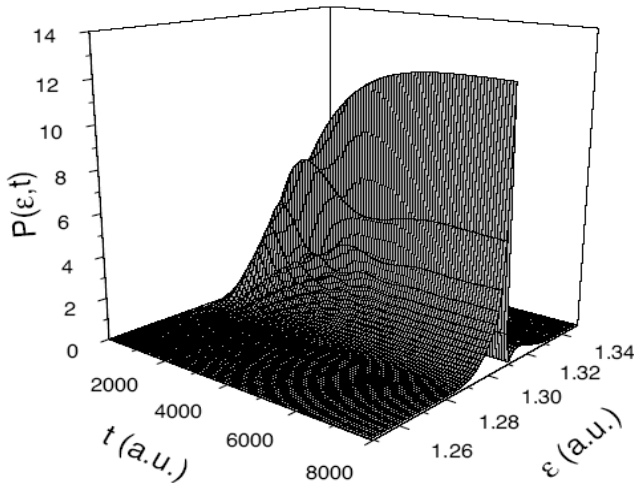


Τα αποτελέσματά μας, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν σε μελλοντικά πειράματα

φασματοσκοπίας σε πραγματικό χρόνο, που τα τελευταία χρόνια, με την δημιουργία παλμών λέιζερ διαρκείας μερικών εκατοντάδων attosecond βρίσκεται στο διεθνές επιστημονικό προσκήνιο [6].

Εφαρμόσαμε δύο γενικές μεθόδους. Η μία είναι αναλυτική, που χρησιμοποιεί την αλληλεπίδραση ηλεκτρονιακών διατάξεων στο συνεχές φάσμα, στο πλαίσιο της θεωρίας διαταραχών 1^{ης} τάξεως. Η άλλη είναι αριθμητική πέρα από την θεωρία διαταραχών, που χρησιμοποιεί την θεωρία μας της καθορισμένης κατάστασης για την λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger [2]. Η πολυηλεκτρονιακή δομή και συσχέτιση λαμβάνονται υπ' όψη δια της θεωρίας της καθορισμένης κατάστασης τόσο για την αρχική κατάσταση όσο και την κατάσταση συντονισμού και τις καταστάσεις του συνεχούς φάσματος. Τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων είναι σε πολύ καλή συμφωνία, με μία μικρή ποσοτική διαφωνία για μεγάλες εντάσεις του πεδίου του laser. Οι αναλυτικοί τύποι (βλ. εξίσωση 32 του άρθρου [6]), για μικρές εντάσεις πεδίου, δείχνουν με σαφήνεια και απλότητα την εξάρτηση της κατατομής από τα χαρακτηριστικά του παλμού του λέιζερ.

Στο παρακάτω τρισδιάστατο διάγραμμα δείχνεται η διαφορική πιθανότητα ιονισμού $P(\epsilon, t)$ για την διέγερση της κατάστασης συντονισμού $He\ 2s2p\ ^1P^0$ όπου ϵ είναι η ενέργεια πάνω από το κατώφλι ιονισμού, όπως υπολογίστηκε από την αριθμητική επίλυση της χρονο-εξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger. Όπως παρατηρούμε, προϊόντος του χρόνου σχηματίζεται το ασυμμετρικό προφίλ του Fano [7].



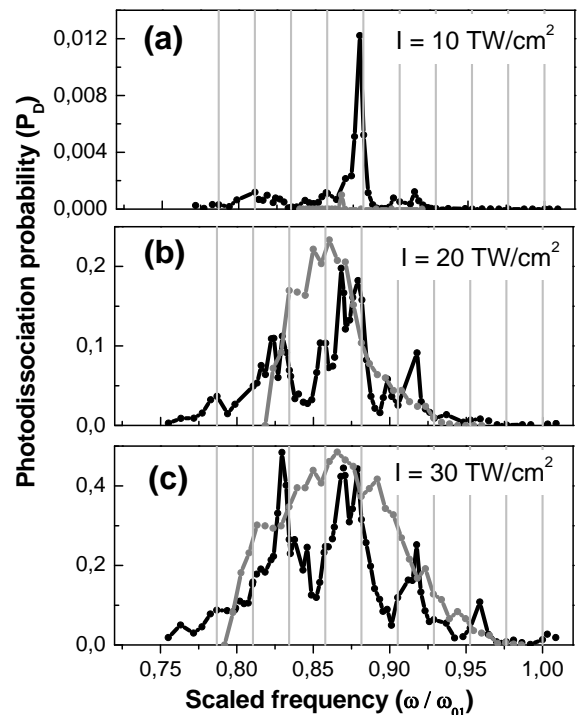
Σχήμα 2 – Διαφορική πιθανότητα ιονισμού $P(\epsilon, t)$ για την

διέγερση της κατάστασης συντονισμού $He\ 2s2p\ ^1P^0$ όπου ϵ είναι η ενέργεια πάνω από το κατώφλι ιονισμού. Ο παλμός λέιζερ έχει διάρκεια 11 fs και συχνότητα που αντιστοιχεί σε ενέργεια φωτονίου ίση με 60.21 eV.

Γ. Κβαντική και Κλασική μελέτη φωτοδιάσπασης διατομικού μορίου

Σε αυτή την κατεύθυνση του προγράμματος μελετήσαμε κβαντικά και κλασικά την διάσπαση του διατομικού μορίου του υδροφθορίου (HF) όταν αυτό αλληλεπιδρά με ισχυρούς παλμούς λέιζερ. Όσον αφορά την QM, επιλύσαμε την TDSE με βάση τη μέθοδο της SSEA για μοριακά συστήματα. Η κλασική μελέτη της φωτοδιάσπασης πραγματοποιήθηκε με βάση την αριθμητική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του Χάμιλτον. Επί πλέον, χρησιμοποιήσαμε αναπαραστάσεις στον κλασικό χώρο των φάσεων [4,5] προκειμένου να κατανοήσουμε βαθύτερα το φαινόμενο της φωτοδιάσπασης καθώς και πως αυτό εξαρτάται από τις παραμέτρους του λέιζερ.

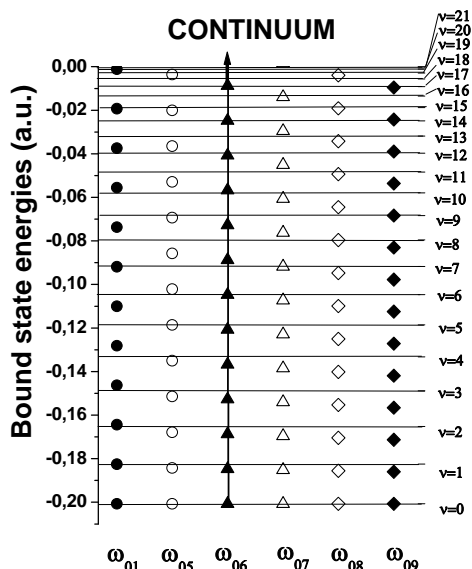
Στο σχήμα 3 παρουσιάζουμε την κβαντική και κλασική πιθανότητα διάσπασης συναρτήσει της συχνότητας του λέιζερ (ω), διαιρουμένης της συχνότητας $\omega_{01} = (E_1 - E_0)$ που αντιστοιχεί στη διαφορά ενέργειας μεταξύ της βασικής και πρώτης διεγερμένης δονητικής κατάστασης του μορίου, για τρεις διαφορετικές εντάσεις (I) του λέιζερ $I=10\ \text{TW}/\text{cm}^2$, $I=20\ \text{TW}/\text{cm}^2$ και $I=30\ \text{TW}/\text{cm}^2$. Παρατηρούμε ότι η κβαντική και η κλασική πιθανότητα φωτοδιάσπασης εμφανίζουν μέγιστο σε μία περιοχή συχνοτήτων μικρότερης της συχνότητας ω_{01} ($\omega \sim (0.8-0.9) \times \omega_{01}$). Ο κλασικός υπολογισμός προβλέπει αυτό το μέγιστο ακόμα και για την μικρότερη ένταση των $10\ \text{TW}/\text{cm}^2$ σε καλή συμφωνία με τον αντίστοιχο κβαντικό υπολογισμό. Σημειώνουμε ότι το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό και από προηγούμενους κβαντικούς και κλασικούς υπολογισμούς [4, 8], για υψηλές εντάσεις λέιζερ, χωρίς ωστόσο να έχει δοθεί μία πλήρης, ικανοποιητική εξήγηση.



Σχήμα 3 – Κβαντική (μαύρη γραμμή) και κλασική (γκρι γραμμή)

πιθανότητα φωτοδιάσπασης HF για τρεις διαφορετικές εντάσεις λέιζερ (α) $I=10$ TW/cm², (β) $I=20$ TW/cm² και (γ) $I=30$ TW/cm². Οι κάθετες γραμμές αντιστοιχούν στις συχνότητες ω/ω_0 , όπου $\omega_0=(E_v-E_0)/\hbar$ (βλ και Σχήμα 4).

Η κβαντική εξήγηση δίνεται στο σχήμα 4, όπου παρουσιάζουμε τις ενέργειες των δέσμιων δονητικών καταστάσεων του HF καθώς και τις πολυφωτονικές μεταβάσεις με ενδιάμεσους συντονισμούς. Το μέγιστο στην συχνότητα $\omega/\omega_0 \sim 0.88$ οφείλεται στο γεγονός ότι το μόριο απορροφώντας έξι φωτόνια μεταφέρεται στην διεγερμένη δονητική κατάσταση $v=6$, και μπορεί να διασπαστεί, αφού απορροφήσει άλλα επτά φωτόνια που ενδιάμεσως 'βηματίζουν' πολύ κοντά στις υψηλά διεγερμένες δονητικές καταστάσεις. Με παρόμοιο συλλογισμό εξηγείται και το μέγιστο που εμφανίζεται στη συχνότητα $\omega/\omega_0 \sim 0.83$ για ένταση του λέιζερ $I=30$ TW/cm². Ωστόσο, το μέγιστο αυτό είναι εμφανές μόνο σε μεγάλες εντάσεις λόγω του γεγονότος ότι απαιτούνται οκτώ φωτόνια για να μεταφερθεί το σύστημα από την βασική στην $v=8$ δονητική κατάσταση του μορίου, δηλαδή είναι μια πολυφωτονική διαδικασία υψηλής τάξης.

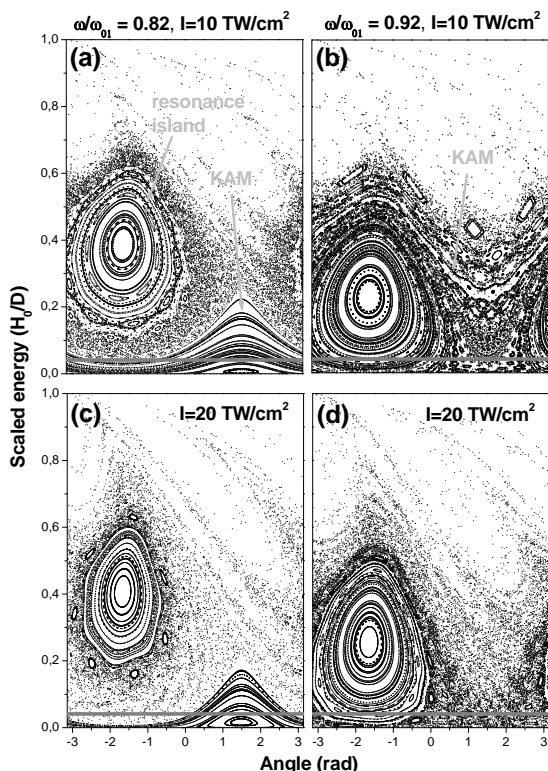


Σχήμα 4 – Ενέργειες δέσμιων καταστάσεων του αδιατάρακτου μορίου του HF και πολυφωτονικές με ενδιάμεσους συντονισμούς.

Προκειμένου να εμβαθύνουμε στην εξήγηση της κλασικής φωτοδιάσπασης μελετήσαμε τις τροχιές στον χώρο των φάσεων, στην αναπαράσταση ενέργειας H_0/D (H_0 η Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου μορίου HF και D η ενέργεια διάσπασής του) και γωνίας (θ), όπου θ ορίζεται αναλυτικά από την ενέργεια, τη θέση και την ορμή του μορίου [4]. Στο σχήμα 5 παρουσιάζουμε στροβισκοπικά γραφήματα για εντάσεις $I=10, 20$ TW/cm² και για δύο διαφορετικές συχνότητες $\omega/\omega_0=0.82, 0.92$. Η αρχική ενέργεια του μορίου παριστάνεται στο σχήμα με γκρι γραμμή. Για συχνότητα $\omega/\omega_0=0.82$ και ένταση $I=10$ TW/cm² παρατηρούμε ότι όλη η αρχική κλασική κατάσταση βρίσκεται παγιδευμένη στους τόρους KAM (Kolmogorof-Arnold-Moser), περιοδικές τροχιές που δεν διαφεύγουν στο

άπειρο, και επομένως η πιθανότητα διάσπασης είναι μηδέν, όπως επιβεβαιώνεται και στο σχήμα 3(a). Καθώς η ένταση μεγαλώνει (σχήμα 5(c)) οι KAM τόροι συρρικνώνονται και ένα μέρος της αρχικής κατάστασης βρίσκεται μέσα στη θάλασσα των χαοτικών τροχιών, που σημαίνει ότι οι τροχιές αυτές οδηγούν στη διάσπαση του μορίου. Σε υψηλότερες συχνότητες, για παράδειγμα $\omega/\omega_0=0.92$, η εξήγηση είναι διαφορετική. Σε μικρές εντάσεις (σχήμα 5(b)), το μεγαλύτερο μέρος της αρχικής κατάστασης εμφανίζεται μέσα στην περιοχή νησίδας συντονισμού (resonance island). Ωστόσο, εμφανίζεται ένας ακόμα μηχανισμός σταθεροποίησης του μορίου στις υψηλές συχνότητες. Ένα μέρος της αρχικής κατάστασης, αν και εμφανίζεται μέσα στην θάλασσα χαοτικών τροχιών, δεν θα καταλήξει σε διάσπαση του μορίου, λόγω της ύπαρξης τόρων KAM που επιβιώνουν σε υψηλότερες ενέργειες. Σε μεγαλύτερες εντάσεις (σχήμα 5(d)) οι τόροι αυτοί έχουν καταστραφεί με αποτέλεσμα το μόριο να μπορεί να διασπαστεί. Η παραπάνω επιχειρηματολογία εξηγεί την διαπλάτωση της καμπύλης της κλασικής φωτοδιάσπασης συναρτήσει της συχνότητας λέιζερ, καθώς η ένταση του λέιζερ αυξάνει (βλ. Σχήμα 3).

Ολοκληρώνοντας, συμπεραίνουμε ότι το κλασικό μοντέλο είναι ικανό να προβλέψει τα γενικά χαρακτηριστικά της καμπύλης της κβαντικής φωτοδιάσπασης του HF συναρτήσει της συχνότητας λέιζερ, αφού και οι δύο μέθοδοι προβλέπουν ότι η φωτοδιάσπαση του HF μεγιστοποιείται σε μία περιοχή συχνοτήτων λέιζερ μικρότερης της ω_0 . Τα αποτελέσματα αυτής της έρευνας έχουν σταλεί προς δημοσίευση [9].



Σχήμα 5 – Στροβοσκοπικά γραφήματα για τέσσερις διαφορετικές τιμές των παραμέτρων λέιζερ (a) $I=10 \text{ TW/cm}^2$, $\omega/\omega_0=0.82$, (b) $I=10 \text{ TW/cm}^2$, $\omega/\omega_0=0.92$, (c) $I=20 \text{ TW/cm}^2$, $\omega/\omega_0=0.82$, (d) $I=20 \text{ TW/cm}^2$, $\omega/\omega_0=0.92$.

III. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΤΟΥ SCHRÖDINGER

Στην ενότητα II παρουσιάσαμε αποτελέσματα για ατομικά και μοριακά συστήματα που αλληλεπιδρούν με ισχυρούς παλμούς λέιζερ. Στην περίπτωση που τα πεδία είναι πολύ ισχυρά ο αριθμός των εξισώσεων φθάνει την τάξη των εκατοντάδων χιλιάδων, γεγονός που καθιστά την μέθοδο λύσης (ανάπτυξη σε σειρά Taylor [2]) ασταθή λόγω συσσωρευμένου σφάλματος και επομένως, υπάρχει η ανάγκη για μαθηματική διερεύνηση του θέματος. Οι μέθοδοι που βελτιώθηκαν και εφαρμόστηκαν είναι Α) μονοβηματικές τύπου Runge-Kutta-Nyström και Β) διβηματικές τύπου υβριδικές-Numeron.

A. Μονοβηματική μέθοδος τύπου Runge-Kutta-Nyström

Η εξίσωση ιδιοτιμών του Schrödinger για την Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου συστήματος (H_0) που προκύπτει από την TDSE (1) όταν ο όρος αλληλεπίδρασης λέιζερ-ατόμου/μορίου είναι μηδέν ($H_I(t)=0$) και όταν το πρόβλημα μπορεί να αναχθεί σε πρόβλημα ενός σώματος μέσα σε δυναμικό, δίνεται από την σχέση

$$y''(x) = \left(\frac{l(l+1)}{x^2} + V(x) - E \right) y(x) \quad (2)$$

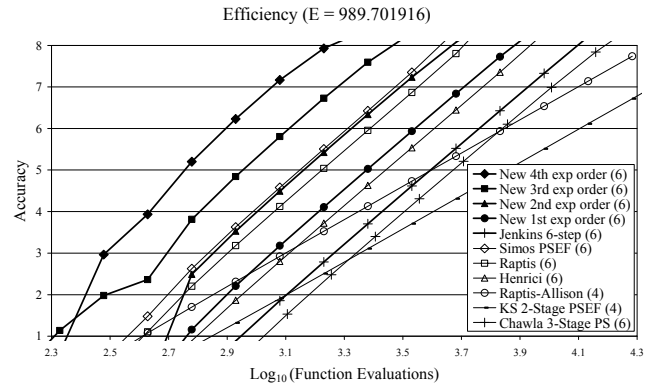
Παραγάγαμε μια οικογένεια τεσσάρων συμμετρικών μεθόδων έξι βημάτων με έκτη αλγεβρική τάξη και εκθετική τάξη από ένα έως τέσσερα. Οι τέσσερις μέθοδοι ολοκληρώνουν ακριβώς τις συναρτήσεις $\{1, x, \dots, x^7, e^{l\omega x}, \dots, x^{p-1} e^{l\omega x}\}$, $p = 1(1)4$, όπου το p εκφράζει την εκθετική τάξη της μεθόδου [10]. Οι παραγόμενες μέθοδοι διατηρούν την έκτη αλγεβρική τάξη, αυξάνουν όμως την εκθετική, που με χρήση φανταστικής συχνότητας μετατρέπουν τη μέθοδο σε τριγωνομετρικά προσαρμοσμένη μέθοδο. Οι μέθοδοι αυτού του τύπου είναι ιδιαίτερα αποδοτικές σε διαφορικές εξισώσεις με λύση ταλαντωτικής μορφής, όπως η εξίσωση Schrödinger, επιπλέον όμως παρουσιάζουν ένα επιπλέον πλεονέκτημα που σχετίζεται με την ενέργεια E .

Αν κάνουμε την ανάλυση του τοπικού σφάλματος αποκοπής, τότε παρατηρούμε ότι η μέγιστη δύναμη της ενέργειας στο συντελεστή του h^8 είναι E^4 για την αντίστοιχη κλασική μέθοδο, E^3 (1^{ns} εκθετικής τάξης), E^2 (2^{ns} και 3^{ns}) και E (4^{ns}). Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό συμπέρασμα, γιατί όταν χρησιμοποιούμε μεγάλη τιμή για την ενέργεια, η χαμηλή δύναμή της στον κυρίαρχο όρο του σφάλματος συνεπάγεται μικρότερο σφάλμα. Προβλέπουμε δηλαδή ότι αύξηση της εκθετικής

τάξης της μεθόδου συντελεί στην αύξηση της αποδοτικότητάς της.

Πράγματι κατά την ολοκλήρωση της εξίσωσης στο πρόβλημα του συντονισμού με χρήση του δυναμικού Woods-Saxon η προηγούμενη πρόβλεψη επιβεβαιώνεται. Ολοκληρώνουμε την εξίσωση Schrödinger για συγκεκριμένες τιμές ενέργειας (ιδιοτιμές) για τις οποίες γνωρίζουμε την αναλυτική τους λύση (ίση με $\pi/2$) και τις συγκρίνουμε με την αντίστοιχη αριθμητική λύση. Συμπεραίνουμε την αύξηση της αποδοτικότητας της μεθόδου καθώς η εκθετική τάξη αυξάνει, ιδίως για μεγάλες τιμές ενέργειας.

Στο Σχήμα 6 συγκρίνουμε τα αποτελέσματα των νέων μεθόδων με τα αντίστοιχα των κλασικών συμμετρικών μεθόδων έξι βημάτων [11], καθώς και μια ομάδα πρόσφατα κατασκευασμένων συμμετρικών μεθόδων τριγωνομετρικά προσαρμοσμένων [12]-[17]. Το τελικό συμπέρασμα είναι ότι η νέα μέθοδος τέταρτης εκθετικής τάξης παρουσιάζει την υψηλότερη αποδοτικότητα από όλες τις εξεταζόμενες μεθόδους, κάτι που αναδεικνύει τη σημασία της εκθετικής προσαρμογής υψηλής τάξης για την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger.



Σχήμα 6 – Ακρίβεια μεθόδου προς συναρτησιακούς υπολογισμούς.

B. Διβηματικές μέθοδοι τύπου Numeron.

Στα πλαίσια της έρευνας μας ασχοληθήκαμε με την κατασκευή υβριδικών διβηματικών μεθόδων τύπου Numeron που συχνά χρησιμοποιούνται στην αριθμητική επίλυση της TDSE. Με βάση τις νέες μεθοδολογίες κατασκευής τους που έχουν αναπτυχθεί στη βιβλιογραφία [18, 19] και αναπτύχθηκε συμβολικό λογισμικό για την παραγωγή των εξισώσεων τάξης και των όρων του τοπικού σφάλματος αποκοπής για διβηματικές μεθόδους τύπου Numeron.

Μία τέτοια s βημάτων μέθοδος σε διανυσματική μορφή μπορεί να γραφεί με την ακόλουθη μορφή:

$$U^{[k+1]} = 2U^{[k]} - U^{[k-1]} + \lambda^2 \cdot (b^T \otimes I_s) \cdot f(Y) \quad (3)$$

$$Y = (e+c) \otimes U^{[k]} - c \otimes U^{[k-1]} + \lambda^2 \cdot (A \otimes I_s) \cdot f(Y)$$

όπου λ είναι το βήμα στο χρόνο, $e = [111\cdots 1]^T \in \mathbb{R}^S$ και $I_s \in \mathbb{R}^{S \times S}$ μοναδιαίος. Οι συντελεστές της μεθόδου καθορίζεται από τον πίνακα $A \in \mathbb{R}^{S \times S}$ και τα διανύσματα $b, c \in \mathbb{R}^S$. Στην περίπτωση που $a_{ij} = 0, i \geq j$ η μέθοδος είναι άμεση. Για μία έξι σταδίων μέθοδο έχουμε πίνακες της μορφής:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 & 0 & 0 \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & 0 & 0 \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & 0 \end{bmatrix}, \quad b = [b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6], \quad (4)$$

$$c = [-1, 0, c_3, c_4, c_5, c_6].$$

Για τον καθορισμό των συντελεστών της μεθόδου αναπτύσσουμε τα αντίστοιχα αναπτύγματα Taylor της θεωρητικής και της αριθμητικής λύσης και τα αφαιρούμε. Αυτό οδηγεί σε εκφράσεις της μορφής

$$q_{1,1}F_{1,1}\lambda + q_{2,1}F_{2,1}\lambda^2 + q_{3,1}F_{3,1}\lambda^3 + \cdots + (q_{7,1}F_{7,1} + \cdots + q_{7,10}F_{7,10})\lambda^7 \quad (5)$$

$$+ (q_{8,1}F_{8,1} + \cdots + q_{8,21}F_{8,20})\lambda^8 + O(\lambda^9)$$

Τα διάφορα F_{ij} είναι εκφράσεις στοιχειωδών διαφορικών και τα q_{ij} εκφράσεις που εμπλέκουν τους συντελεστές της μεθόδου της μορφής

$$q_{11} = be - 1, \quad q_{21} = bc, \quad \dots, q_{42} = bAc, \dots \quad (6)$$

Για να είναι μία μέθοδος έβδομης τάξης πρέπει να μηδενίζονται όλοι οι όροι στην έκφραση (5) μέχρι το λ^8 . Έτσι μηδενίζοντας τα αντίστοιχα 43 συνολικά q_{ij} έχουμε να λύσουμε τις εξισώσεις τάξης ως προς τους συντελεστές της μεθόδου. Οι εξισώσεις αυτές μπορούν να μειωθούν εάν ικανοποιήσουμε απλοποιητικές παραδοχές της μορφής

$$Ae = \frac{1}{2}(c^2 + c). \quad (7)$$

Η μεθοδολογία κατασκευής του συμβολικού λογισμικού που βασίζεται σε θεωρία γράφων, την συνδυαστική ανάλυση και τις τεχνικές συμβολικού προγραμματισμού. Το έργο στις διάφορες φάσεις του παρουσιάστηκε σε ένα συνέδριο [20] και η ερευνητική εργασία που προέκυψε έχει σταλεί σε διεθνές περιοδικό [21]. Ο κώδικας μπορεί να βρεθεί στην ιστοσελίδα <http://math.teiath.gr/ifamelis/ipapers.html> μαζί με πρακτικά παραδείγματα χρήσης του.

IV. ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Το έργο αυτό συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο (75%) και από Εθνικούς πόρους (25%) – Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Εκπαίδευσης και Αρχικής Επαγγελματικής Κατάρτισης (ΕΠΕΑΕΚ) και ειδικότερα από το πρόγραμμα ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ.

V. ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] “Time-resolved atomic inner-shell spectroscopy”, M. Drescher, M. Hentschel, R. Kienberger, M. Uiberacker, V. Yaklovlev, A. Scrinzi, Th. Westerwalbesloh, U. Kleineberg, U. Heinzmann and F. Krausz, Nature, Vol. 419, October 2002, pp. 803-807.
- [2] “Computation of strong-field multiphoton processes in polyelectronic atoms: State-specific method and applications to H and Li”, T. Mercouris, Y. Komninos, S. Dionissopoulou and C. A. Nicolaides, Phys. Rev. A, Vol. 50, November 1994, pp. 4109-4121.
- [3] “Controllable surfaces of path interference in the multiphoton ionization of atoms by a weak trichromatic field”, T. Mercouris and C. A. Nicolaides, J. Opt. B, Vol. 7, September 2005, pp. S403-S407.
- [4] “Nonhyperbolic escape and changes in phase-space stability structures in laser-induced multiphoton dissociation of a diatomic molecule”, V. Constantoudis and C. A. Nicolaides, Phys. Rev. A., Vol 64, October 2001, pp 562111-562116.
- [5] “Stabilization and relative phase effects in bichromatically driven diatomic Morse molecule: Interpretation based on nonlinear classical dynamics”, V. Constantoudis and C. A. Nicolaides,, J. Chem. Phys, Vol 122, February 2005, pp 841181-841188.
- [6] “Time-dependent formation of the profile of the He 2s2p $^1P^0$ state excited by short laser pulse”, T. Mercouris, Y. Komninos and C. A. Nicolaides, Phys. Rev. A., Vol 75, January 2007, pp 1340701-1340710.
- [7] “Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts”, U. Fano, Phys. Rev., Vol 124, July 1961, pp. 1866-1878.
- [8] “Laser-induced dissociation of hydrogen fluoride“, A.Guldberg and G. D. Billing,, Chem. Phys. Lett., Vol 186, November 1991, pp. 229-237.
- [9] “Quantum and classical dynamics of a diatomic molecule in laser fields with frequency in the region producing maximum dissociation”, K.I. Dimitriou, V. Constantoudis, Th. Mercouris, Y. Komninos and C. A. Nicolaides, submitted.
- [10] “Chebyshevian multistep methods for Ordinary Differential Equations”, T. Lyche, Num. Math., Vol. 19, 1972, pp. 65-75
- [11] <http://www.burtleburtle.net/bob/math/multistep.html>
- [12] “A Numerov-type method with minimal phase-lag for the integration of second order periodic initial-value problems. II. Explicit method“, M.M. Chawla and P.S. Rao, J.Comput. Appl. Math., Vol 15, 1986, pp. 329
- [13] Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations P. Henrici, , John Wiley and Sons, New York, USA, 1962.
- [14] “Exponentially-fitted solutions of the eigenvalue Schrödinger equation with automatic error control A.D. Raptis, Computer Physics Communications, Vol. 28, 1983, pp. 427.
- [15] “Exponential-fitting methods for the numerical solution of the Schrödinger equation” D. Raptis and A.C. Allison, Computer Physics Communications, Vol. 14, 1978, pp. 1.
- [16] “A P-stable exponentially-fitted method for the numerical integration of the Schrodinger equation, T.E. Simos, Molecular Simulation, 31, 14-15, 1095-1100 (2005).
- [17] “A P-stable exponentially-fitted method for the numerical integration of the Schrodinger equation”, Z. Kalogiratou and T.E. Simos, Applied Mathematics and Computation, Vol. 112, 2000, pp. 99-112.
- [18] “Explicit Numerov type methods for second order IVPs with oscillating solutions”, G. Papageorgiou, Ch. Tsitouras and I. Th. Famelis, Int. J. Mod. Phys. C, Vol. 12 2001, 657-666.
- [19] “Explicit Numerov type methods with reduced number of stages”, Ch. Tsitouras, Comput. Math. Appl., Vol. 43 2002, pp. 943-949.
- [20] Famelis Th., Tsitouras Ch., “Symbolic Derivation of Order Conditions for ODE solvers”, N. A. Biennial Conference Dundee, Great Britain, 29 June - 1 July 2005.

- [21] “Symbolic Derivation of Order Conditions for Hybrid-Numerov-type methods solving”, Th.Famelis, Ch Tsitouras., submitted.