



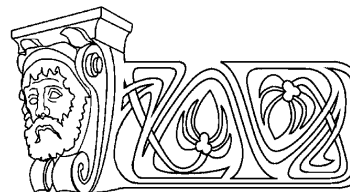
УДК 538.3:51

О ДИФФУЗИОННОЙ ДИССОЦИАЦИИ АТОМНЫХ И СУБАТОМНЫХ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНО СВЯЗАННЫХ ЧАСТИЦ

А.Г. Лавкин, М.Б. Мысенко, И.Н. Антонов*

Саратовский государственный университет
E-mail: tmf@sgu.ru

* Саратовский государственный технический университет



В данной работе численно показано, что скорость диффузионной диссоциации системы нелинейно связанных частиц (типа молекулы HCl) в поле лазерного излучения имеет пороговую зависимость от интенсивности излучения, начальной энергии колебаний и вращения молекулы и уменьшается по мере перехода от линейной поляризации излучения к циркулярной.

Ключевые слова: диффузионная диссоциация, система нелинейно связанных частиц, интенсивность лазерного излучения, энергия колебаний и вращения, переход от линейной поляризации излучения к циркулярной.

On Diffusive Dissociation of the Non-linear Coupled Particles of Atomic and Subatomic Systems

A.G. Lavkin, M.B. Mysenko, I.N. Antonov

In the given work it is numerically shown, that the nonlinear coupled particle systems (type of the HCl molecule) diffusive dissociation rate has the threshold dependence on the laser radiation intensity, the vibrate and rotate particles system energy and decreases in process of transition from linear polarization of radiation to the circular.

Key words: diffusive dissociation, nonlinear coupled particle system, laser radiation intensity, vibrate and rotate energy, transition from linear polarization of radiation to the circular.

Наиболее обстоятельно диффузионная модель возбуждения и развала систем нелинейно связанных частиц во внешнем поле изучена теоретически и экспериментально в случае высоковозбужденного атома водорода в сильном СВЧ поле, исследовались также тяжелые атомы во внешних полях [1]. «Приготовленный» в высоковозбужденном состоянии ($n > 30$) атом водорода подчиняется законам классической механики. В достаточно сильном электромагнитном поле (с частотой ω) нелинейные колебания электрона становятся хаотическими, что приводит к диффузионной ионизации атома водорода. При этом электрон набирает энергию постепенно – через большое число актов поглощения и излучения фотонов, и время ионизации атома существенно (на два–три порядка) превышает период обращения электрона по невозмущенной орбите. Вероятность диффузионной ионизации резко возрастает, если

поле достигает критической величины $E_c = \Omega_n / (\omega n^4)$, где $\Omega_n = n^{-3}$ – частота обращения электрона. При дальнейшем увеличении интенсивности поля экспериментально наблюдается стабилизация и даже подавление вероятности ионизации. Ряд моделей этого эффекта обсуждается в работах [2, 3]. Величина E_c зависит от частоты, поляризации электромагнитного поля, а также от внешнего квазистатического магнитного поля, тепловых флуктуаций [4]. E_c минимально при $\omega = \Omega_n$. Имеющиеся аналитические и наши численные оценки указывают на отсутствие влияния электрического поля на вероятность диффузионной ионизации (см., например, [5]) и стабилизацию магнитным полем системы связанных частиц от развала. Причина указанной стабилизации состоит в «закручивании» сильным магнитным полем траектории заряженной частицы, а это увеличивает время «огибания» или «туннелирования» частицей потенциального барьера соответственно в классическом или квантовом подходах [6].

При $\omega \ll \Omega_n$ хаотическая ионизация исчезающе мала и преобладает туннельная ионизация. Хаотическая ионизация исчезает и при $\omega \gg \Omega_n$, в этом пределе улучшаются условия применимости теории возмущений, т.е. условия использования многофотонного предела. Туннельная и многофотонная ионизации, в отличие от диффузионной, происходят приблизительно за время одного оборота электрона по невозмущенной орбите.

Аналогичные явления возможны и в случае молекул в поле интенсивного ИК лазерного излучения. Однако прямые экспериментальные данные для этого случая отсутствуют [7]. Что касается молекул, находящихся в высоковозбужденном электронном



состоянии, то не вызывает сомнений, что к ним в полной мере относится сказанное выше относительно высоковозбужденных атомов.

В случае молекул, возбужденных в высокие колебательные состояния [8], наиболее доступна для теоретического исследования двухатомная молекула в поле ИК излучения. При циркулярной поляризации излучения в двухатомной молекуле реализуется режим изолированного нелинейного резонанса, и динамика молекулы имеет регулярный характер [9]. Принципиально иной становится динамика молекулы при линейной поляризации излучения. В этом случае в системе реализуется режим взаимодействующих нелинейных резонансов, и имеет место квазислучайное изменение поляризации молекулы во времени, что приводит к квазинепрерывному спектру собственного излучения.

Диффузионный механизм диссоциации многоатомных молекул возможен при пороговой интенсивности ИК излучения $\geq 10^9$ Вт/см². Для двухатомных молекул требуется более интенсивное импульсное ИК излучение $\geq 10^{13}$ Вт/см² длительностью ≥ 1 пс, что в принципе достижимо при фокусировке излучения импульсных лазеров.

Отметим, что с развитием техники гамма-лазеров, по-видимому, реальны эксперименты по образованию из вакуума пар легчайших частиц – электронов и позитронов (здесь интересна аналогия с фотообразованием пар «электрон–дырка» в полупроводниках) [6], катализу ядерных реакций, в том числе и диффузионной «диссоциации» ядер [10]. Соответствующие оценки также сделаны в данной работе ($\lambda \sim 0,1$ нм, $\tau \sim 80$ пс).

Родственность диффузионного механизма диссоциации молекул в поле лазерного излучения с явлением «термализации» нелинейной струны и другими хаотическими эффектами неоднократно подчеркивалась в литературе (см., например, [8]). В данной работе сделана оценка пороговой интенсивности I лазерного излучения, ведущей к межмодовой (диффузионной) передаче энергии и в конечном счете к диффузионной диссоциации молекулы:

Молекула	COS	CCl ₄	OsO ₄	SF ₆	BCl ₃
$I, \text{Вт/см}^2$	10^{12}	10^{10}	10^9	$3 \cdot 10^8$	10^8

Эти оценки согласуются с экспериментом: при $I \leq 10^9$ Вт/см² наблюдалась диссоциация молекул OsO₄, SF₆, BCl₃, тогда как другие указанные выше молекулы не диссоциировали. Рассматриваемый механизм диссоциации является «классически разрешенным», но из-за квантовых («туннельных») эффектов пороговое значение I может быть ниже. Например, для молекулы SF₆ экспериментальная величина I на порядок меньше. Более точные оценки пороговой интенсивности I выполнить не удастся, так как отсутствует необходимая для этого подробная спектральная информация. В работе [8] также приведено качественное объяснение механизма неограниченного набора энергии молекулой. Воздействие на данную моду со стороны других мод сбивает нерегулярно ее фазу. Это эквивалентно воздействию на нелинейную систему случайной внешней силы, а здесь накачка энергии в моду очевидна.

В работе [9] численно-аналитически исследовалась динамика двухатомной молекулы типа GeO в циркулярно и линейно-поляризованном ИК излучении высокой интенсивности $10^{10} \div 10^{11}$ Вт/см² с учетом вращения молекулы. В случае циркулярно поляризованного излучения проанализирован спектр квазиэнергии молекулы. Было показано, что при линейно-поляризованном излучении имеет место хаос в динамике молекулы. В частности, изменение поляризации молекулы со временем носит квазислучайный характер, что приводит к квазинепрерывному спектру собственного излучения молекулы.

Ограниченностью известных работ является то, что в них рассматриваются лишь малые, по сравнению с межатомным взаимодействием, энергии колебаний и вращения молекулы (малые квантовые числа). В данной работе исследуется на примере двухатомной молекулы (типа хлористого водорода HCl) зависимость скорости диффузионной диссоциации молекулы от интенсивности (I) и эллиптичности поляризации (P) ИК излучения, от начальной энергии возбуждения колебательной (E_v^0) и вращательной (E_r^0) степеней свободы. При этом рассмотрение не ограничено малыми колебаниями или жесткостью ротатора.



Уравнения движения двухатомной молекулы в (x, y) -плоскости, нормальной вол-

новому вектору поля ИК излучения, имеют вид [11]:

$$\begin{aligned} \mu \ddot{r} &= \mu \dot{\theta}^2 r - \frac{dU}{dr} + q(E_x \cos \theta \cos(\omega t) + E_y \sin \theta \sin(\omega t)), \\ \mu \ddot{r} &= \mu \dot{\theta}^2 r - \frac{dU}{dr} + q(E_x \cos \theta \cos(\omega t) + E_y \sin \theta \sin(\omega t)), \\ \mu r \ddot{\theta} &= -2\mu \dot{r} \dot{\theta} - q(E_x \sin \theta \cos(\omega t) - E_y \cos \theta \sin(\omega t)), \end{aligned} \quad (1)$$

где точка означает производную по времени, $\mu = 1.63 \cdot 10^{-24}$ г, $q = 0.8 \cdot 10^{-10}$ CGSE – эффективный заряд с учетом частично ионной связи молекулы HCl, r – расстояние между атомами молекулы (в равновесии $r_e = 1.29$ ангстрем), ω , E – частота и напряженность электрического поля инфракрасного излучения ($P = E_y / E_x$), θ – фаза вращения вектора r , U – потенциал Морзе с параметрами $D = 4.5$ эВ, $a = 3.66 \text{ \AA}^{-1}$.

Уравнения движения (1) решались численно. При этом частота ω выбиралась равной характерной частоте колебаний двухатомной молекулы $\omega_{ve} = 0.36 \text{ эВ} (5.45 \cdot 10^{16} \text{ Гц})$, для оценок на ядерных масштабах соответственно [12] принимались величины $\omega_{ve} = 2.2 \cdot 10^{+06} \text{ ТГц}$, $r_e = 1,2 \cdot 10^{-06} \text{ нм}$, $D = 2.0 \text{ МэВ}$. Скорость диффузионной диссоциации двухатомной молекулы оценивалась по времени τ увеличения межатомного расстояния (в момент распада молекулы) до удвоенного равновесного значения.

Расчеты показали, что $(r, dr/dt)$ – диаграмма процесса диффузионной диссоциации молекулы в поле линейно-поляризованного инфракрасного излучения, не описывается регулярной кривой. Предельное множество сечения Пуанкаре является подмножеством этой нерегулярной диаграммы, что позволяет сделать вывод о хаотичности динамики молекулы. Об этом же свидетельствует и явно положительное значение максимального ляпуновского показателя.

Расчетная зависимость времени диффузионной диссоциации τ от интенсивности линейно-поляризованного ИК излучения имеет, как это видно из рис. 1, пороговый характер.

Пороговое значение интенсивности $\approx 10^{14} \text{ Вт/см}^2$ диффузионной диссоциации молекулы и число участвующих в диффузии резонансов ($n \geq 4$) согласуется с аналитическими оценками.

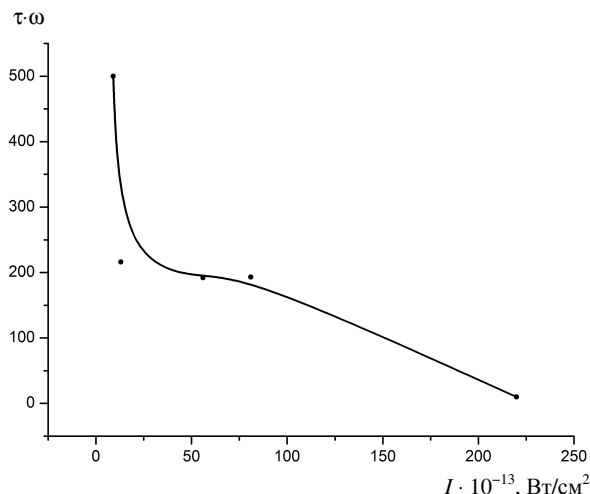


Рис. 1. Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от интенсивности ИК излучения ($E_v^0 = 3.55 \text{ эВ}$, $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$)

Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы в поле линейно-поляризованного ИК излучения от начальной энергии ее колебаний представлена на рис. 2. Видно, что скорость диссоциации увеличивается с ростом E_v^0 .

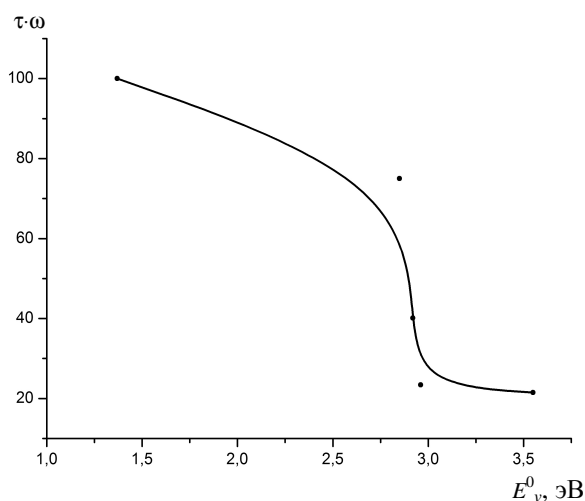


Рис. 2. Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от начальной энергии ее колебаний ($I = 1.4 \cdot 10^{+15} \text{ Вт/см}^2$, $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$)



На рис. 3 показано влияние начальной энергии вращения двухатомной молекулы на скорость ее диссоциации. Имеет место стабилизация динамики молекулы с увеличением E_v^0 (порог $\approx 10^{-2}$ эВ). Это объясняется прямой зависимостью потенциала радиальных колебаний молекулы от энергии вращения и согласуется с результатами работы [11].

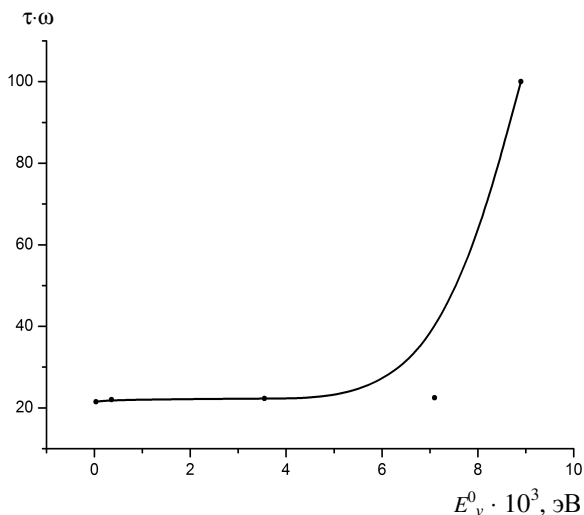


Рис. 3. Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от начальной энергии ее вращения ($I = 1.4 \cdot 10^{+15}$ Вт/см², $E_v^0 = 3.55$ эВ, $P = 0$)

Наконец, на рис. 4 представлена зависимость τ от эллиптичности поляризации ИК излучения.

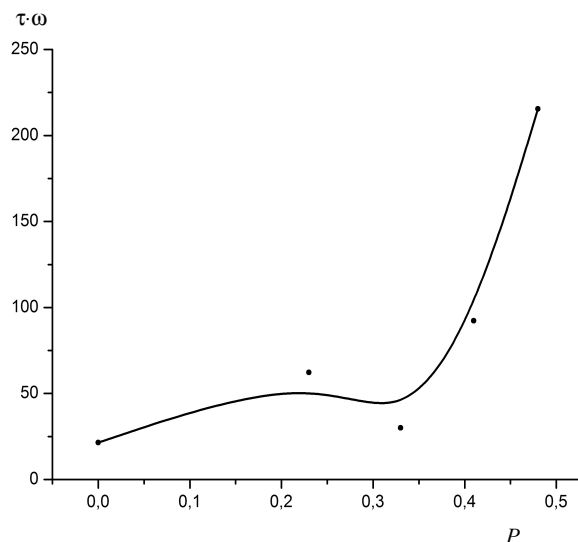


Рис. 4. Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от эллиптичности поляризации ИК излучения ($I = 1.4 \cdot 10^{+15}$ Вт/см², $E_v^0 = 3.55$ эВ, $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$)

Наблюдается сильное подавление диффузионной диссоциации двухатомной молекулы по мере перехода от линейной поляризации ИК излучения к циркулярной, что согласуется с результатами работы [9].

Таким образом, в данной работе численно показано, что скорость диффузионной диссоциации гетерополярной молекулы (типа HCl) в поле лазерного ИК излучения имеет пороговую зависимость от интенсивности излучения, начальной энергии колебаний и вращения молекулы и уменьшается по мере перехода от линейной поляризации ИК излучения к циркулярной. В работе также сделаны соответствующие оценки для систем связанных частиц на ядерных масштабах.

Список литературы

1. Делоне Н.Б. Атом в сильном световом поле. М.: Энергоатомиздат, 1984.
2. Федоров М.В. Стабилизация атомов в сильном лазерном поле // Успехи физических наук. 2004. Т.169, №1. С.66.
3. Делоне Н.Б. Стабилизация атома в поле лазерного излучения // Успехи физических наук. 1995. Т.165, №11. С.1295.
4. Гурзядян Э.Р. О статистических свойствах спектра атома водорода // Оптика и спектроскопия. 1988. Т.65. С.983.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 2001.
6. Попов В.С. Туннельная и многофотонная ионизация атомов и ионов в сильном лазерном поле // Успехи физических наук. 2004. Т.174, №9. С.921.
7. Летохов В.С. Нелинейные волны. М.: Наука, 1989.
8. Стратонович Р.Л. О динамической теории распада сложных молекул // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1995. Т.108. С.1328.
9. Берман Г.П. Квантовый хаос в двухатомной молекуле // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1989. Т.95, №5. С.1553.
10. Болотин Ю.Л. Стохастическая ядерная динамика // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1989. Т.20. С.878.
11. Горчаков В.И. Классическая гетерополярная молекула в поле лазерного излучения // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1976. Т.70. С.468.
12. Смирнов Б.М. Скейлинг в атомной и молекулярной физике // Успехи физических наук. 2001. Т.171, №12. С.1291.