Краткие сообщения по физике № 1 январь 1971

О РАДИАЦИОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ АТОМОВ В ПОЛЕ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л. И. Гудзенко, С. И. Яковленко

Считая пару сталкивающихся при тепловых скоростях атомов X и Y квазимолекулой XY, напишем гамильтониан изолированной квазимолекулы в виде

$$\hat{H}^{(XY)} = \hat{H}^{(X)} + H^{(Y)} + \sum_{i,k} \gamma_{i,k} R^{-3}(t) d_i^{(X)} d_k^{(Y)}. \quad (1)$$

Здесь $\hat{H}^{(Z)}$, $d_i^{(Z)}$ – гамильтониан и составляющие дипольного момента атома Z, $\vec{R}(t)$ – вектор расстояния от ядра X к ядру атома Y, $\gamma_{i,k} \equiv \delta_{i,k} - 3e_i e_k$, $e_i \equiv R_i/R$. Столкновительную передачу возбуждения принято описывать реакцией

$$X(2) + Y(1) \rightleftharpoons X(1) + Y(2),$$

вероятность которой с ростом дефекта энергии $(E_2^{(X)} - E_1^{(X)}) - (E_2^{(Y)} - E_1^{(Y)})$ становится экспоненциально малой.

Кратко обсудим в этой заметке реакцию другого типа – радиационное столкновение, в результате которого происходит перераспределение энергий возбуждения атомов X и Y с излучением (поглощением) кванта квазимолекулой XY

$$X(2) + Y(1) \rightleftharpoons X(1) + Y(2) + \hbar\omega . \quad (2)$$

Оценим сечение такой реакции в классическом узкополосном поле резонансной частоты

$$\omega \equiv \frac{1}{\hbar}(E_2^{(X)} + E_1^{(Y)} - E_1^{(X)} - E_2^{(Y)}).$$

Исходя из гамильтониана квазимолекулы в таком поле

$$\hat{H} = \hat{H}^{(XY)} + (\hat{V}_0/2)\left[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)\right],$$

(где $\hat{V}_0 = (\vec{A}_0/c)(\dot{\vec{d}}^{(X)} + \vec{d}^{(Y)})$, $(\vec{A}_0/2)\left[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)\right]$ – векторный потенциал), воспользуемся методом, изложенным в задаче § 40 /1/. Напишем уравнения для коэффициентов $\langle XY|X(l)Y(m)\rangle$ разложения собственных волновых функций оператора $\hat{H}$ по собственным функциям гамильтониана $\hat{H}^{(XY)}$ в двухуровневой схеме

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle XY|X(1),Y(2)\rangle = \frac{1}{2} \langle X(2),Y(1)|\hat{V}|X(1),Y(2)\rangle \times \\ \times \langle XY|X(2),Y(1)\rangle,$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle XY|X(2)Y(1)\rangle = \frac{1}{2} \langle X(1),Y(2)|\hat{V}|X(2),Y(1)\rangle \times \\ \times \langle XY|X(1),Y(2)\rangle, \tag{3}$$

с начальными условиями

$$\langle XY|X(1),Y(2)\rangle_{t=-\infty} = 1, \quad \langle XY|X(2),Y(1)\rangle_{t=-\infty} = 0.$$

Выберем фазу у коэффициентов разложения так, чтобы матричный элемент возмущения полем был вещественным, и обозначим

$$\langle X(2),Y(1)|\hat{V}|X(1),Y(2)\rangle = \langle X(1),Y(2)|\hat{V}|X(2),Y(1)\rangle \equiv V(t).$$

Тогда решение системы уравнений (3) примет вид

$$\langle XY | X(1), Y(2) \rangle = \cos\left[\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{t} V(\tau)d\tau\right],$$

$$\langle XY | X(2), Y(1) \rangle = \sin\left[\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{t} V(\tau)d\tau\right].$$

Вероятность перехода (2) квазимолекулы в результате столкновения равна

$$w = |\langle XY | X(2), Y(1) \rangle|^2 = \sin^2\left[\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} V(t)dt\right].$$

Зависимость от t входит в матричный элемент возмущения с функцией $R(t)$:

$$V(t) = BR^{-3}(t).$$

Полагая для оценки сечения σ радиационного столкновения (2) относительную скорость $\vec{v}$ ядер атомов постоянной и вводя прицельный параметр ρ, имеем *) в первом приближении волновых функций по $\sum_{i,k} \gamma_{i,k} R^{-3} d_i^{(X)} d_k^{(Y)}$:

$$R_{\rho,v}(t) = \sqrt{\rho^2 + v^2t^2}, \quad B = b\,\frac{\omega A_0}{c},$$

$$b = \frac{1}{2}\sum_{i,j,q} \overline{\gamma_{i,j}\, e_q \langle Y(1)| d_i^{(Y)} | Y(2)\rangle \langle X(2)| \alpha_{j,q}^{(X)}(\omega_{2,1}^{(Y)}) | X(1)\rangle},$$

где черта сверху – знак усреднения по всем ориентациям дипольных моментов относительно вектора Пойнтинга внешнего поля, $\|\alpha_{l,m}^{(Z)}(\omega')\|$ – матрица оператора поляризуемости атома Z на частоте ω', $\hbar\omega_{21} \equiv E_2^{(Y)} - E_1^{(Y)}$. Связь сечения σ с плотностью потока

---

*) Здесь предполагается равным нулю дипольный момент перехода $X(2) \longrightarrow X(1)$, что сокращает формулы. Подробнее см. /2/.

излучения J принимает вид

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^\infty \rho w(\rho, v) d\rho = \frac{\pi^2 B\omega}{2vc} A_0 = \frac{\pi^{5/2} B}{v} \sqrt{\frac{J}{c}}. \qquad (4)$$

Условие применимости этой оценки, исходящей из допущения малости возмущения атомов внешним полем излучения по сравнению с их взаимодействием между собой при столкновении, имеет вид

$$J \ll J_0 \equiv \left[\frac{c(d^{(Y)})^4 v^6}{10^{10} B^6}\right]^{1/5}.$$

Полагая в формуле (4) $v = 10^5$ см/сек = 0,5 атомных единиц, b = 10 атомных единиц, получаем

$$\sigma(\text{см}^2) \approx 0{,}5 \cdot 10^{-19} \sqrt{J(\text{вт/см}^2)},$$

то-есть интенсивности $J = 10^8$ вт/см^2 соответствует сечение порядка $\sigma \approx 0{,}5 \cdot 10^{-15}$ см^2.

Таким образом сечения передачи возбуждения при столкновениях атомов с большим дефектом энергии оказываются в резонансных полях весьма заметными. Использованное при оценке умеренное значение J свидетельствует о практической возможности наблюдения обсуждаемого эффекта с помощью имеющихся импульсных лазеров. Так, например, в смеси аргона и неона энергия кванта неодимового лазера (1,2 эв) близка к разности энергий метастабиля неона (16,6 эв) и ряда высоколежащих уровней аргона (15,4 эв); в связи с этим мы хотим обратить внимание на экспериментальную работу /3/.

Поступила в редакцию
5 ноября 1970 г.

Литература

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, 1965 г.
2. Л. И. Гудзенко, С. И. Яковленко. Радиационные столкновения атомов, Препринт ФИАН № 152, 1970 г.
3. D. C. Smith, A. F. Haught. Phys. Rev. Lett., 16, 1085 (1966). (Имеется перевод в сборнике "Действие лазерного излучения", "Мир", М., 1968 г.).