УДК 539.194;531.19

ВЛИЯНИЕ СТАЦИОНАРНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛ

И.В. Иванов, В.Н. Иванов

Омский государственный технический университет
E-mail: ivanovvn@phys.omsu.omskreg.ru

В предположении, что молекулы находятся в стационарном магнитном поле, исследуется теоретически колебательный спектр молекул. Получено, что при стохастическом возмущении в случае малой напряженности магнитного поля возможна Бозе-конденсация колебательных состояний. При этом молекулы перестают излучать и поглощать энергию в колебательном диапазоне, и становятся в этом диапазоне невидимыми. При увеличении напряженности поля температура такой конденсации понижается. Зависимость имеет нелинейный характер, но в предельных случаях малой и большой напряженности магнитного поля становится практически линейной. При больших напряженностях магнитного поля Бозе-конденсация может вообще исчезнуть.

Спектр излучения молекул чувствителен к внешним полям. В частности, хорошо известно расщепление квантовых состояний в магнитных полях. Однако при нелинейном взаимодействии молекул с окружающей средой магнитное поле может приводить и к другим эффектам, в частности, к изменению вероятностей переходов с одного колебательного уровня на другой.

Будем моделировать колебательные степени свободы молекул как одномерные осцилляторы, имеющие некоторый эффективный заряд. Для анализа состояний этих осцилляторов в магнитном поле воспользуемся нелинейным уравнением Шрёдингера, записанным для квантовых подсистем, испытывающих перманентное стохастическое возмущение [1, 2]. Нелинейность уравнения обусловлена самовоздействием квантовой подсистемы через окружающую среду [3].

Для ориентированных вдоль оси Z осцилляторов нелинейное уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=$$
$$=\frac{1}{1+i\alpha}\left[\frac{1}{2m_0}\left(\hat{\mathrm{P}}-\frac{q}{c}\mathrm{A}\right)^2+\chi\right]\psi+\frac{m_0\omega^2z^2}{2}\psi+$$
$$+\frac{i\alpha}{1+\alpha^2}\left\langle\psi\right|\left[\frac{1}{2m_0}\left(\hat{\mathrm{P}}-\frac{q}{c}\mathrm{A}\right)^2+\chi\right]\left|\psi\right\rangle\psi. \qquad (1)$$

В (1) $\hat{\mathrm{P}}$ – оператор импульса; **A** – векторный потенциал внешнего поля; q – эффективный заряд осциллятора; m_0 – его масса, ω – собственная частота осциллятора; α – положительный параметр, связанный с плотностью окружающей среды; $\chi=\frac{kT}{2}$ (k – постоянная Больцмана, T – эффективная температура окружающей среды).

Выберем явный вид векторного потенциала в предположении, что магнитное поле ориентировано вдоль оси осциллятора. В этом случае в декартовой системе координат векторный потенциал будет иметь следующие компоненты:

$$A_x=-Hy;\quad A_y=A_z=0.$$

(H – напряжённость магнитного поля).

Уравнение (1) принимает вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{1+i\alpha}\left[\begin{array}{l}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta-\frac{i\hbar q}{m_0c}Hy\frac{\partial}{\partial x}+\\+\frac{q^2}{2m_0c^2}H^2y^2+\chi\end{array}\right]\psi+\frac{m_0\omega^2z^2}{2}\psi+$$
$$+\frac{i\alpha}{1+\alpha^2}\left\langle\psi\right|\left[\begin{array}{l}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta-\frac{i\hbar q}{m_0c}Hy\frac{\partial}{\partial x}+\\+\frac{q^2}{2m_0c^2}H^2y^2+\chi\end{array}\right]\left|\psi\right\rangle\psi. \qquad (2)$$

Чтобы выяснить особенности решения уравнения (2), необходимо выбрать базисные функции. Для этого найдем решение стационарного уравнения

$$E\psi=\frac{1}{1+i\alpha}\left[\begin{array}{l}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2-\frac{i\hbar q}{m_0c}Hy\frac{\partial}{\partial x}+\\+\frac{q^2}{2m_0c^2}H^2y^2+\chi\end{array}\right]\psi+\frac{m_0\omega^2z^2}{2}\psi. \qquad (3)$$

В (3) E – константа разделения. Представим волновую функцию в виде произведения:

$$\psi=\exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}x\right)\varphi(y)\phi(z). \qquad (4)$$

Подстановка (4) в (3) приводит к следующему уравнению:

$$(E(1+i\alpha)-\chi)\varphi\phi=$$
$$=\phi\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{qp_x}{m_0c}Hy+\frac{q^2}{2m_0c^2}H^2y^2+\frac{p_x^2}{2m_0}\right)\varphi+$$
$$+\varphi\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+(1+i\alpha)\frac{m_0\omega^2z^2}{2}\right)\phi. \qquad (5)$$

Первое слагаемое в правой части (5) – это уравнение магнитного осциллятора [4], поэтому, если разделить в (5) переменные, ввести новую переменную $y'=y+\frac{p_xc}{qH}$ и циклическую частоту $\omega_0=\frac{qH}{m_0c}$, полученное уравнение можно записать в виде

$$(E(1+i\alpha)-\chi)\varphi(y')\phi=\hbar\omega_0(\tilde{k}+\tfrac{1}{2})\varphi(y')\phi+$$
$$+\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+(1+i\alpha)\frac{m_0\omega^2z^2}{2}\right)\varphi(y')\phi, \qquad (6)$$

где квантовое число $\tilde{k}$ пробегает значения $\tilde{k}$=0,1,2,....

Формально (6) – уравнение одномерного осциллятора, испытывающего перманентное стохастическое возмущение, и его решение известно [4]:

$$\phi_n(\xi) = A_n(-1)^n \exp\left(\sqrt{1+i\alpha}\frac{\xi^2}{2}\right)\frac{d^n}{d\xi^n}\exp(\sqrt{1+i\alpha}\xi^2),$$

(A_n – нормировочная постоянная, $\xi = z\sqrt{\frac{m_0\omega}{\hbar}}$).

Константа разделения в (6) является комплексным числом:

$$E_n = \frac{1}{\sqrt{1+i\alpha}}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{\chi}{1+i\alpha} + \frac{1}{1+i\alpha}(\tilde{k}+\frac{1}{2})\hbar\omega.$$

Таким образом, как константа разделения (действительная часть которой интерпретируется как обычная энергия квантовой подсистемы), так и волновые функции $\psi_{n\tilde{k}} = \exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}x\right)\varphi_{\tilde{k}}(y)\phi_n(z)$ зависят от двух квантовых чисел.

В силу нелинейности уравнения (2) среди его решений есть и такие, у которых коэффициенты в суперпозиции

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n\tilde{k}} C_{n\tilde{k}}(t)\psi_{n\tilde{k}}(\mathbf{r})$$

являются нерегулярными функциями времени [2, 4]. Изменение этих функций возможно скачком. Это может быть при флуктуациях параметра α. Анализ показывает, что устойчивыми состояниями, в которых может при этом находиться выделенная подсистема, являются стационарные состояния $\psi_{n\tilde{k}}(\mathbf{r})$. Вероятности выхода осциллятора из различных стационарных состояний различны. В частности, эта вероятность переходов между уровнями с номерами n и l для обычного осциллятора, испытывающего перманентное стохастическое возмущение, зависит [2] от знака параметра σ

$$\sigma = \alpha\omega\left(2n - l + \frac{1}{2} + \frac{2\chi}{\hbar\omega}\right).$$

В рассматриваемом случае этот параметр имеет более сложную форму:

$$\sigma = \alpha\omega\left(2n - l + \frac{1}{2} + \frac{2\chi + \hbar\omega_0(2\tilde{k}+1)}{\hbar\omega}\right).$$

В тех случаях, когда параметр σ<0, переходы осуществляются только с верхних уровней на нижние [5]. Это может приводить, как показано в [2], к Бозе-конденсации состояний осцилляторов.

В исследуемом случае переходы с уровня с номером n возможны только на уровни, квантовые числа которых удовлетворяют неравенству

$$l \le 2n + \frac{1}{2} + \frac{2\chi + \hbar\omega_0(2\tilde{k}+1)}{\hbar\omega}. \quad (7)$$

Из соотношения (7) следует, что температура, при которой должна происходить Бозе-конденсация состояний осцилляторов, зависит от величины магнитного поля:

$$T \le \frac{\hbar\omega}{2k} - \frac{\hbar(2\tilde{k}+1)qH}{kmc}. \quad (8)$$

При этом молекулы становятся «невидимыми» в диапазоне частот ω: при выходе из основного колебательного состояния молекулы опять в него возвращаются.

Квантовые числа $\tilde{k}$ в (8) соответствуют различным возможным состояниям индуцированного «магнитного» осциллятора, вероятность реализации которых зависит от температуры, поэтому (8) является в общем случае нелинейным уравнением относительно температуры. Однако в двух предельных случаях: 1) магнитное поле велико, и имеет место Бозе-конденсация состояний «магнитных» осциллятора; 2) магнитное поле мало, и средняя энергия «магнитного» осциллятора не зависит от его величины, связь между критической температурой и магнитным полем линейна. Если имеет место соотношение $H \ge \frac{mc\omega}{2q}$, то даже при условии, что у индуцированного «магнитного» осциллятора существуют только нулевые колебания, такой Бозе-конденсации не будет.

Полученные результаты нуждаются в экспериментальной проверке. Однако, как представляется, выявленные закономерности имеют место на самом деле. Известно, например, что у ряда сверхпроводников (кристаллы которых можно рассматривать как систему осцилляторов) связь между напряженностью магнитного поля и критической температурой линейна и при больших напряженностях магнитного поля сверхпроводимость не наблюдается [6].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванов В.Н. Эвристический способ описания релаксации квантовых систем // Известия вузов. Физика. – 1996. – Т. 39. – № 2. – С. 7–13.
2. Иванов В.Н., Иванов И.В. Тепловое излучение системы слабосвязанных осцилляторов, испытывающих перманентное стохастическое возмущение // Оптика атмосферы и океана. – 2007. – Т. 20. – № 1. – С. 31–39.
3. Surian P.R., Angyan J. Perturbation theory for nonlinear time-independent Schrodinger equation // Phys. Rev. A. – 1983. – V. 28. – № 1. – P. 45–48.
4. Иванов В.Н. Влияние нелинейного взаимодействия молекул на их излучение // Оптика атмосферы и океана. – 2002. – Т. 15. – № 3. – С. 275–280.
5. Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г. Теория бифуркаций динамических систем на плоскости. – М.: Наука, 1967. – 487 с.
6. Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – 928 с.

Поступила 09.09.2007 г.