

## ВЛИЯНИЕ СТАЦИОНАРНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛ

И.В. Иванов, В.Н. Иванов

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

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

В (1)  $\hat{P}$  – оператор импульса;  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал внешнего поля;  $q$  – эффективный заряд осциллятора;  $m_0$  – его масса,  $\omega$  – собственная частота осциллятора;  $\alpha$  – 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:

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

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

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

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

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

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

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

Первое слагаемое в правой части (5) – это уравнение магнитного осциллятора [4], поэтому, если разделить в (5) переменные, ввести новую переменную

$$y' = y + \frac{P_x c}{qH} \quad \text{и циклическую частоту } \omega_0 = \frac{qH}{m_0 c},$$

полученное уравнение можно записать в виде

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

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

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:

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

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  $\alpha$ . 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  $\sigma$

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

В рассматриваемом случае этот параметр имеет более сложную форму:

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

#### 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.

В тех случаях, когда параметр  $\sigma < 0$ , 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

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

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

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

При этом молекулы становятся «невидимыми» в диапазоне частот  $\omega$ : 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» осцилляторов; 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  $H \geq \frac{mc\omega}{2q}$ , 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].

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.