УДК 539.186.3.01

СТОЛКНОВЕНИЯ С ПЕРЕДАЧЕЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРИ МАЛОМ ДЕФЕКТЕ РЕЗОНАНСА ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Д. С. Бакаев и *Ю. А. Вдовин*

Вычисляется сечение передачи возбуждения при столкновении возбужденного и невозбужденного атомов, обладающих малым дефектом резонанса, в газовой системе, помещенной во внешнее магнитное поле. Предполагается, что возбужденное и основное состояние каждого из атомов связаны разрешенным дипольным переходом. Показывается, что при малом дефекте резонанса сечение передачи возбуждения превышает соответствующее резонансное сечение.

Важной характеристикой различных физических процессов, протекающих в газовой системе с участием возбужденных атомов, является эффективное сечение передачи возбуждения при столкновении возбужденного и невозбужденного атомов. Знание такого рода эффективных сечений, в частности, требуется при исследовании различных селективных химических реакций, протекающих в газовых системах.

Мы будем рассматривать столкновения с передачей возбуждения в газовой системе, помещенной во внешнее магнитное поле. Роль внешнего магнитного поля сводится к снятию вырождения рассматриваемых уровней. Поле будет предполагаться достаточно сильным, так что расстояние между соседними зеемановскими подуровнями можно считать большим по сравнению с взаимодействием атомов на эффективном расстоянии, радиусе Вайскопфа ρ_0, или, что то же самое, большим по сравнению с обратным временем столкновения. Тогда при рассмотрении задачи столкновения эти подуровни можно считать совершенно независимыми. Действительно, в этом случае эффективное сечение передачи возбуждения с переходом с одного подуровня на другой при столкновении много меньше эффективного сечения для резонансных столкновений, происходящих без изменения энергии. Такие резонансные столкновения в системе, помещенной во внешнее однородное магнитное поле, были рассмотрены в работе [1].

В настоящей работе рассматриваются столкновения с передачей возбуждения при наличии малого дефекта резонанса Δ, т. е. при наличии малого сдвига уровня энергии возбужденного атома по отношению к соответствующему уровню энергии другого атома. В частности, такая ситуация может иметь место при столкновении атомов разных изотопов одного и того же элемента.

При расчете будет предполагаться, что дефект резонанса мал по сравнению с энергией взаимодействия атомов на эффективных расстояниях. Мы будем предполагать также, что хотя магнитное поле и является сильным, расстояние между зеемановскими подуровнями мало по сравнению с интервалами тонкой структуры рассматриваемых уровней. Поэтому каждый из рассматриваемых подуровней характеризуется полным моментом j и его проекцией на направление поля m. Будем считать, что основное и возбужденное состояние каждого из сталкивающихся атомов связаны между собой разрешенным дипольным переходом. Тогда взаимодействие атомов описывается оператором диполь-дипольного взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{R^2 (\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2) - 3 (\mathbf{d}_1 \mathbf{R}) (\mathbf{d}_2 \mathbf{R})}{R^5}, \tag{1}$$

где $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$ — операторы дипольных моментов атомов.

Для резонансных столкновений возбужденного и невозбужденного атомов характерны расстояния порядка радиуса Вайскопфа [2] ρ_0, $\rho_0 \sim d/\sqrt{v}$, где v — относительная скорость атомов (в атомных единицах, $\hbar = m = e = 1$). В приближении прицельного параметра [1] получаем уравнения для амплитуд ψ_1, ψ_2, описывающих возможные состояния системы из двух сталкивающихся атомов. Амплитуда ψ_1 описывает состояние, когда первый атом находится в возбужденном состоянии α (j_α, m_α), а второй — в основном состоянии β_0 (j_{β_0}, m_{β_0}).

Амплитуда ψ_2 — когда, наоборот, первый атом находится в основном состоянии α_0 (j_{α_0}, m_{α_0}), а второй — в возбужденном состоянии β (j_β, m_β)

$$\left.\begin{aligned} i\frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= \langle \alpha\beta_0 | \hat{V} | \alpha_0\beta \rangle e^{i\Delta t} \psi_2, \\ i\frac{\partial \psi_2}{\partial t} &= \langle \alpha_0\beta | \hat{V} | \alpha\beta_0 \rangle e^{-i\Delta t} \psi_1, \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

где через Δ обозначен дефект резонанса $\Delta = E_\alpha + E_{\beta_0} - E_{\alpha_0} - E_\beta$.

Ось ζ направлена по вектору $\mathbf{v}$ относительной скорости сталкивающихся атомов, $\zeta = vt$; $R^2 = \rho^2 + v^2 t^2$, где ρ — прицельный параметр, а R — расстояние между атомами. Граничные условия к уравнениям (2) возьмем в виде

$$\psi_1 (t, \rho) |_{t \to -\infty} = 1, \quad \psi_2 (t, \rho) |_{t \to -\infty} = 0. \tag{3}$$

Столкновения с передачей возбуждения, как это следует из (3), описываются амплитудой ψ_2.

Амплитуды ψ_1, ψ_2 выразим через матрицу S

$$\begin{pmatrix} \psi_1 (t, \rho) \\ \psi_2 (t, \rho) \end{pmatrix} = S (t, \rho) \begin{pmatrix} \psi_1 (-\infty, \rho) \\ \psi_2 (-\infty, \rho) \end{pmatrix} = S (t, \rho) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

удовлетворяющую (см. [1]) уравнению

$$\left.\begin{aligned} i\frac{\partial S (t, \rho)}{\partial t} &= H (\sigma_x \cos \Delta t - \sigma_y \sin \Delta t) S (t, \rho), \\ S (-\infty, \rho) &= 1, \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

где σ_x, σ_y — матрицы Паули, действующие в пространстве функций (ψ_1, ψ_2),

$$H = \langle \alpha\beta_0 | \hat{V} | \alpha_0\beta \rangle = \langle \alpha_0\beta | \hat{V} | \alpha\beta_0 \rangle = g^2 \frac{R^2 - 3R_z^2}{R^5}. \tag{6}$$

Причем

$$g^2 = \langle \alpha | d_{1z} | \alpha_0 \rangle \langle \beta_0 | d_{2z} | \beta \rangle - \langle \alpha | d_{1x} | \alpha_0 \rangle \langle \beta_0 | d_{2x} | \beta \rangle, \tag{7}$$

а ось z направлена по вектору внешнего магнитного поля $\mathcal{H}$.

Сечение передачи возбуждения определяется, согласно (4), $S_{21} (\infty, \rho)$ элементом матрицы S

$$\sigma = \int \overline{| S_{21} (\infty, \rho) |^2} d^2\rho = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^\infty | S_{21} (\infty, \rho) |^2 \rho d\rho, \tag{8}$$

где черта означает усреднение по всем направлениям вектора относительной скорости $\mathbf{v}$. Через ψ обозначен азимутальный угол, отсчитываемый от плоскости ($\mathbf{nv}$), а через θ — угол между векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{v}$. Через $\mathbf{n}$ обозначен единичный вектор, направленный по внешнему магнитному полю $\mathcal{H}$. Матрицу S будем искать в виде

$$S = S_0 S_1, \tag{9}$$

где оператор $S_0(t, \rho)$ удовлетворяет уравнению (5) при $\Delta=0$

$$S_0(t, \rho)=e^{-i\int\limits_{-\infty}^{t} H\sigma_x dt}. \tag{10}$$

Матрица $S_0(t, \rho)$ описывает столкновение с резонансной передачей возбуждения $(\Delta=0)$ [1]. Матрица $S_1(t, \rho)$, как это следует из (5), (9) и (10), удовлетворяет уравнению

$$i\frac{\partial S_1(t, \rho)}{\partial t}=US_1(t, \rho), \tag{11}$$

$$S_1(-\infty, \rho)=1,$$

а матрица U имеет вид

$$U=S_0^{-1}\{H[\sigma_x(\cos\Delta t-1)-\sigma_y\sin\Delta t]\}S_0. \tag{12}$$

Уравнение (11) решаем методами теории возмущений, считая малым дефект резонанса Δ с точностью до членов, квадратичных по Δ. Фактически безразмерным параметром малости является отношение Δ к взаимодействию на эффективных расстояниях $\rho=\rho_0$. Матрица $U(t, \rho)$, как это следует из (12) и (10), имеет вид

$$U(t, \rho)=H\{\sigma_x(\cos\Delta t-1)-\sigma_y\sin\Delta t\cos 2\varphi(t)+\sigma_z\sin\Delta t\sin 2\varphi(t)\}, \tag{13}$$

где $\varphi(t)=\int\limits_{-\infty}^{t} Hdt$, а H определено выражением (6).

Из выражений (9)—(11) получаем

$$|S_{21}(\infty, \rho)|^2=\sin^2\alpha-(A_1+A_2)\sin 2\alpha+B^2\cos^2\alpha+C^2\sin^2\alpha+$$
$$+BC\sin 2\alpha-2D\sin^2\alpha, \tag{14}$$

где

$$\alpha=\varphi(\infty)=\frac{2g^2}{v\rho^2}\left[1-\frac{(\mathbf{n}\mathbf{v})^2}{v^2}-2\frac{(\mathbf{n}\boldsymbol{\rho})^2}{\rho^2}\right], \tag{15}$$

а через $\mathbf{n}$ обозначен единичный вектор $\mathbf{n}=\boldsymbol{\mathcal{H}}/\mathcal{H}$. Через A_1, B, D обозначены выражения

$$A_1=\int\limits_{-\infty}^{\infty} H(1-\cos\Delta t)\,dt,$$

$$B=\int\limits_{-\infty}^{\infty} H\sin\Delta t\cos 2\varphi(t)\,dt, \tag{16}$$

$$D=\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt_1\int\limits_{\infty}^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2)\sin\Delta t_1\sin\Delta t_2\cos 2[\varphi(t_2)-\varphi(t_1)].$$

Выражения для C и A_2 получаются соответственно из B и D заменой последнего косинуса на синус. Гамильтониан H [см. (6)] представим в виде

$$H=\frac{g^2}{\rho^3}h(\tau),$$

где

$$h(\tau)=\frac{1-3\frac{(\mathbf{v}\mathbf{n})^2}{v^2}}{(1+\tau^2)^{3/2}}-\frac{3\left[\frac{(\boldsymbol{\rho}\mathbf{n})^2}{\rho^2}-\frac{(\mathbf{v}\mathbf{n})^2}{v^2}+2\tau\frac{(\boldsymbol{\rho}\mathbf{n})(\mathbf{v}\mathbf{n})}{\rho v}\right]}{(1+\tau^2)^{5/2}}$$

и $\tau=vt/\rho$. Отметим также, что

$$\frac{(\mathbf{n}\boldsymbol{\rho})^2}{\rho^2}=\left[1-\frac{(\mathbf{n}\mathbf{v})^2}{v^2}\right]\cos^2\psi,$$

где ψ — азимутальный угол (см. (8)).

Подставляя выражение (14) в (8) и выполняя, где возможно, интегрирование, аналитически получаем

$$\sigma = \frac{4\pi}{3}\,\frac{g^2}{v}\left[1 + a\lambda^2\left(\ln\frac{1}{\lambda^2} + b + cQ\right)\right], \tag{17}$$

где $Q = (1/2)\int\limits_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\psi \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int\limits_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 \tau_1\tau_2 h(\tau_1)\,h(\tau_2) \ln\left|\left(\int\limits_{-\infty}^{\tau_2} h(\tau)\,d\tau\right)^2 - \left(\int\limits_{\tau_1}^{\infty} h(\tau)\,d\tau\right)^2\right|$, $\lambda = |g\Delta|/v^{3/2}$, λ — безразмерный параметр малости, $a = 2/5$, $b = -4.72$, $c = -0.3$. Численным интегрированием на ЭВМ было получено $Q = 12\pi$. Окончательно выражение для эффективного сечения передачи возбуждения имеет вид (в обычных единицах)

$$\sigma = \frac{4\pi}{3}\,\frac{g^2}{\hbar v}\left\{1 + \frac{2}{5}\lambda^2\left[\ln\frac{1}{\lambda^2} - 15.97\right]\right\}. \tag{18}$$

При $\Delta = 0$ ($\lambda = 0$) полученное выражение переходит в сечение передачи возбуждения при точном резонансе, рассчитанное в работе [1]. Отметим, что при $\lambda \to 0$ сечение (18) стремится к величине, отвечающей резонансу со стороны больших, а не меньших значений.

Впервые это явление было выявлено в работе [3]. Оно обусловлено тем, что числитель оператора взаимодействия (6) имеет знакопеременную составляющую. Взятие от такого выражения Фурье компоненты частоты Δ (см. (16)) приводит при малых Δ к добавочному положительному вкладу в сечение передачи возбуждения. Явление отсутствует при аппроксимации гамильтониана взаимодействия выражением вида CR^{-3}, не содержащим знакопеременной составляющей [4, 5].

Литература

[1] Ю. А. Вдовин, В. М. Галицкий. Вопросы теории атомных столкновений. Атомиздат, 65, 1970.
[2] V. Weisskopf. Z. Phys., *34*, 1, 1933.
[3] Ю. А. Вдовин, В. М. Галицкий. ЖЭТФ, *69*, 103, 1975.
[4] Л. П. Кудрин, Ю. В. Михайлова. ЖЭТФ, *63*, 63, 1972.
[5] V. Ermatchenko. C. R. Acad. Sc. Paris, *277B*, 475, 1973.

Поступило в Редакцию 10 февраля 1975 г.