ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 5, стр. 877–882

ВОЗБУЖДЕНИЕ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

В. А. Астапенко [a*], *Ю. А. Кротов* [b], *Е. В. Сахно* [a]

[a] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) 141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

[b] *Научно-исследовательский институт «Полюс» им. М. Ф. Стельмаха 117342, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2020 г.,
после переработки 25 декабря 2020 г.
Принята к публикации 28 декабря 2020 г.

Исследуется возбуждение линейного квантового осциллятора (ЛКО) при столкновении с заряженной частицей, движущейся по прямолинейной траектории. Расчет вероятности и сечения процесса проведен вне рамок теории возмущений для различных зарядов налетающей частицы, включая многозарядные ионы. Рассмотрено возбуждение между стационарными состояниями ЛКО, а также полное возбуждение из основного состояния. Проанализированы характеристические черты процесса в зависимости от параметров задачи.

DOI: 10.31857/S0044451021050035

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория возбуждения квантовых объектов в результате столкновения с заряженными частицами впервые рассматривалась Ферми в его классической работе [1] в рамках метода эквивалентных фотонов еще до создания квантовой механики с использованием экспериментальных данных для сечений фотовозбуждения.

В настоящее время для расчета сечения ударного возбуждения атомов используется последовательный квантовомеханический подход [2].

Кроме того, для быстрой оценки сечения возбуждения на дипольно-разрешенных переходах атомов и молекул применяются полуфеноменологические формулы, полученные методом функций подобия (см., например, [3, 4]). Данные формулы могут быть выведены с использованием спектроскопического принципа соответствия, в рамках которого атом при взаимодействии с электромагнитным полем представляется набором классических осцилляторов [5]. Такой подход соответствует первому порядку теории возмущений по взаимодействию мишени с налетающей частицей (НЧ) и становится некорректным при описании ударного возбуждения медленными частицами и многозарядными ионами.

Возбуждение квантового осциллятора короткими лазерными импульсами исследовалось в работах [6, 7] с помощью точной формулы для вероятности процесса, полученной Швингером [8] в его теории квантованного поля.

Модель квантового осциллятора активно используется при расчете потерь энергии в ходе столкновения заряженных частиц с атомами [9]. Так, в работах [10, 11] формула Швингера, обобщенная на трехмерный случай, применялась для расчета потерь энергии при столкновении заряженных частиц с квантовым осциллятором, находящемся в основном состоянии. В работе [10] рассматривались флуктуации потерь энергии, в статье [11] — эффективное торможение.

Отметим, что в статьях [9–11] вычислялась сумма по всем возбужденным состояниям осциллятора. Сечения отдельных переходов не рассматривались.

Настоящая работа посвящена расчету и анализу вне рамок теории возмущений вероятности и сечений возбуждения квантового линейного осциллятора на переходах между стационарными состояниями при столкновении с заряженными частицами.

* E-mail: astval@mail.ru

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

В работе исследуется случай, когда заряженная частица, возбуждающая осциллятор, двигается равномерно и прямолинейно со скоростью $\mathbf{v}$, образующей угол α с осью осциллятора [12]. На рис. 1 представлена диаграмма процесса, ρ — прицельный параметр.

Тогда для фурье-образа напряженности электрического поля, создаваемого нерелятивистским зарядом Ze в месте расположения осциллятора, можно получить

$$\mathbf{E}(\omega,\rho,v)=\frac{2Ze\,\omega}{v^2}\times \times\left\{K_1\left(\frac{\omega\rho}{v}\right)\mathbf{e}_n+iK_0\left(\frac{\omega\rho}{v}\right)\mathbf{e}_\tau\right\}, \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_{n,\tau}$ — нормальный и тангенциальный (по отношению к вектору скорости $\mathbf{v}$ = const) единичные векторы, ρ — прицельный параметр, $K_{0,1}(z)$ — функции Макдональда нулевого и первого порядка.

Вероятность возбуждения квантового осциллятора на переходе между стационарными состояниями $n\to m$ определяется формулой [8]

$$W_{mn}=\frac{n!}{m!}\nu^{m-n}\exp(-\nu)\left|L_n^{m-n}(\nu)\right|^2. \quad (2)$$

Здесь $L_n^k(\nu)$ — обобщенный полином Лагерра, параметр ν определяется равенством [6, 13]

$$\nu=\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_0}, \quad (3)$$

где ε — энергия возбуждения классического осциллятора с той же частотой ω_0 и массой M внешним электрическим полем. Предполагаем, что затуханием осциллятора можно пренебречь. Подробный вывод выражения (2) как функции параметра ν, определенного формулой (3), содержится в работе [14]. Вывод основывается на аналитическом решении уравнения Шредингера для заряженного гармонического осциллятора в поле электромагнитного

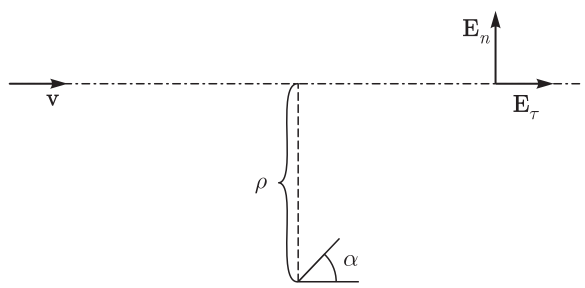

Рис. 1. Диаграмма процесса

импульса путем сдвига его координаты: $x\to x-\xi(t)$, где $\xi(t)$ — координата классического осциллятора, ассоциированного с квантовым аналогом (имеющем те же параметры).

Для полной вероятности возбуждения квантового осциллятора из основного состояния формула (2) дает

$$W_{tot}(\nu)=1-\exp(-\nu). \quad (4)$$

Отметим, что формула (4) совпадает с выражением для вероятности возбуждения квантового перехода при столкновении с заряженной частицей, полученным Ферми в работе [1], если под параметром ν понимать величину

$$\nu\to\int\frac{J(\omega)\sigma(\omega)}{\hbar\omega}\,d\omega,$$

где $\sigma(\omega)$ — сечение квантового перехода, $J(\omega)$ — спектральный поток энергии поля заряженной частицы.

Пусть линейный осциллятор направлен вдоль оси x, тогда энергия возбуждения классического осциллятора под действием поля заряженной частицы (1) равна

$$\varepsilon(\rho,v)=\frac{e^2}{2M}\left|E_x(\omega_0,\rho,v)\right|^2, \quad (5)$$

где E_x — проекция фурье-образа напряженности поля заряженной частицы на ось осциллятора. Для квадрата модуля этой величины имеем

$$|E_x(\omega_0,\rho,v)|^2=\left(\frac{2Ze\,\omega}{v^2}\right)^2\times \times\left\{K_1^2\left(\frac{\omega_0\rho}{v}\right)\sin^2\alpha\cos^2\varphi+K_0^2\left(\frac{\omega_0\rho}{v}\right)\cos^2\alpha\right\}, \quad (6)$$

где α — угол между вектором скорости $\mathbf{v}$ и единичным вектором $\mathbf{e}_x$ в направлении оси осциллятора. В формуле (6) введен азимутальный угол φ, равный углу между вектором $\mathbf{e}_n$ и плоскостью $\mathbf{v}\times\mathbf{e}_x$. Он определяет плоскость траектории движения заряженной частицы. Таким образом, вероятность возбуждения определяется двумя траекторными параметрами ρ и φ, которые входят в выражение для сечения процесса:

$$\sigma_{mn}=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_a^\infty W_{mn}(\rho,\varphi)\rho\,d\rho. \quad (7)$$

Здесь мы ввели параметр «обрезания» $a\approx 1$ ат. ед., который ограничивает область прицельных параметров снизу. Анализ показывает, что зависимостью

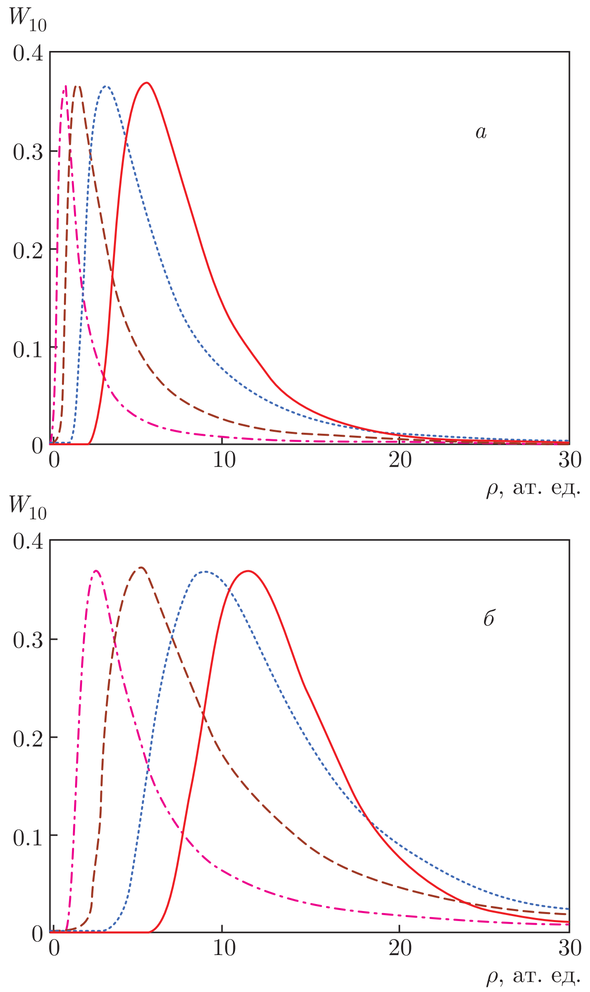

Рис. 2. Вероятность возбуждения перехода $0 \to 1$ в квантовом осцилляторе под действием НЧ с зарядом $Z = 10$ (a), 30 ($б$) как функция прицельного параметра, $\varphi = \pi/4$, $\alpha = \pi/2$, для разных скоростей НЧ: сплошная кривая — $v = 0.1$ ат. ед., пунктирная — $v = 0.2$ ат. ед., штриховая — $v = 0.4$ ат. ед., штрихпунктирная — $v = 0.8$ ат. ед.

сечения (7) от величины параметра a при $a \le 1$ можно пренебречь.

Результаты расчета вероятности возбуждения ЛКО на переходе $0 \to 1$ представлены на рис. 2 как функции прицельного параметра для различных скоростей и зарядов НЧ. При этом были использованы параметры осциллятора, соответствующие колебаниям молекулы СО в основном электронном состоянии: $M = 12500$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.

Характерно, что рассчитанные с использованием формулы (2) зависимости, изображенные на рис. 2, представляют собой кривые с максимумом, причем $W_{10}^{max} = e^{-1} \approx 0.368$. Отметим, что вероятность возбуждения квантового осциллятора, рассчитанная в рамках теории возмущений, дает монотонно убывающую функцию прицельного параметра ρ.

Как видно из приведенных графиков, максимум вероятности возбуждения линейного квантового осциллятора (ЛКО) с ростом скорости НЧ смещается в область меньших значений прицельного параметра, при этом ширина максимума уменьшается.

Сечения возбуждения ЛКО между соседними стационарными состояниями $n - 1 \to n$ как функции скорости налетающей частицы представлены на рис. 3 для зарядов НЧ $Z = 10, 30, 60$.

Анализ графиков показывает, что при возбуждении перехода $n - 1 \to n$ сечение процесса в максимуме зависимости от скорости заряженной частицы пропорционально ее заряду Z, а также величине $\sqrt{n}$. Кроме того, значение скорости в максимуме определяется соотношением $v_{max} \propto \sqrt{Z}$.

Сечения возбуждения ЛКО из основного состояния в заданные возбужденные, а также полное сечение возбуждения как функции скорости НЧ представлены на рис. 4 для различных зарядов НЧ.

Из приведенных рисунков следует, что максимум сечения возбуждения перехода $0 \to n$ слабо смещается в область меньших значений скорости с ростом квантового числа n, а величина сечения в максимуме пропорциональна заряду НЧ.

Зависимости полного сечения возбуждения ЛКО из основного состояния от скорости НЧ для различных углов α между вектором скорости и осью ЛКО, вычисленные с помощью формул (4), (7), представлены на рис. 5.

Из рисунка видно, что зависимость сечения возбуждения ЛКО от скорости НЧ с ростом угла α уменьшается в максимуме и более медленно убывает в области больших скоростей.

Полные сечения возбуждения ЛКО с параметрами, отвечающими молекулам CO и NH, представлены на рис. 6.

Видно, что для более легкого ЛКО (NH) сечение возбуждения больше и максимум зависимости от скорости НЧ смещен в область больших скоростей. Численный анализ показывает, что при прочих равных параметрах сечение полного возбуждения ЛКО в максимуме зависимости от скорости зависит от массы осциллятора согласно соотношению $\sigma_{tot}(v_{max}) \propto 1/\sqrt{M}$.

Сравним теперь полученные выше сечения возбуждения квантового осциллятора на переходе $0 \to \to 1$ с результатами расчета по теории возмущений. Соответствующее выражение в последнем случае имеет вид [12]

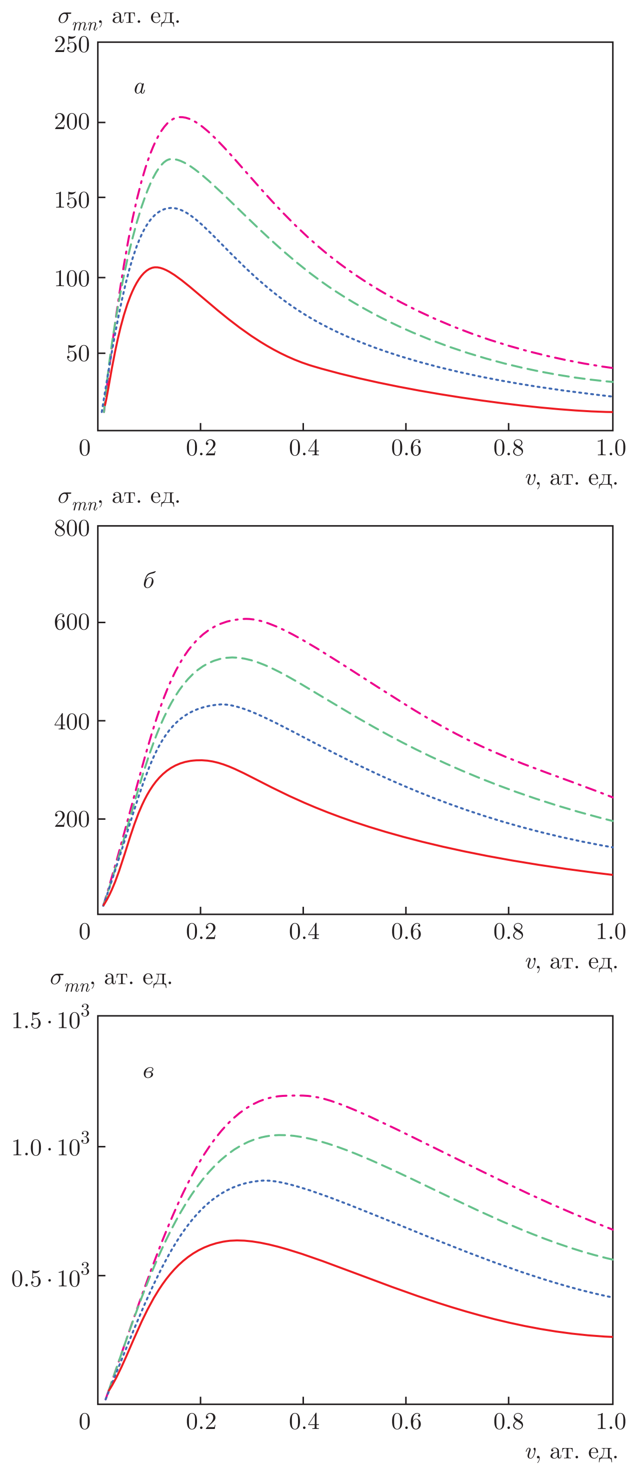

Рис. 3. Сечение столкновительного возбуждения различных переходов в квантовом осцилляторе НЧ с зарядом $Z = 10$ (*а*), 30 (*б*), 60 (*в*) как функция скорости НЧ, сплошные кривые — переход $0 \to 1$, пунктирные — переход $1 \to 2$, штриховые — переход $2 \to 3$, штрихпунктирные — переход $3 \to 4$, угол между осью осциллятора и вектором скорости НЧ $\alpha = \pi/2$

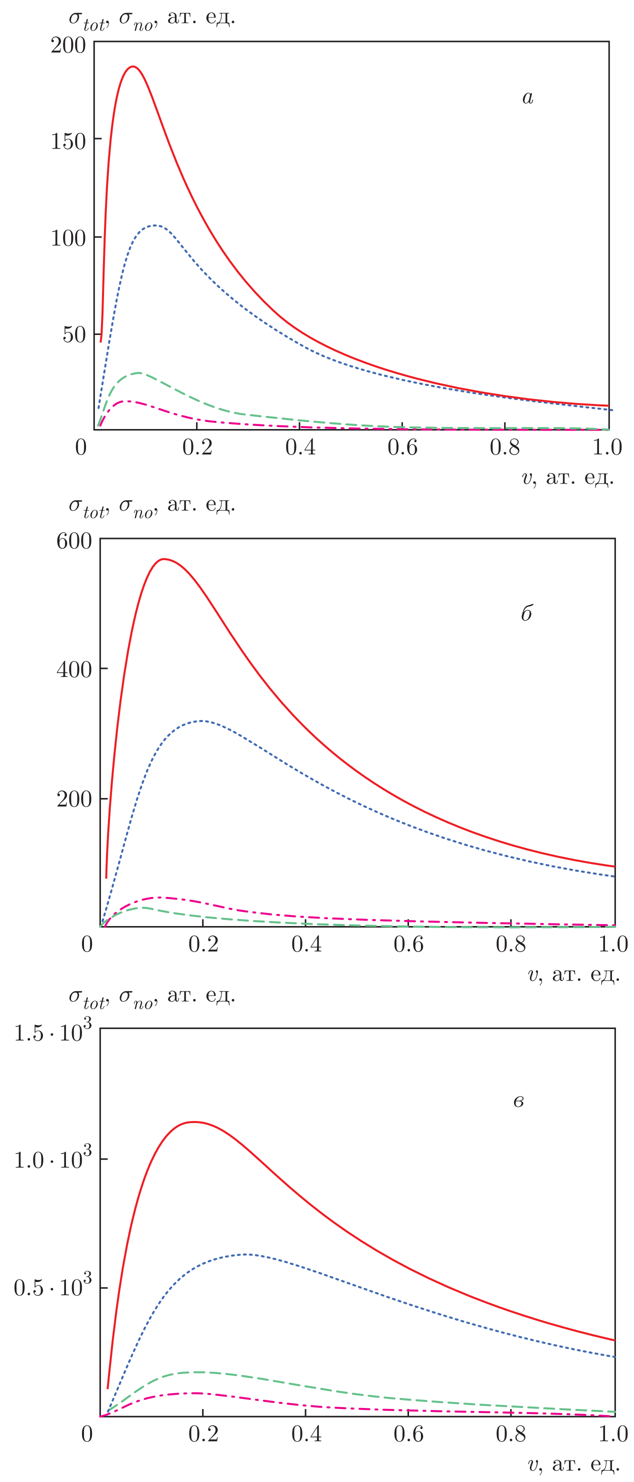

Рис. 4. Сечение возбуждения квантового осциллятора из основного состояния НЧ с зарядом $Z = 10$ (*а*), 30 (*б*), 60 (*в*) как функция скорости НЧ, пунктирные кривые — переход $0 \to 1$, штриховые — переход $0 \to 2$, штрихпунктирные — переход $0 \to 3$, сплошные — полное сечение возбуждения

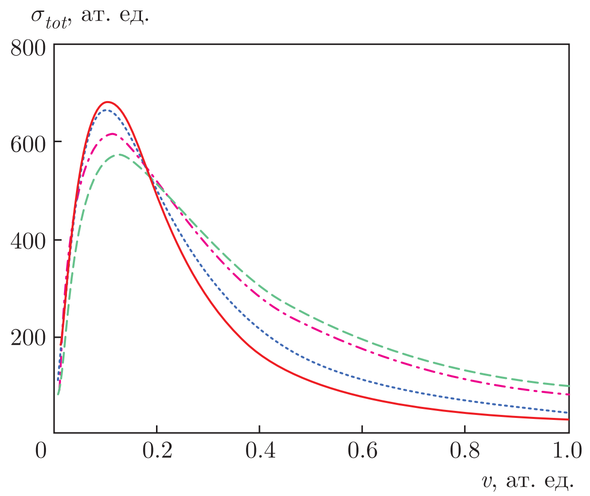

Рис. 5. Зависимости полного сечения возбуждения ЛКО из основного состояния от скорости НЧ для различных углов α: сплошная кривая — $\alpha = 0$, пунктирная — $\alpha = \pi/6$, штриховая — $\alpha = \pi/2$, штрихпунктирная — $\alpha = 2\pi/3$, $Z = 30$

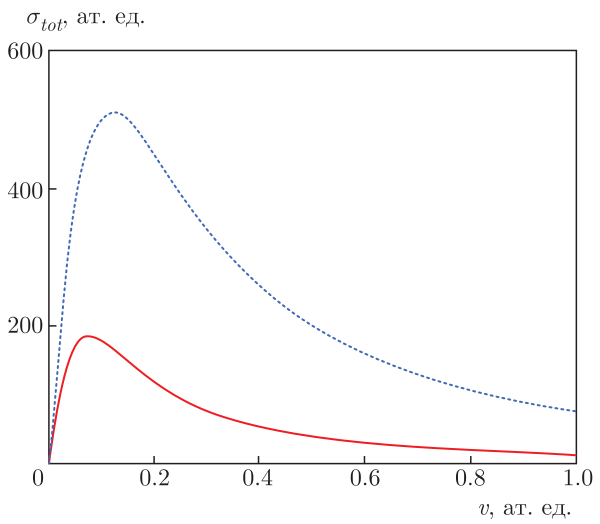

Рис. 6. Сечение полного возбуждения ЛКО с параметрами молекул CO (сплошная кривая, $M = 12500$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.) и NH (пунктирная кривая, $M = 1713$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.), $Z = 10$, $\alpha = \pi/2$

$$\sigma_{10} = \frac{q^2}{2M\omega_0} \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_a^{\infty} |E_x(\omega_0, \rho, v)|^2 \rho\, d\rho. \qquad (8)$$

Отметим, что при записи (8) было учтено, что сила осциллятора на рассматриваемом переходе равна 1.

Сечения, рассчитанные по формуле (8) и с использованием точного выражения для вероятности возбуждения (2), представлены на рис. 7 для двух значений угла $\alpha = \pi/2, 0$.

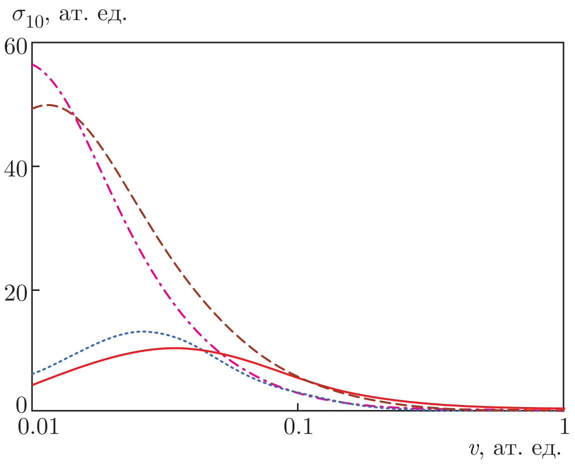

Рис. 7. Сечение возбуждения молекулы CO на колебательном переходе $0 \to 1$ при столкновении с однозарядным ионом: сплошная кривая ($\alpha = \pi/2$), пунктирная ($\alpha = 0$) — расчет с использованием (8); штриховая кривая ($\alpha = \pi/2$), штрихпунктирная ($\alpha = 0$) — расчет по теории возмущений

Из рис. 7 следует, что в рассматриваемом случае для малых скоростей НЧ ($v < 0.1$ ат. ед.) результат расчета по теории возмущений существенно превышает результат, полученный с помощью точной формулы (8). Для относительно быстрых НЧ ($v > 0.1$ ат. ед.) рассчитанные зависимости совпадают.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием точной формулы в работе рассчитаны и проанализированы вероятность и сечение возбуждения ЛКО в результате соударения с заряженной НЧ, двигающейся равномерно и прямолинейно.

Показано, что полученные зависимости для вероятности процесса представляют собой кривые с максимумом в отличие от результатов расчета в рамках теории возмущений.

Установлено, что величина максимума сечения перехода ЛКО между соседними стационарными уровнями $n-1 \to n$ как функция скорости НЧ пропорциональна ее заряду Z, а также величине $\sqrt{n}$. Значение скорости в максимуме: $v_{max} \propto \sqrt{Z}$.

Максимум сечения возбуждения ЛКО из основного состояния $0 \to n$ слабо смещается в область меньших значений скорости с ростом квантового числа n, величина сечения пропорциональна заряду НЧ.

Показано, что полное сечение возбуждения ЛКО слабо зависит от угла между вектором скорости НЧ и осью осциллятора и уменьшается с ростом массы осциллятора M в максимуме зависимости от скорости согласно соотношению $\sigma_{tot}(v_{max}) \propto 1/\sqrt{M}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Fermi, Z. Phys. **29**, 315 (1924).

2. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Наука, Москва (1979).

3. V. A. Astapenko, A. V. Eletskii, V. P. Kudrya et al., Laser Phys. **10**, 1220 (2000).

4. S. Adamson, V. Astapenko, M. Deminskii et al., Chem. Phys. Lett. **436**, 308 (2007).

5. N. Bohr, H. A. Kramers, and J. C. Slater, Phil. Mag. **47**, 785 (1924).

6. V. A. Astapenko and E. V. Sakhno, Appl. Phys. B **126**, 23 (2020).

7. V. A. Astapenko and E. V. Sakhno, Symmetry **12**, 1293 (2020).

8. J. Schwinger, Phys. Rev. **91**, 728 (1953).

9. P. Sigmund and U. Haagerup, Phys. Rev. A **34**, 892 (1986).

10. Д.Н. Макаров, ЖЭТФ **146**, 711 (2014).

11. Д. Н. Макаров, ЖЭТФ **85**, 7 (2015).

12. В. А. Астапенко, *Взаимодействие излучения с атомами и наночастицами*, Интеллект, Долгопрудный (2010).

13. K. Husimi, Progr. Theor. Phys. **9**, 4 (1953).

14. V. A. Astapenko, F. B. Rosmej, and E. V. Sakhno, arXiv:2009.04233 [physics.atom-ph].