

02

## Диссоциация систем нелинейно связанных частиц во внешних полях в диффузионной модели

© И.Н. Антонов<sup>1</sup>, А.Г. Лавкин<sup>2</sup><sup>1</sup> Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А.<sup>2</sup> Саратовский национальный исследовательский университет

им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: antonov2007@mail.ru

*Поступило в Редакцию 5 ноября 2014 г.*

Исследована диффузионная модель возбуждения и развала систем связанных частиц во внешнем поле. Показана хаотизация колебаний электрона, приводящая к диффузионной ионизации на примере молекулы хлористого водорода в достаточно сильном сверхвысокочастотном поле. Численно моделировалась зависимость скорости диффузионной диссоциации от интенсивности и эллиптичности поляризации, от энергии возбуждения колебательной и вращательной степеней свободы, при этом время ионизации существенно превышало период обращения электрона по невозмущенной орбите.

Вероятность диффузионной ионизации резко возрастает [1,2], когда поле достигает критической величины  $E_c = \Omega_n / \omega n^4$  ( $\Omega_n = n^{-3}$  — частота обращения электрона).  $E_c$  зависит от частоты, поляризации электромагнитного поля, а также от внешних статических и переменных электрических и магнитных полей, тепловых флуктуаций [3–11].  $E_c$  минимально при  $\omega = \Omega_n$ . При  $\omega \ll \Omega_n$  хаотическая ионизация исчезающе мала и преобладает туннельная ионизация. Хаотическая ионизация исчезает и при  $\omega \gg \Omega_n$ , в этом пределе улучшаются условия применимости теории возмущений, т.е. условия использования многофотонного предела. Туннельная и многофотонная ионизации, в отличие от диффузионной, происходят приблизительно за время одного оборота электрона по невозмущенной орбите.

Аналогичные явления возможны и в случае молекул в поле интенсивного ИК-лазерного излучения. Однако прямые экспериментальные данные для этого случая отсутствуют. Что касается молекул, находя-

щихся в высоковозбужденном электронном состоянии, то не вызывает сомнений, что к ним в полной мере относится все сказанное выше относительно высоковозбужденных атомов.

В случае молекул, возбужденных в высокие колебательные состояния [12–14], наиболее доступна для теоретического исследования двухатомная молекула в поле ИК-излучения.

Диффузионный механизм диссоциации многоатомных молекул возможен при интенсивности ИК-излучения  $10^5 \text{ W/m}^2$ . Для двухатомных молекул требуется более интенсивное импульсное ИК-излучение  $\geq 10^9 \text{ W/m}^2$  длительностью  $\geq 1 \text{ ps}$ , что в принципе достижимо при фокусировке излучения импульсных лазеров. Зависимость скорости диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от интенсивности и эллиптичности поляризации ИК-излучения, от энергии возбуждения колебательной и вращательной степеней свободы численно моделировалась в данной работе на примере молекулы хлористого водорода.

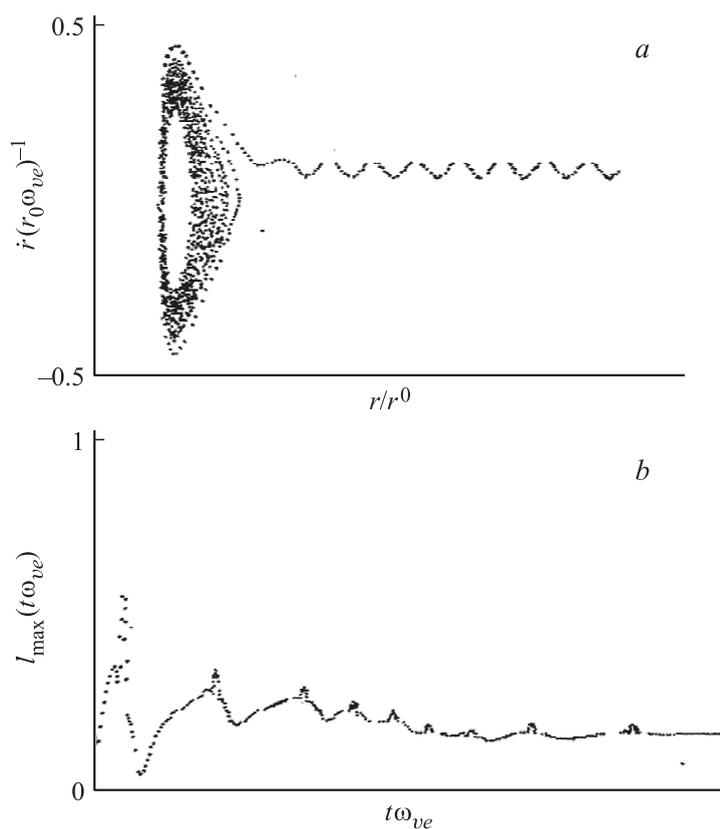
Исследуем на примере молекулы типа хлористого водорода ( $\text{HCl}$ ) зависимость скорости диффузионной диссоциации двухатомной молекулы от интенсивности ( $I$ ) и эллиптичности поляризации ( $P$ ) ИК-излучения, от начальной энергии возбуждения колебательной ( $E_v^0$ ) и вращательной ( $E_r^0$ ) степеней свободы. При этом рассмотрение не ограничено малыми колебаниями или жесткостью ротатора.

Уравнения движения молекулы  $\text{HCl}$  в  $(x, y)$ -плоскости, нормальной волновому вектору поля ИК-излучения имеют вид [15]

$$\begin{aligned} \mu \ddot{r} &= \mu \dot{\theta}^2 r - \frac{dU}{dr} + q(E_x \cos \theta \cos(\omega t) + E_y \sin \theta \sin(\omega t)), \\ \mu r \ddot{\theta} &= -2\mu \dot{r} \dot{\theta} - q(E_x \sin \theta \cos(\omega t) - E_y \cos \theta \sin(\omega t)), \end{aligned} \quad (1)$$

где точка означает производную по времени;  $\mu = 1.63 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ;  $q = 0.8 \cdot 10^{-10} \text{ CGSE}$  — эффективный заряд с учетом частично ионной связи молекулы  $\text{HCl}$  [16];  $r$  — расстояние между атомами молекулы (в равновесии  $r_e = 1.29 \text{ \AA}$ );  $\omega, E$  — частота и напряженность электрического поля инфракрасного излучения ( $P = E_y/E_x$ );  $\theta$  — фаза вращения вектора  $r$ ;  $U$  — потенциал Морзе с параметрами  $D = 4.5 \text{ eV}$ ,  $a = 3.66 \text{ \AA}^{-1}$ .

Уравнения (1) решались численно методом Рунге–Кутты. При этом частота  $\omega$  выбиралась равной характерной частоте колебаний молекулы хлористого водорода  $\omega_{ve} = 0.36 \text{ eV}$  ( $5.45 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ). Скорость



*a* —  $(r, dr/dt)$ -диаграмма диффузионной диссоциации молекулы HCl в поле линейно поляризованного ИК-излучения ( $I = 8.1 \cdot 10^{10} \text{ W/m}^2$ ,  $E_v = 3.55 \text{ eV}$ ,  $E_r = E_v \cdot 10^{-5}$ ); *b* — временная зависимость инкремента неустойчивости молекулы HCl в поле эллиптически поляризованного ИК-излучения ( $I = 1.4 \cdot 10^{10} \text{ W/m}^2$ ,  $E_v = 3.55 \text{ eV}$ ,  $E_r = E_v \cdot 10^{-5}$ ,  $P = 0.23$ ).

диффузионной диссоциации молекулы HCl оценивалась по времени  $\tau$  увеличения межатомного расстояния (в момент распада молекулы) до удвоенного равновесного значения [1].

На рисунке, *a* изображена  $(r, dr/dt)$ -диаграмма процесса диффузионной диссоциации молекулы хлористого водорода в поле линейно

Зависимость времени диффузионной диссоциации двухатомной молекулы

a) от интенсивности ИК-излучения					
$I \cdot 10^{-13}, \text{ W/m}^2$	220	81	56	13	9.0
$\tau w_{ve}$	10.1	193	192	216	> 500
b) от начальной энергии ее колебаний					
$E_v^0, \text{ eV}$	3.55	2.96	2.92	2.85	1.37
$\tau w_{ve}$	21.50	23.41	40.13	> 75	> 100
c) от начальной энергии ее вращения					
$E_v^0 \cdot 10^3 \text{ eV}$	$3.55 \cdot 10^{-2}$	0.355	3.55	7.1	8.9
$\tau w_{ve}$	21.50	22.00	22.30	22.50	> 100
d) от эллиптичности поляризации ИК-излучения					
$P$	0	0.23	0.33	0.41	0.48
$\tau w_{ve}$	21.50	62.30	30.00	92.30	215.52

поляризованного инфракрасного излучения. Здесь и далее энергия колебаний и вращения молекулы положительна и отсчитывается от нулевого значения. Видно, что траектория молекулы не описывается регулярной кривой. Предельное множество сечения Пуанкаре является подмножеством этой нерегулярной диаграммы, что позволяет сделать вывод о хаотичности динамики молекулы. Об этом же свидетельствует и положительное значение максимального ляпуновского показателя (см. рисунок, *b*).

Расчетная зависимость времени диффузионной диссоциации  $\tau$  от интенсивности линейно поляризованного ИК-излучения ( $E_v^0 = 3.55 \text{ eV}$ ,  $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$ ) имеет, как это видно из таблицы *a*, пороговый характер.

Пороговое значение интенсивности  $\approx 10^{10} \text{ W/m}^2$  диффузионной диссоциации молекулы HCl и число участвующих в диффузии резонансов ( $n \geq 4$ ) согласуется с аналитическими оценками [14].

Зависимость времени диффузионной диссоциации молекулы HCl в поле линейно поляризованного ИК-излучения от начальной энергии ее колебаний представлена в таблице *b* ( $I = 1.4 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ ,  $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$ ). Видно, что скорость диссоциации увеличивается с ростом  $E_v^0$ .

В таблице, *c* показано влияние начальной энергии вращения молекулы хлористого водорода на скорость ее диссоциации ( $I = 1.4 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ ,  $E_v^0 = 3.55 \text{ eV}$ ,  $P = 0$ ). Имеет место стабилизация динамики молекулы с увеличением  $E_r^0$  (порог  $\approx 10^{-2} \text{ eV}$ ). Это объясняется прямой зависимостью потенциала радиальных колебаний молекулы от энергии вращения и согласуется с результатами работ [12,15].

Наконец, в таблице, *d* представлена зависимость  $\tau$  от эллиптичности поляризации ИК-излучения ( $I = 1.4 \cdot 10^{11} \text{ W/m}^2$ ,  $E_v^0 = 3.55 \text{ eV}$ ,  $E_r^0 = E_v^0 \cdot 10^{-5}$ ).

Наблюдается сильное подавление диффузионной диссоциации молекулы хлористого водорода по мере перехода от линейной поляризации ИК-излучения к циркулярной, что согласуется с результатами работы [17].

Таким образом, численно методами сечений Пуанкаре и  $\lambda_{\text{max}}$  показано, что скорость диффузионной диссоциации гетерополярной молекулы HCl в поле лазерного ИК-излучения имеет пороговую зависимость от интенсивности излучения, начальной энергии колебаний и вращения молекулы и уменьшается по мере перехода от линейной поляризации ИК-излучения к циркулярной.

Отметим, что с развитием техники гамма-лазеров, по-видимому, станут реальными эксперименты по катализу ядерных реакций, в том числе и диффузионной „диссоциации“ ядер [16,18,19].

## Список литературы

- [1] Матрасулов Д.У. // Ядерная физика. 2001. Т. 64. С. 299.
- [2] Делоне Н.Б. Атом в сильном световом поле / Н.Б. Делоне. М.: Энергоатомиздат, 2010.
- [3] Halard F. // Physical Reports. 1989. V. 183. N 2. P. 37.
- [4] Гурздян Э.Р. // Изв. АН Арм. ССР. 1988. Сер. физ. Т. 23. С. 198.
- [5] Волкова Е.А. // ЖЭТФ. 1994. Т. 106. С. 1360.
- [6] Stevens M. // Physical Review. 1987. V. A36. P. 417.
- [7] Гонтис В.Г. // Литовский физический сб. 1987. Т. 27. С. 368.
- [8] Алексеев К.Н. // ЖЭТФ. 1994. Т. 105. С. 555.
- [9] Иванов В.Н. // Изв. вузов. Физика. 1993. № 9. С. 8.
- [10] Нефедов А.Л. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100. С. 803.
- [11] Гурздян Э.Р. // Опт. и спектр. 1988. Т. 65. С. 983.
- [12] Galbraith H. // J. Chemical Physics. 1983. V. 79. P. 5345.
- [13] Кабисов Р.С. // Сообщения АН ГССР. 1989. Т. 134. С. 69.

- [14] *Стратонович Р.Л.* // ЖЭТФ. 1995. Т. 108. С. 1328.
- [15] *Горчаков В.И.* // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. С. 468.
- [16] *Александров Ф.О.* // Ядерная физика. 1991. Т. 54. С. 54.
- [17] *Берман Г.П.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 5. С. 1553.
- [18] *Болотин Ю.Л.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1989. Т. 20. С. 878.
- [19] *Зарецкий Д.Ф.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 81. С. 429.
- [20] *Волькенштейн М.В.* Строение и физические свойства молекул / М.В. Волькенштейн. М.: АН СССР, 2011. 640 с.