

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.19+539.2

КУЛОНОВСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ПОЛИАТОМНЫХ
ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ПРИ ИХ МЕДЛЕННОМ
СКОЛЬЖЕНИИ ПО ПОВЕРХНОСТИ

Е. Д. Алексанова, В. В. Комаров, А. М. Попова, Х. Юнгклас*)

(НИИЯФ)

Показано, что в скользящих по поверхности полиатомных молекулах, имеющих подструктуры в виде одномерных цепей двухатомных диполей, со скоростями, меньшими скорости Бора, возникают коллективные колебательные возбуждения (эксимолы). Получено аналитическое выражение для вероятности возбуждения k эксимолей в цепи, содержащей m диполей, которая зависит от скорости скольжения и от параметров молекулы и поверхности.

В последнее десятилетие экспериментально обнаружен процесс накопления внутренней энергии в органических полиатомных молекулах, скользящих на атомных расстояниях по поверхностям различных сред со скоростями, меньшими скорости Бора ($v < 10^8$ см/с) [1–3]. Ранее нами была предложена модель кулоновского колебательного возбуждения двухатомных молекул при их медленном скольжении по поверхности [4]. Было показано также, что в полиатомных молекулах, содержащих подструктуры в виде одномерных цепей упорядоченных двухатомных диполей, например цепей $(\text{CH}_2)_n$, при скольжении по поверхности возникают коллективные вибрационные возбуждения (эксимолы). Накопление независимых эксимолей соответствует накоплению внутренней энергии в молекулах и приводит к их фрагментации, что наблюдается на опыте [5–7].

В настоящей работе в рамках предложенной модели получено аналитическое выражение для вероятности возбуждения одного эксимолы в полиатомных молекулах, скользящих по поверхности на атомных расстояниях, а также вероятности возбуждения k эксимолей в молекулах, содержащих цепи из m двухатомных диполей.

В основе предложенной модели лежит представление о том, что на молекулы, движущиеся со скоростью $v = (v_x, 0, 0)$, действует суммарное кулоновское поле атомов поверхности, расположенных почти периодически на расстоянии a друг от друга вдоль траектории движения. Предполагается, что поверхность параллельна плоскости xOy . Потенциал поля, усредненный по направлениям, перпендикулярным к траектории движения молекулы [5], имеет вид

$$V(\mathbf{R}, t) = \sum_{m=0}^{\infty} V_{m,0}(R_z) \exp\left\{i \frac{2\pi m R_x}{a}\right\} \exp\{-i\omega_m t\},$$

где $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$ — радиус-вектор молекулы относительно начала координат, расположенного на

поверхности,

$$V_{m,0}(R_z) = \frac{1}{a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dR_x \int_{-\infty}^{\infty} dR_y V(R) \exp\left\{-i \frac{2\pi m R_x}{a}\right\},$$

$V(R)$ — кулоновский потенциал одного атома поверхности. В приближении модели Томаса–Ферми для $R < 3\text{Å}$ он имеет вид [8]: $V(R) = (Ze/R) \times \exp(-R/a_{\text{eff}})$, где Ze — заряд ядра атома, $a_{\text{eff}} = Z^{-\frac{1}{3}} \cdot 0,88a_0$ — радиус экранирования этого заряда электронами атома, $a_0 = 0,5 \cdot 10^{-8}$ см.

Поле поверхности характеризуется спектром частот ω_m из полуинтервала $[2\pi v_x/a, \infty)$. Будем рассматривать двухатомные связи как электрические осцилляторы с дипольным моментом $\mathbf{D} = D_0 \mathbf{S} r/r_0$, где D_0 — дипольный момент, r_0 и r — равновесное и переменное расстояния между ядрами соответственно, \mathbf{S} — единичный вектор, совпадающий с осью связи. Тогда взаимодействие поля поверхности и двухатомных диполей описывается функцией

$$V(R, t, D) = \mathbf{D} \cdot \text{grad}V(R, t) =$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{D_0 r}{r_0} E_m(R_z) \exp\left\{i \frac{2\pi m R_x}{a}\right\} \exp\{-i\omega_m t\},$$

$$E_m(R_z) = S_z \frac{\partial}{\partial z} V_{m,0}(R_z) + 2\pi \frac{m}{a} S_x V_{m,0}(R_z).$$

Вероятность вибрационного возбуждения двухатомной связи в молекуле, движущейся вдоль поверхности на расстоянии R_z , может быть рассчитана в приближении постоянной траектории по теории возмущений в виде

$$P_{01}(R_z, v_x, t) = \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau} dt \langle \Phi_0(r, t) | V(\mathbf{R}, \mathbf{D}, t) | \Phi_1(r, t) \rangle \right]^2, \quad (1)$$

*) Philipps Universität, Marburg/L.

где $\Phi_0(r, t) = \phi_0(r) \exp(-i\omega_0 t)$, $\Phi_1(r, t) = \phi_1(r) \times \exp(-i\omega_1 t)$ — зависящие от времени волновые функции осциллятора в основном и первом возбужденном состоянии. Интеграл по времени в (1) может быть вычислен, так как функция имеет резонансное поведение при $\omega_m = \omega_1 - \omega_0 = \omega_{01}$. Тогда вероятность возбуждения двухатомного диполя в единицу времени имеет вид

$$\tilde{P}_{01}(v, R_z) = L\gamma \times \left[\exp \left\{ -R_z \sqrt{\delta^2 + \gamma^2} \right\} \left(\frac{\gamma}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} - 1 \right) \right]^2,$$

где $L = (2\pi M_{01} D_0 Z e)^2 (r_0^2 a^3 \cdot 3\hbar^2 \omega_{01})^{-1}$, $\gamma = \omega_{01}/v$, $\delta = a_{\text{eff}}^{-1}$, $M_{01} = \langle \phi_0(r) | r | \phi_1(r) \rangle$.

Если определить время скольжения молекулы как время ее нахождения в области действия кулоновских потенциалов атомов и положить $v_z = bv_x$, то вероятность возбуждения диполя запишется в виде

$$P_{01}(v) = \frac{L\gamma}{bv\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} \times \left[\exp \left\{ -R_z \sqrt{\delta^2 + \gamma^2} \right\} \left(\frac{\gamma}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} - 1 \right) \right]^2. \quad (2)$$

Если молекула содержит цепи упорядоченных валентных групп, то под действием периодического поля поверхности в них возникают коллективные колебательные состояния — эксимолы [9]. Вероятность возбуждения одного эксимоля может быть рассчитана на основе выражения (2), если собственную частоту колебаний двухатомной связи заменить собственной частотой эксимоля [5].

Вероятность возникновения k независимых эксимолей в подструктурах полиатомных молекул, состоящих из m двухатомных диполей, может быть рассчитана по теории вероятности:

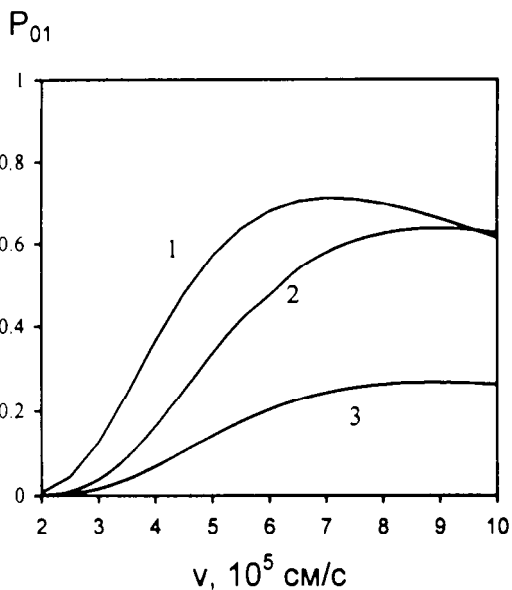


Рис. 1. Зависимость вероятности возникновения одного эксимоля от скорости молекулы при $Z = 8$, $a = 3 \text{ \AA}$ (1); $Z = 3$, $a = 3 \text{ \AA}$ (2); $Z = 3$, $a = 1 \text{ \AA}$ (3)

$$P_{mk} = \frac{m!}{k!(m-k)!} P_{01}^k (1 - P_{01})^{m-k}.$$

Как пример мы рассмотрели полиатомные молекулы, содержащие цепи диполей С–Н. Структурные и энергетические параметры таких цепей имеют следующие значения: $\omega_{01} = 1,2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $M_{01}^2 = 7 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$, $D_0 = 1,46 \text{ Д}$, $r_0 = 1,2 \text{ \AA}$. При вычислениях мы положили $b = 8 \cdot 10^{-3}$, $R_z = 0,8 \text{ \AA}$. На рис. 1 представлена зависимость вероятности возникновения одного эксимоля от скорости молекулы для различных комбинаций параметров поверхности. Исходя из выражения для P_{01} можно рассчитать вероятность возбуждения k эксимолей в цепи, состоящей из m диполей. Зависимость этой величины от скорости молекул для различных m и k приведена на рис. 2. Хорошо видно, что положение максимума вероятности при фиксированном m сильно зависит

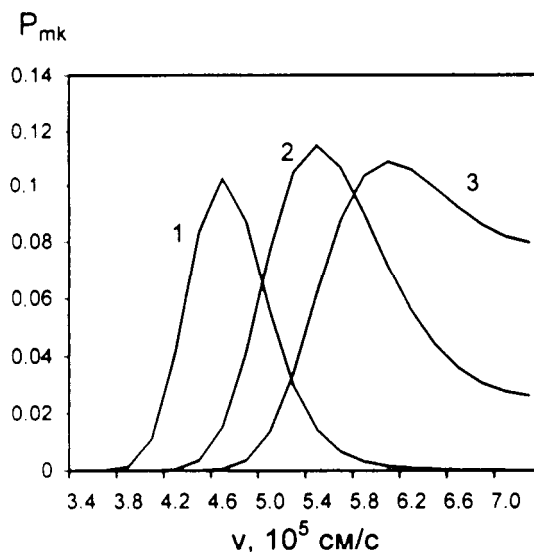


Рис. 2. Зависимость вероятности возникновения k эксимолей в цепи из m диполей от скорости молекулы при $m = 60$, $k = 30$ (1); $m = 50$, $k = 30$ (2); $m = 60$, $k = 40$ (3)

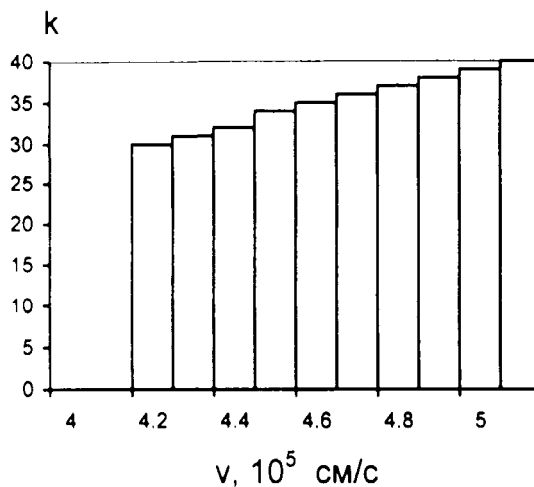


Рис. 3. Зависимость числа возникающих эксимолей k от скорости при $m = 60$ и пороговом значении вероятности P_{mk} на половине высоты максимума

от k . Для отрыва конкретного фрагмента молекулы необходимо накопление определенной энергии (количества эксимолей). Мы проанализировали зависимость числа возникающих эксимолей k от скорости при $m = 60$ и пороговом значении вероятности P_{mk} на половине высоты максимума. Результаты представлены на рис. 3. Видно, что вероятность процесса диссоциации полиатомных молекул является пороговой функцией скорости, что согласуется с результатами эксперимента [7].

Литература

1. Cooks R.G., Ast T., Mabud M.D.A. // Int. J. Mass Spectr. Ion. Process. 1990. **100**. P. 209.
2. Jones L., Dongre A.R., Somogy A., Wysocki V.H. // J. Am. Chem. Soc. 1994. **116**. P. 8368.
3. Schmidt L., Fritsch H.-W., Jungclas H. // Rapid Commun. Mass Spectr. 1993. **7**. P. 507.

4. Борзилов В.А., Затекин В.В., Комаров В.В. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1998. № 3. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 1998. No. 3).
5. Schmidt L., Popova A.M., Komarov V.V., Jungclas H. // Z. Naturforsch. 1996. **51a**. P. 1144.
6. Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H. // Mol. Phys. 1997. **91**, No. 1. P. 139.
7. Jungclas H., Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L. // Eur. Phys. J. 1998. **D1**. P. 193.
8. Оцуки Е.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985.
9. Komarov V.V., Schmidt L., Fritsch H. W., Jungclas H. // Comput. Mater. Sci. 1994. **2**. P. 427.

Поступила в редакцию
11.12.98

УДК 539.12.01

ПРОПАГАТОР ЗАРЯЖЕННОГО W -БОЗОНА В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ В ОБОБЩЕННОЙ R_ξ -КАЛИБРОВКЕ

А. М. Егоров, А. И. Студеникин

(кафедра теоретической физики)

Найдено точное решение уравнения для пропагатора заряженного W -бозона в обобщенной R_ξ -калибровке с учетом действия скрещенного электромагнитного поля. Полученное общее выражение согласуется с известным результатом для пропагатора в отсутствие электромагнитного поля, а также в электромагнитном поле для случаев унитарной и фейнмановской калибровок. Обсуждается принципиальная важность использования пропагатора W -бозона в R_ξ -калибровке при рассмотрении соответствующих петлевых процессов в электромагнитном поле.

При рассмотрении движения заряженных и нейтральных лептонов во внешнем электромагнитном поле в низшем порядке теории возмущений стандартной модели электрослабых взаимодействий Вайнберга–Салама возникают процессы, которые описываются однопетлевыми диаграммами, содержащими пропагатор заряженного W -бозона в электромагнитном поле. Необходимость использовать явный вид пропагатора W -бозона во внешнем поле возникает при расчете W -бозонного вклада в аномальный магнитный момент заряженного лептона (см., напр., [1–3]). Интерес к однопетлевым процессам в электромагнитном поле, содержащим виртуальные W -бозоны, стимулируется в последнее время также исследованием проблемы движения заряженных и нейтральных лептонов в реальных условиях астрофизических сред [4–7].

В настоящей статье обсуждается вопрос о пропагаторе W -бозона во внешнем скрещенном электромагнитном поле, которое, как известно [8], может быть использовано в качестве модели при рассмотрении широкого класса взаимодействий релятивистских частиц в произвольных электромагнитных полях.

Явный вид пропагатора W -бозона для случая

унитарной, а также фейнмановской калибровки в скрещенном электромагнитном поле получен в работе [9]. Часто при проведении расчетов петлевых диаграмм предпочтение отдается унитарной калибровке. Это связано с тем, что в ней, в отличие от общей R_ξ -калибровки или фейнмановской калибровки, пропагаторы духов и нефизических бозонов равны нулю и поэтому число диаграмм, дающих вклад в характеристики конкретного процесса, минимально. Однако использование с самого начала расчета явного вида пропагаторов векторных бозонов, соответствующего унитарной калибровке, может приводить к неоднозначностям в окончательных выражениях для характеристик процессов, устранение которых, вообще говоря, требует проведения дополнительной процедуры. Так, например, при вычислении петлевых вкладов от процессов типа $l \rightarrow \nu W \rightarrow l$ [1, 9] в аномальный магнитный момент лептона l в унитарной калибровке необходимо производить процедуру регуляризации, т. е. замену $\frac{1}{p^2 - M^2} \rightarrow -\frac{\Lambda^2}{p^2 - \Lambda^2} \frac{1}{p^2 - M^2}$ с последующим устремлением $\Lambda \rightarrow \infty$. Эта особенность проявляется в расчетах как петлевых процессов без учета действия внешнего электромагнитного поля [10], так и петлевых процессов, протекающих во внешнем поле [1, 7].