

РЕЗОНАНСНАЯ СТРУКТУРА ЗАВИСИМОСТИ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПАРАМАГНИТНОГО ГАЗА ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Н.С.Аверкиев, М.И.Дьяконов

Показано, что зависимость кинетических коэффициентов парамагнитного газа от магнитного поля в условиях насыщения эффекта Зенфтлебена должна содержать множество острых пиков, обусловленных пересечениями зеемановских уровней.

Настоящая работа стимулирована сообщением Горелика ¹ о наблюдении весьма необычного и неожиданного эффекта: осцилляций теплопроводности газов (H_2 и O_2) в магнитном поле $1 - 2$ кЭ при комнатной температуре. Относительная амплитуда осцилляций для O_2 была порядка 10^{-5} , а их период составлял несколько десятков эрстед.

Ниже рассмотрено неизвестное ранее явление резонансного изменения кинетических коэффициентов парамагнитного газа, обусловленное пересечениями уровней в магнитном поле, которое, возможно, объясняет результаты экспериментов ¹. Как известно ², уменьшение теплопроводности газа в магнитном поле (эффект Зенфтлебена), обусловлено прецессией угловых моментов молекул вокруг направления поля в промежутках между столкновениями и зависимостью сечения рассеяния от взаимной ориентации момента и скорости молекулы. С ростом магнитного поля расщепление уровней становится не эквидистантным, на языке классической механики это означает, что гиромагнитное отношение начинает зависеть от ориентации момента относительно магнитного поля и величины поля ³. При еще больших полях (порядка 1 кЭ для O_2) происходят многочисленные пересечения зеемановских уровней тонкой структуры. Каждому пересечению соответствует обращение в ноль частоты прецессии молекул, моменты которых направлены под соответствующим углом к полю. Для этих молекул ситуация становится такой же, как и в нулевом поле, с чем и должно быть связано резонансное возрастание теплопроводности при значениях магнитного поля, соответствующих пересечениям уровней.

Схема зеемановских уровней кислорода представлена на рис. 1 для значения вращательного квантового числа $K = 3$ (фактически, при комнатной температуре существенны $K \sim 10$). В отсутствие поля при каждом K имеется триплет, причем $\lambda = 6 \cdot 10^4$ МГц, а величина Δ_K существенно меньше: $\Delta_K \approx (0,6K - 2,7) \cdot 10^3$ МГц (при $K > 7$). В магнитном поле, таком что $\mu_0 H \ll \lambda$ (μ_0 – магнетон Бора) расщепление уровней с полным моментом $J = K \pm 1$ линейно по полю с g -факторами $g_{K+1}^{(K)} = 2/(K+1)$ и $g_{K-1}^{(K)} = -2/K$. Расщепление этих уровней остается практически линейным и при $\mu_0 H \sim \Delta_K$, вследствие чего происходят многочисленные пересечения зеемановских подуровней. Исключения составляют подуровни с одинаковыми значениями проекции момента m на направление поля. Для этих подуровней происходят так называемые антипересечения (см. рис. 1) с минимальным расстоянием между уровнями $\delta_{Km} = (\Delta_K^2 / 4\lambda)(K(K+1)/m^2 - 1)$. Линейное расщепление уровня с $J = K$ мало ($g_K^{(K)} = 2/K(K+1)$), поэтому уже в сравнительно малых полях становится существенным возмущение зеемановской структуры этого уровня благодаря взаимодействию с уровнями $J = K \pm 1$. При $\mu_0 H \ll \lambda$ расщепление уровня с $J = K$ описывается при $K \gg 1$ формулой ³

$$E_{Km} = \frac{m}{K^2}(2\mu_0 H) - \left(1 - \frac{m^2}{K^2}\right) \frac{(2\mu_0 H)^2}{\lambda}. \quad (1)$$

Таким образом, при $J = K$ происходят пересечения уровней при значениях магнитного поля $2\mu_0 H = -\lambda/(m_1 + m_2)$. Пересечения подуровней с $J = K \pm 1$ происходят при $2\mu_0 H = -K\Delta_K/(m_1 + m_2)$, за исключением случая $m_1 = m_2$. Обе эти формулы применимы при $|m_1 + m_2| \gg 1$. Для кислорода при $m_1 \sim m_2 \sim K \sim 10$ оба типа пересечений наступают в полях порядка 1 кЭ.

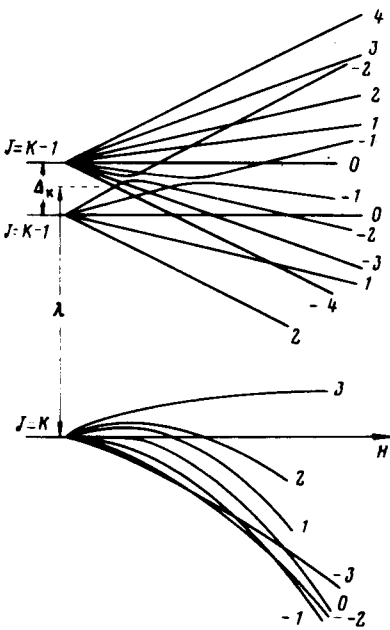


Рис. 1

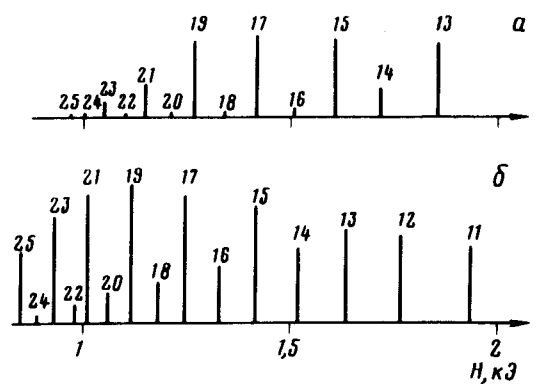


Рис. 2

Рис. 1. Схема зеемановского расщепления уровней тонкой структуры в молекуле O_2

Рис. 2. Положения резонансных пиков теплопроводности и их относительные амплитуды для $K = 13$. Указаны значения $|m_1 + m_2|$ для пересекающихся уровней: $a - J = K \pm 1$, $b - J = K$

Каждое пересечение должно приводить к резонансному изменению кинетических коэффициентов. Можно сказать, что эффект Зенфлгебена связан с пересечением всех зеемановских подуровней в нулевом поле. Полное число этих подуровней порядка \bar{K}^2 , где \bar{K} — среднее тепловое значение K . Очевидно поэтому, что по отношению к эффекту Зенфлгебена рассматриваемый эффект имеет порядок $1/\bar{K}^2 \sim 10^{-2}$.

В качестве иллюстрации приведем расчет теплопроводности парамагнитного газа в рамках простейшей модели, в которой вводится время релаксации τ , зависящее от взаимной ориентации вращательного момента \mathbf{K} и скорости молекулы \mathbf{V}

$$1/\tau = (1/\tau_0)(1 + a\Gamma), \quad \Gamma = (\mathbf{K}\mathbf{u})^2/K^2 - 1/3, \quad (2)$$

где \mathbf{u} — единичный вектор вдоль \mathbf{V} , a — параметр несферичности, предполагаемый малым. Запишем матрицу плотности газа в виде

$$\rho_{ab}(K, \mathbf{V}) = \rho_K^{(0)} \delta_{ab} + (\tau_0 \mathbf{V} \nabla T/T) g_{ab}(K, \mathbf{V}), \quad (3)$$

где первый член — равновесная матрица плотности, значки a и b соответственно обозначают квантовые числа $(J_1 m_1)$ и $(J_2 m_2)$ при заданном K . Линеаризованное кинетическое уравнение для g_{ab} имеет вид

$$(E(K, \mathbf{V})/T - \gamma/2) \rho_K^{(0)} \delta_{ab} + (1 + i\Omega_{ab}^{(K)} \tau_0) g_{ab} + (a/2)(\hat{\Gamma} \hat{g} + \hat{g} \hat{\Gamma})_{ab} = 0. \quad (4)$$

Здесь $E(K, \mathbf{V})$ — энергия молекулы со скоростью \mathbf{V} и вращательным числом K , $\Omega_{ab}^{(K)}$ — разность энергий состояний a и b при заданном K , $\hat{\Gamma}$ — оператор, соответствующий (2). В уравнениях (3), (4) мы пренебрегли энергиями спинорбитального и зеемановского расщеплений всюду за исключением величины $\Omega_{ab}^{(K)}$. Тензор теплопроводности $\hat{\kappa}$ выражается через g :

$$\kappa_{ij} = - (\tau_0/T) \int d^3V V_i V_j \sum_{Ka} g_{aa}(K, \mathbf{V}) E(K, \mathbf{V}). \quad (5)$$

Для простоты мы ограничимся вычислением величины $\kappa = \text{Sp} \hat{\kappa} / 3$, определяющей полный тепловой поток от точечного источника.

Искомый эффект, как и эффект Зенфтлебена возникает во втором порядке по параметру a . Решая уравнение (4) методом последовательных приближений и пользуясь (5), найдем добавку $\Delta\kappa$ к теплопроводности, пропорциональную a^2 :

$$\frac{\Delta\kappa}{\kappa} = \frac{2a^2}{21\overline{K^2}} \sum_K q^2(2q^2 + 3)e^{-q^2} \sum_{ab} \frac{\langle |\Gamma_{ab}|^2 \rangle}{1 + (\Omega_{ab}^{(K)}/\tau_0)^2}, \quad (6)$$

где $q = K/\overline{K}$, $\langle \dots \rangle$ — усреднение по углам u . Матричные элементы Γ_{ab} отличны от нуля при $m_1 = m_2, m_2 \pm 1, m_2 \pm 2$. В области $\mu_0 H \ll \Delta_K, \lambda\overline{K}$ сумма по a, b в (6) имеет вид

$$\frac{8}{(15)^2} (2K+1) \sum_{J=K-1}^{K+1} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{1 + (\Omega_J^{(K)}/\tau_0)^2} + \frac{1}{1 + (2\Omega_J^{(K)}/\tau_0)^2} \right), \quad (7)$$

где $\Omega_J^{(K)} = g_J^{(K)} \mu_0 H / \hbar$ — частота прецессии в состоянии (K, J) . При этом формула (6) описывает эффект Зенфтлебена.

При пересечении уровней одна из частот $\Omega_{ab}^{(K)}$ обращается в ноль, что дает резонансный пик в теплопроводности, который описывается соответствующим членом формулы (6). Антипересечения уровней $(K+1, m)$ и $(K-1, m)$ приводят к такому же эффекту, если величина $\delta_{Km} \tau_0$ не слишком велика. Матричные элементы Γ_{ab} , определяющие амплитуды пиков, для $J \neq K$ можно вычислять на невозмущенных функциях (J, m) . Для $J = K \pm 1$ необходимо учитывать смешивание состояний в областях антипересечений. На рис. 2 представлены положения резонансных пиков и их относительные амплитуды, рассчитанные для обоих типов пересечений при $K = 13$.

Величина $1/\tau_0$ порядка 2 МГц/тор. Учитывая наклоны, под которыми происходят различные пересечения, находим ширины пиков по магнитному полю. Для $J = K$ и $m_1 - m_2 = \Delta m$ имеем $\Delta H \sim K^2 / \Delta m \text{ Э/тор}$, для уровней с $J = K \pm 1$ ширина гораздо меньше: $\Delta H \sim K / |m_1 + m_2| \text{ Э/тор}^{-1}$.

Таким образом, пересечения уровней в магнитном поле должны приводить к богатому спектру резонансных пиков в теплопроводности (и других кинетических коэффициентах). Область магнитных полей, характерные расстояния между соседними пиками и амплитуда эффекта согласуются с данными ¹ для O_2 . Однако, в ¹ наблюдался осцилляционный эффект также и для водорода, в том же интервале полей, но с амплитудой на два порядка меньшей. Поскольку в полях ~ 1 кЭ у молекулы H_2 никаких пересечений уровней нет, этот результат с изложенной здесь точки зрения непонятен. Он мог бы быть следствием небольшой ($\sim 1\%$) примеси кислорода в водороде. Непонятна также наблюдавшаяся зависимость эффекта, в особенности периода осцилляций, от давления. Следует отметить, однако, что предсказываемые нами резонансные пики при низких давлениях должны быть очень узкими, и для их экспериментального изучения требуется высокая однородность поля.

Проведенное рассмотрение показывает, что в кинетических явлениях могут проявляться тонкие особенности энергетического спектра молекулы.

Литература

1. Горелик Л.Л. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, 403.
2. Каган Ю., Максимов Л.А. ЖЭТФ, 1961, 41, 842; 1966, 51, 1893.
3. Максимов Л.А. ЖЭТФ, 1971, 61, 605.
4. Таунс Ч., Шавлов А. Радиоспектроскопия. М.: ИИЛ, 1959.