

РЕЗОНАНСНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА АТОМЫ НА ПОВЕРХНОСТИ
И АТОМЫ В МОЛЕКУЛАХ; СЕЛЕКТИВНАЯ РАСКАЧКА,
СЕЛЕКТИВНАЯ РЕАДСОРБЦИЯ И АДСОРБЦИЯ;
ВОЗБУЖДЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА
НАБОРОМ РЕЗОНАНСНЫХ ЧАСТОТ ИЛИ ВНУТРЕННИМИ ПЕРЕХОДАМИ

Г.А. Аскаръян, В.А. Намиот

Рассмотрена резонансная раскачка и отрыв атомов на поверхности вещества под действием ЭМ или гиперзвукового поля, что может быть использовано для выделения сортов атомов, для очистки поверхностей, для генерации мощного гиперзвука, и т. п.

Рассмотрена задача возбуждения нелинейного осциллятора (атом в молекуле или у поверхности) набором резонансных частот и показаны условия сведения ее к задаче о резонансном возбуждении линейного. Предложена раскачка внешних колебаний внутренними переходами.

Отмечена возможность выделения определенных атомов из адсорбированных с помощью туннельного эффекта.

Селективное многоступенчатое возбуждение и диссоциация молекул интенсивным ЭМ полем были рассмотрены впервые в статьях [1,2] с различными особенностями и способами сильного возбуждения нелинейного осциллятора, появлением новых частот раскачки в интенсивных полях (за счет поляризационных сил). Эта проблема селективного возбуждения представляет значительный интерес для осуществления и интенсификации определенных химических реакций, для выделения сортов атомов, для селективного биовоздействия и др.

В данной работе рассматриваются новые возможности резонансной раскачки нелинейных осцилляторов и резонансного воздействия на атомы на поверхности вещества, позволяющие, в зависимости от подбора условий осуществлять или мощную генерацию когерентного гиперзвука или осуществлять селективную реадсорбцию или адсорбцию атомов определенных сортов.

1. *Адсорбция молекул и атомов* поверхностями осуществляется силами взаимодействия, потенциал которых $U(x)$ делает возможным резонансную раскачку колебаний прилипших атомов. Поскольку при заданном $U(x)$ резонансная частота (т. е. расстояния между уровнями) зависит от массы атома, то возможна селективность воздействия, особенно ввиду возможной высокой одинаковости $U(x)$ для разных изотопов и изомеров атомов *при высокой однородности поверхности* и энергетическом выборе атомов определенных мест прилипания в ячейках кристаллической решетки (места соответствующие минимуму энергии). Если адсорбция будет происходить не равномерно, а пятнами (двумерных кристаллов с размерами большими десятков Å), то подавляющая часть атомов, расположенных не по периметру пятен будет иметь одинаковый потенциал связи и, поэтому, пригодны для селективности.

Вместо слоя адсорбции можно использовать для резонансной раскачки поверхностный слой атомов самого вещества. Эти атомы поверхнос-

ти обладают частотой колебаний и потенциалом связи, отличными от частоты и связи внутриобъемных атомов. Однако частоты в этом случае более высокие и, что самое главное, их нельзя менять без смены поверхности, в то время как в случае адсорбции замена адсорбента меняет частоту при одной и той же поверхности. По порядку величины резонансные частоты колебаний атомов на поверхности $\omega \approx \sqrt{K/M} \sim 1/\sqrt{M} \sim 10^{12} + 10^{13} \text{ сек}^{-1}$, причем $\Delta\omega/\omega \approx \Delta M/2M$.

Возбуждающая сила может быть связана в гетерополярном случае с наличием заряда у атома $F \approx q_{\text{эфф}} E$, где $q_{\text{эфф}} \approx 0 + e$, или гомеополярном случае с его дипольным моментом $F \approx d_0 (\partial E / \partial x)$ или поляризация и взаимодействием с остальной частью $F \approx (\partial / \partial R)(d^2 / R^3) \approx 3d^2 / R^4$, где $d \approx dE$ и

$$E_{\text{эфф}} \approx \frac{1}{q_{\text{эфф}}} F \approx \frac{3a^2 E^2}{q_{\text{эфф}} R^4} \sim \left\{ 3 \left(\frac{a}{R} \right)^4 \frac{a^2 E}{q_{\text{эфф}}} \right\} E \gg (10^{-7} E) E$$

в предположении сравнения с $q_{\text{эфф}} \ll e$, где $a \approx a^3$.

Более эффективным может оказаться возбуждение гомеополяров инерционной силой $F \approx M \ddot{\xi}(t)$, где $\xi(t)$ амплитуда колебаний поверхности (см. ниже).

2. Излучение гиперзвуковых фононов при резонансном возбуждении атомов на поверхности. Если поверхностная концентрация N_1 , адсорбированных атомов, их массы M , скорость колебаний u и частота ω , то амплитуда гиперзвуковой волны $\Delta p_s \approx N_1 u M \omega$ и плотность звуковой мощности $I_s \approx (\Delta p_s)^2 / \rho c_s$ например, при $N_1 \approx 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $M \approx 10^{-22} \text{ г}$, $u \approx 10^4 \text{ см/сек}$ получим $\Delta p_s \approx 3 \cdot 10^4 \text{ атм}$, и $I_s \approx 10^4 \text{ вт/см}^2$ — колоссальные импульсные плотности потока гиперзвука очень высокой частоты, поглощение которого мало лишь при очень низких температурах.

Оценим ширины линий колебаний из-за излучения звука. Время диссипации $\tau \sim N_1 M u^2 / I_s \approx \rho c_s / N_1 M \omega^2 \approx 10^3 / N_1 \text{ сек}$, т. е. $\Delta\omega/\omega \sim 1/\tau\omega < \Delta M/M$ при выборе $N_1 \approx 10^{13} + 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Для уменьшения ширины линий и уменьшения звукового излучения на несколько порядков можно подобрать толщину слоя подложки, к которой прилипают атомы так, чтобы излученные фононы не излучались (мала толщина подложки) или возвращались и поглощались не с той же фазой, например, чтобы на толщине укладывалось нечетное число четвертей длины звуковой волны $l = \lambda_s (2n + 1)/4$, что обеспечивает обратное поглощение излученного фонона.

Для сильного возбуждения колебаний в молекуле и возбуждения колебаний адсорбированных атомов желательно знать эффективность возбуждения осциллятора.

3. Возбуждение нелинейного осциллятора набором резонансных частот. Если задан потенциал, удерживающий атом $U(x)$ и сила, раскачивающая его $F(t)$, то гамильтониан

$$\hat{H} \approx - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) + xF(t) .$$

В случае близком к гармоническому $U(x) \approx \frac{1}{2} M \omega^2 x^2$ и вероятность возбуждения n -го уровня при заданном $F(t)$

$$w_n \approx \frac{1}{n!} \{ \epsilon(t) / h\omega \}^n \exp \{ - \epsilon(t) / h\omega \},$$

где $\epsilon(t)$ — квазиклассическая работа, совершенная над осциллятором, Например, при точном резонансе при $F \approx F_0 \cos \omega t$ она равна $\epsilon \approx (\int |F| dt)^2 / M \approx (F_0 t)^2 / M$.

Однако вид $U(x)$ может существенно отличаться от гармонического. Ниже приведем условия возбуждения сильно нелинейного осциллятора набором частот и покажем, когда возбуждение может стать сильным достаточно быстро.

Предположим, что известны уровни энергии E_n и матричные элементы переходов $g_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n dx$, где ψ_m и E_m — для невозмущенного гамильтониана.

$$\text{Будем искать возбуждающее поле в виде } E = \sum_k \frac{1}{2} A_k e^{i \omega_{k+1, k} t} + \text{к.с.},$$

где $\omega_{k+1, k} = (E_{k+1} - E_k) / h$, т. е. набора резонансных частот.

$$\text{Задав возмущенную волновую функцию в виде } \Psi = \sum_m C_m(t) \psi_m e^{-E_m i / h}$$

и подставив ее в уравнение Шредингера получим $\dot{C}_m = \frac{1}{i h} \sum_n g_{mn} e^{i \omega_{mn} t} F(t) C_n$

или задав $F(t)$ в явном виде и оставляя лишь неосциллирующие члены

$$\dot{C}_m \approx (q \epsilon \phi / 2 i h) \{ g_{m, m+1} A_m C_{m+1} + g_{m, m-1} A_{m-1}^* C_{m-1} \}.$$

Выбрав $q A_m = (F_0 / i) \sqrt{(m+1) h / 2 M \omega} / g_{m, m+1}$ получим $\dot{C}_m = - (F_0 / 2 h) \{ \sqrt{(m+1) h / 2 M \omega} C_{m+1} - \sqrt{m h / 2 M \omega} C_{m-1} \}$, но такое уравнение описывает проход через уровни в гармоническом осцилляторе под действием резонансного воздействия $F_0 \cos \omega t$, что подтверждает сильное воздействие выбранного поля. Кроме набора резонансных частот можно осуществить свипирование частоты [1, 2], проследивающие движение частиц по возбужденным уровням, набор последовательно или попеременно включаемых частот.

Оценим величину полей, необходимых для сильной быстрой раскачки колебаний n -го уровня при подавлении затухания. Из условия $(F_0 t)^2 / M \sim \epsilon_n \sim n h \omega$ получим: для гетерополярной связи $E \approx \sqrt{M n h \omega} / t q \approx v / \text{см}$ для $n \approx 10$, $q \approx 0,1$ и $t \approx 30$ мксек. Для гомеополярной связи такая же эффективность воздействия может быть осуществлена гиперзвуковыми колебаниями с амплитудой $\xi = F_0 / \omega^2 M$, т. е. при плотности потока звука $I_s \approx (\frac{1}{2}) \xi^2 \omega^2 \rho c_s = F_0^2 \rho c_s / 2 \omega^2 M^2$. Поскольку давление в звуковой волне $\Delta p_s \approx \rho c_s \xi \omega \approx \rho c_s F_0 / M \omega$, то для $F_0 \approx \sqrt{M n h \omega} / t$ получим $\Delta p \approx \rho c_s \sqrt{n h / M \omega} / t \sim 3 \cdot 10^{-4}$ атм, что соответствует плотностям мощности гиперзвука $I_s \approx (\Delta p_s)^2 / \rho c_s \approx 10^{-8}$ вт/см², поглощение которого может быть сделано малым при низких температурах.

В случае возбуждения звука давлением радиоволн или света (смещение близких частот или модуляция света на частоте ω) необходима плотность мощности $I \approx \Delta p c \approx 3 \cdot 10^5 \text{ вт/см}^2$, однако при возбуждении силой Лоренца от взаимодействия поверхностного тока с внешним сильным постоянным магнитным полем H^* получим $\Delta p_s \sim \frac{1}{c} J H^* \approx H_0 H^* / 8\pi$, т. е. необходимы амплитудные поля $H_0 \approx 8\pi \Delta p_s / H^* \approx 3 \cdot 10^{-2}$ э, что соответствует плотностям потока радиоизлучения $I \sim (H_0^2 / 4\pi) c \approx 0,3 \text{ вт/см}^2$. Использование ЭМ (или звуковых) резонаторов может еще уменьшить необходимые мощности. Возможно возбуждение звука воздействием на противоположную поверхность пластины.

Рассмотренные резонансные адсорбционные процессы могут быть реализованы как на поверхности монокристалла, так и на большой по площади поверхности многих мелких кристалликов.

Резонансная реадсорбция может быть использована не только для селекции по сортам атомов, но и для очистки поверхностей от адсорбентов. Легко осуществить обратимые условия, при которых будет происходить селективная адсорбция из-за резонансного отбора энергии подлетающих атомов.

4. *Туннельный эффект атомов* под действием поля или инерции также может быть использован для разделения масс ввиду сильной экспоненциальной зависимости вероятности туннелирования от массы $W_{\text{тун}}(M)$. Действительно, $W_{\text{тун}}(M) \approx \omega e^{-K - (\Delta M/M)K}$, где $K \approx (2/\hbar) \int \sqrt{M(U-E)} dx$. Полагая $W_{\text{тун}} \lesssim 1/\tau_0 \approx 10^5$; ($K \gtrsim 15$); $e^{-(\Delta M/M)K} \approx 5 \div 10$, получим достаточную эффективность выделения не при очень малых $\Delta M/M$. Возможно сочетание резонансной раскачки на первых уровнях с последующим облегченным туннелированием, или нагревный отрыв раскаченных атомов.

5. *Воздействие на осциллирующую двухуровневую систему.* Если система (атом, молекула, и т. п.) совершает под действием резонансного поля $E_0 \sin \omega t$ переходы между двумя электронными или колебательными уровнями (эти переходы для двухуровневой системы совершаются с одного уровня на другой и обратно с частотой $\Omega = 2d_{1,2}E_0/\hbar$ где $d_{1,2}$ — дипольный матричный элемент, E_0 — амплитуда резонансного поля), то эти переходы можно использовать для раскачки системы как целого в другом, даже статическом поле, если, например, система имеет разные поляризуемости или дипольные моменты или потенциалы взаимодействия, находясь на разных уровнях. В этом случае подбор частоты раскачки к резонансной даже в случае нелинейности связи осуществляется просто изменением во времени амплитуды поля $E_0(t)$ изменяющей $\Omega(t) \ll \omega$.

Физический институт им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
22 апреля 1975 г.

Литература

- [1] Г.А.Аскарьян. ЖЭТФ, 46, 403, 1964.
[2] Г.А.Аскарьян. ЖЭТФ, 48, 666, 1965.