

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ В ИЗЛУЧЕНИИ НЕЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

И. С. Барбаров, А. Ф. Клиских

Воронежский государственный университет

В данной работе в рамках модели заряженного нелинейного осциллятора найдены и проанализированы спектральные особенности дипольного излучения в рамках классической теории. В частности, получен вид спектральной плотности излучения для различных режимов движения. Детально рассмотрен важный с точки зрения эксперимента [1] переход от дискретного спектра излучения осциллятора к дискретному спектру ротатора. Отметим интересный факт появления непрерывного спектра излучения, возникающего при движении по сепаратрисе. Получен энергетический колебательно-вращательный спектр нелинейного осциллятора в рамках квазиклассического приближения квантовой механики. Неэквидистантность этого спектра отражает особенности нелинейной динамики данной системы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Важной проблемой спектроскопии молекулярных комплексов является изучение низкочастотных колебательных и вращательных резонансов в спектральной области от $1-5 \text{ см}^{-1}$ до 100 см^{-1} (терагерцовый диапазон). Экспериментальные методики когерентной четырёхфотонной спектроскопии позволяют детально с точностью до 0.1 см^{-1} исследовать особенности спектральных проявлений как вращательного, так и колебательного движений фрагментов молекул в процессе ориентационной релаксации [1]. Хорошо известно, что вращения и колебания могут быть проанализированы в рамках одной модели нелинейного осциллятора [2, 3]. Поэтому можно поставить задачу о нахождении спектра излучения заряженного нелинейного осциллятора с целью единого описания колебательно-вращательного спектра вибрационного движения фрагментов молекул в терагерцовом диапазоне.

2. МОДЕЛЬ НЕЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Используемая в данной работе модель нелинейного осциллятора представляет собой заряженный плоский маятник длиной l с массой m и зарядом e в поле с силой U_0 , изображённый на рисунке 1. Это механическая система с одной степенью свободы и обобщённой координатой является угол отклонения от положения устойчивого равновесия φ . Колебания в общем случае не являются малыми, а вращения свобод-

ными. Динамика системы легко анализируется в рамках классической механики.

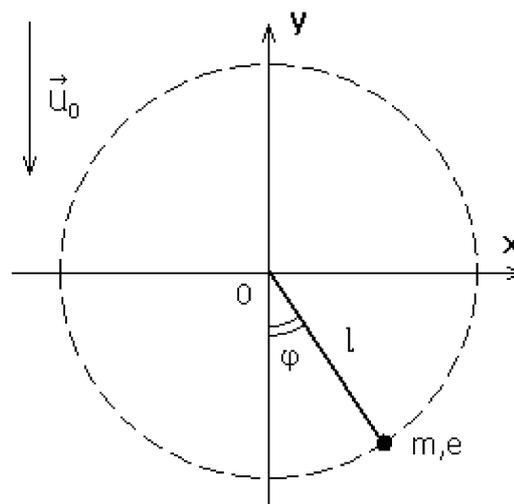


Рис. 1. Модель нелинейного осциллятора.

Такая система, как известно, описывается уравнением:

$$\ddot{\varphi} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0, \quad (1)$$

где $\omega_0^2 = U_0/ml^2$. Это основное уравнение модели нелинейного осциллятора, решение которого определяет закон движения. Очевидно, что уравнение (1) в случае малых колебаний $\varphi \ll 1$ переходит в уравнение гармонического осциллятора:

$$\ddot{\varphi} + \omega_0^2 \varphi = 0.$$

Таким образом ω_0 имеет смысл собственной частоты колебания гармонического осциллятора, имеющего те же параметры, что и исходная система.

Для характеристики движения нелинейного маятника определяют параметр нелинейности:

$$\chi^2 = \frac{\varepsilon + \omega_0^2}{2\omega_0^2}, \quad (2)$$

где ε — постоянная с размерностью квадрата частоты, имеющая смысл энергии системы. В зависимости от величины параметра нелинейности выделяют три режима движения системы: $\chi > 1$ — вращения, $\chi < 1$ — колебания и третий вид $\chi = 1$ — движение по сепаратрисе. При возрастании энергии переход от колебаний к вращению происходит через сепаратрису, движение на которой соответствует тому, что маятник начинает движение из верхнего неустойчивого положения равновесия в момент времени $t = -\infty$ и, сделав один оборот, возвращается в него в момент времени $t = \infty$. Соответствующие законы движения имеют вид:

$$\chi < 1 \sin(\varphi/2) = \chi \operatorname{sn}(\omega_0 t | \chi), \quad (3a)$$

$$\chi > 1 \varphi(t) = 2 \operatorname{am}(\omega_0 t \chi), \quad (3b)$$

$$\chi = 1 \varphi(t) = -\pi + 4 \arctan(e^{\omega_0 t}). \quad (3c)$$

Здесь $\operatorname{sn}(x | t)$ — синус Якоби, а $\operatorname{am}(x)$ — амплитуда Якоби.

Как показано в [3] законы движения для колебаний и вращений можно выразить в виде тригонометрических рядов по времени. Для случая колебаний:

$$\varphi(t) = 4\omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\omega_n t)}{\omega_n \cosh(K' \omega_n / \omega_0)}, \quad (4)$$

где $K' = K(k')$ — эллиптический интеграл первого рода, $k' = \sqrt{1 - k^2}$ и $k = \sin \varphi_0 / 2$ (φ_0 — начальный угол отклонения маятника). Здесь ω это средняя частота колебания, которая определяется как:

$$\omega = \frac{\pi \omega_0}{2K}. \quad (5)$$

Частотный спектр системы в этом случае содержит только нечетные гармоники $\omega_n = (2n - 1)\omega$. Для вращений аналогично:

$$\varphi(t) = 2\omega t + 4\omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\omega_n t)}{\omega_n \cosh(K' \omega_n / \omega_r)}, \quad (6)$$

где $k = \omega_0 / \omega_r$, ω_r — половинная частота свободного вращения. В данном случае ω — половинная частота среднего вращения, которая введена для того, чтобы придать формулам похожий вид. Она определяется формулой:

$$\omega = \frac{\pi \omega_r}{2K}. \quad (7)$$

Учитывая такую запись закона движения, получаем, что спектр вращений в отличие от колебаний содержит только четные гармоники $\omega_n = 2n\omega$.

Следует отметить, что законы движения, приведённые здесь, найдены без учета потери энергии системой в результате излучения.

3. СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ ИЗЛУЧЕНИЯ

Спектральная плотность излучения системы в соответствии с формулами классической электродинамики в дипольном приближении определяется известным соотношением [5]:

$$I(\omega) = \frac{2e^2}{3c^3} (|\ddot{x}(\omega)|^2 + |\ddot{y}(\omega)|^2), \quad (8)$$

где e — заряд, c — скорость света, $\ddot{x}(\omega)$, $\ddot{y}(\omega)$ — фурье-образы компонент ускорения. Используя известные законы движения, найдем спектральную плотность для различных режимов.

3.1. ДВИЖЕНИЕ ПО СЕПАРАТРИСЕ

В режиме движения по сепаратрисе закон движения нелинейного осциллятора имеет вид:

$$x(t) = l \sin(\varphi(t)),$$

$$y(t) = -l \cos(\varphi(t)),$$

$$\varphi(t) = -\pi + 4 \arctan(e^{\omega_0 t}).$$

Воспользовавшись свойствами фурье-преобразования получаем, что фурье-образы компонент ускорения представляются в виде интегралов:

$$\ddot{x}(\omega) = \frac{\omega^2 l}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \left(\frac{8e^{\omega_0 t}}{(1 + e^{2\omega_0 t})^2} - \frac{4e^{\omega_0 t}}{1 + e^{2\omega_0 t}} \right) dt,$$

$$\ddot{y}(\omega) = -\frac{\omega^2 l}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \left(\frac{8}{(1 + e^{2\omega_0 t})^2} - \frac{8}{1 + e^{2\omega_0 t}} + 1 \right) dt.$$

Окончательный результат для спектральной плотности, найденный с использованием теории вычетов, имеет вид:

$$I(\omega) = \frac{4\pi e^2 l^2 \omega^6}{3c^3 \omega_0^4} \left\{ \cosh^{-2} \left(\frac{\pi \omega}{2\omega_0} \right) + \sinh^{-2} \left(\frac{\pi \omega}{2\omega_0} \right) \right\}. \quad (9)$$

Найденная спектральная плотность отвечает непрерывному спектру излучения. График этой зависимости приведен на рисунке 2.

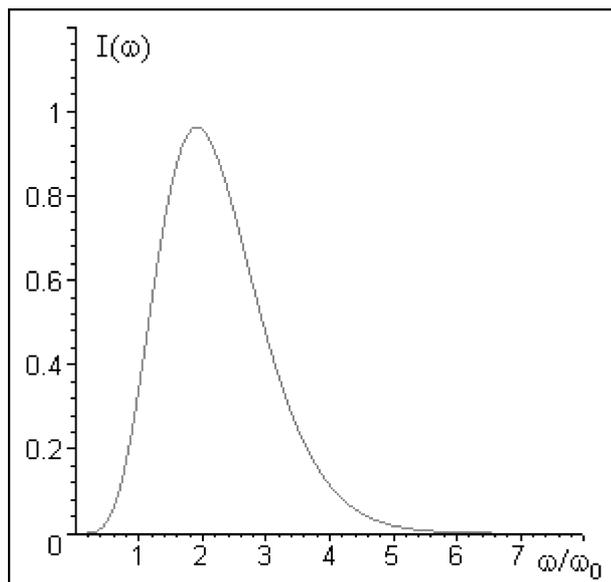


Рис. 2. Спектральная плотность излучения нелинейного осциллятора при движении на сепаратрисе в единицах $4\pi e^2 l^2 \omega_0^2 / 3c^3$

3.2. МАЛЫЕ КОЛЕБАНИЯ

В случае произвольных колебаний нелинейного осциллятора найти спектральную плотность в аналитическом виде затруднительно. Поэтому ограничимся для анализа случаем малых колебаний $\omega \rightarrow \omega_0$. Закон движения при этом согласно [3] можно представить в виде ряда:

$$\varphi(t) = \varphi_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin((2n-1)\omega t)}{2n+1} \left(\frac{\omega_0 - \omega}{4\omega_0} \right)^{n-1}. \quad (10)$$

Учитывая малость колебаний, можно записать:

$$\begin{aligned} x(t) &= l \sin(\varphi(t)) \approx l\varphi(t), \\ y(t) &= -l \cos(\varphi(t)) \approx -l. \end{aligned}$$

В результате получаем:

$$\ddot{x}(q) = -i\varphi_0 q^2 l \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A^{n-1}}{2n-1} \{ \delta(q - (2n-1)\omega) \},$$

где введено обозначение $A = (\omega_0 - \omega) / 4\omega_0$. Видно, что спектральная плотность

$$I(q) = \frac{\pi \varphi_0^2 e^2 l^2 q^4}{6\omega c^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A^{2n-2}}{(2n-1)^2} \delta\{q - (2n-1)\omega\}, \quad (11)$$

в отличие от движения по сепаратрисе, имеет дискретный характер. Нелинейный осциллятор излучает на частотах кратных основной. Амплитуда каждой гармоники определяется четными степенями коэффициента A и, как видно, быстро уменьшается с ростом номера гармоники. В пределе $\omega \rightarrow \omega_0$, как и следовало ожидать,

спектральная плотность содержит только одну основную гармонику, соответствующую излучению гармонического осциллятора [5].

3.3. БЫСТРЫЕ ВРАЩЕНИЯ

Аналогично колебаниям для вращения нелинейного осциллятора найти спектральную плотность излучения в явном виде удастся только в случае близком к свободному вращению $\omega_0 / \omega_r \ll 1$. При этом закон движения принимает вид:

$$\varphi(t) = 2\omega_r t + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(2n\omega_r t)}{n} \left(\frac{\omega_0}{4\omega_r} \right)^{2n}. \quad (12)$$

Учитывая малость суммы по сравнению с основным слагаемым $2\omega_r t$, можно воспользоваться следующими тригонометрическими соотношениями:

$$\begin{aligned} x(t) &= l \sin(2\omega_r t + \alpha) \approx l \sin(2\omega_r t) + l \cos(2\omega_r t)\alpha, \\ y(t) &= -l \cos(2\omega_r t + \alpha) \approx -l \cos(2\omega_r t) + l \sin(2\omega_r t)\alpha. \end{aligned}$$

Используя обозначение $B = \omega_0 / 4\omega_r$, получаем выражения для компонент, выраженные через сумму δ -функций. Подставляя их в выражение (8), переобозначая индексы и отбрасывая слагаемые, отвечающие излучению на нулевой частоте, находим окончательное выражение для спектральной плотности:

$$\begin{aligned} I(q) &= \frac{2\pi e^2 l^2 q^4}{6\omega_r c^3} \left\{ [B^8 + 1] \delta(q - 2\omega_r) + \right. \\ &+ 4 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{B^{4n}}{n^2} + \frac{B^{4(n+2)}}{(n+2)^2} \right] \delta(q - 2\omega_r(n+1)) \left. \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

Спектральная плотность излучения, также как и в случае малых вращений, представляет собой дискретный набор гармоник, кратных основной. В предельном случае $\omega_0 / \omega_r \rightarrow 0$ остаётся одна основная гармоника, отвечающая излучению свободного ротатора [5].

3.4. ВЗАИМОСВЯЗЬ ДИСКРЕТНОГО И НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРОВ НЕЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Спектр излучения системы в случаях близких к колебаниям или вращениям имеет общую закономерность, а именно, спектр состоит из большого числа гармоник, кратных основной, вклад которых определяется множителями A и B . В то же время спектр излучения при движении по сепаратрисе является непрерывным, что и отличает данную систему от гармонического осциллятора и свободного ротатора. Важным представляется вопрос о динамике изменения

спектра излучения нелинейного осциллятора при изменении параметра нелинейности.

Учитывая характер спектра в случаях малых колебаний и быстрых вращений, отмечаем, что при приближении параметра нелинейности к единице, отвечающему движению по сепаратрисе, вид спектральной плотности излучения качественно не изменяется. В этом случае в соответствии с формулой (5) собственная частота системы уменьшается, что приводит к «сжатию» спектра, так, число гармоник возрастает, в то время как расстояние между ними уменьшается и относительный вклад гармоник выравнивается. Грубую оценку такой перестройки спектра можно произвести, учитывая известный вид законов движения.

Для колебаний вклад каждой гармоники определяется множителем:

$$C_n^{(v)} = \frac{4\omega}{\omega_n \cosh(K'\omega_n/\omega_0)},$$

а для вращений:

$$C_n^{(r)} = \frac{4\omega}{\omega_n \cosh(K'\omega_n/\omega_r)}.$$

Эти множители можно выразить через параметр нелинейности, соответственно для вращений и колебаний:

$$C_n^{(v)} = \frac{4}{(2n-1)} \cosh^{-1} \left\{ \pi(2n-1)K \left(\sqrt{1-\chi^2} \right) / K(\chi) \right\},$$

$$C_n^{(r)} = \frac{2}{n} \cosh^{-1} \left\{ \pi n K \left(\frac{1}{\chi} \sqrt{\chi^2-1} \right) / K(1/\chi) \right\}.$$

Значения первых пяти множителей для обоих случаев приведены в таблицах 1 и 2.

Видно, что при приближении к сепаратрисе вклад различных гармоник становится соизмеримым. А расстояние между ними уменьшается настолько, что дискретный спектр переходит в непрерывное распределение.

Отметим, что в этом случае становится возможной генерация высоких гармоник. В случаях малых колебаний и быстрых вращений вклад высших гармоник пренебрежимо мал, но по мере приближения к сепаратрисе он становится существенным. Уменьшение при этом частоты в несколько раз не является принципиальным, так как легко компенсируется увеличением амплитуды гармоник на несколько порядков.

4. КВАНТОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Для нелинейного осциллятора удастся также найти классическое действие. Рассматриваемая в этом разделе модель отличается от исходной

Таблица 1

Значения множителей $C_n^{(v)}$ для различных значений параметра нелинейности χ

	$\chi = 0.1$	$\chi = 0.3$	$\chi = 0.5$	$\chi = 0.7$	$\chi = 0.9$	$\chi = 0.99999$
ω/ω_0	0.9975	0.9768	0.9318	0.8511	0.6888	0.2311
C_1	0.20	0.61	1.05	1.57	2.32	3.81
C_2	0.42×10^{-4}	0.12×10^{-2}	0.64×10^{-2}	0.23×10^{-1}	0.87×10^{-1}	0.91
C_3	0.16×10^{-7}	0.43×10^{-5}	0.69×10^{-4}	0.58×10^{-3}	0.54×10^{-2}	0.25
C_4	0.71×10^{-11}	0.18×10^{-7}	0.89×10^{-6}	0.17×10^{-4}	0.39×10^{-3}	0.89×10^{-1}
C_5	0.35×10^{-14}	0.82×10^{-10}	0.12×10^{-7}	0.57×10^{-6}	0.31×10^{-4}	0.34×10^{-1}

Таблица 2

Значения множителей $C_n^{(r)}$ для различных значений параметра нелинейности χ

	$\chi = 1.00001$	$\chi = 1.1$	$\chi = 1.5$	$\chi = 2.0$	$\chi = 3.0$	$\chi = 4.0$
ω/ω_r	0.2311	0.6765	0.8680	0.9218	0.9712	0.9841
C_1	1.57	0.43	0.17	0.72×10^{-1}	0.29×10^{-1}	0.16×10^{-1}
C_2	0.44	0.23×10^{-1}	0.27×10^{-2}	0.65×10^{-3}	0.11×10^{-3}	0.33×10^{-4}
C_3	0.15	0.17×10^{-2}	0.66×10^{-4}	0.77×10^{-5}	0.53×10^{-6}	0.87×10^{-7}
C_4	0.55×10^{-1}	0.13×10^{-3}	0.18×10^{-5}	0.10×10^{-6}	0.29×10^{-8}	0.26×10^{-9}
C_5	0.21×10^{-1}	0.12×10^{-4}	0.53×10^{-7}	0.15×10^{-8}	0.17×10^{-10}	0.85×10^{-12}

только тем, что за нулевое значение потенциальной энергии принимается положение устойчивого равновесия $\varphi = 0$. Функция Гамильтона такой системы имеет вид:

$$H(\varphi) = \frac{p^2}{2m} + U_0(1 - \cos \varphi), \quad (14)$$

где $U_0 = \omega_0^2$. Как известно, действие системы определяет в квазиклассическом приближении уровни энергии и волновые функции. Поставим задачу отыскания энергетического спектра такой системы. Для этого запишем правило квантования Бора—Зоммерфельда [7]:

$$S(\mathcal{E}) = l \oint \sqrt{2m(\mathcal{E} - U(\varphi))} d\varphi = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (15)$$

Легко показать, что искомый интеграл выражается через эллиптический интеграл второго рода:

$$S(\mathcal{E}) = 8\sqrt{2ml^2\mathcal{E}} \operatorname{E} \left\{ \arccos \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{U_0} \right), \frac{2U_0}{\mathcal{E}} \right\}. \quad (16)$$

Численное решение уравнения, следующего из правил квантования, для молекулы этана, имеющей момент инерции $J = 2.65 \times 10^{-40}$ эрг·с² и высоту потенциала $U_0 = 3356$ см⁻¹ приводит к результатам, приведенным в таблице 3. Следует отметить неэквидистантность полученного энергетического спектра системы.

Таблица 3

Энергия переходов в колебательно-вращательном спектре молекулы этана

Переход	Теория, см ⁻¹	Эксперимент, см ⁻¹
0 → 1	257.17	289
1 → 2	254.60	258
2 → 3	251.995	—
3 → 4	249.34	—

5. ВЫВОДЫ

В рамках модели заряженного нелинейного осциллятора найдены и проанализированы спектральные особенности дипольного излучения в рамках классической теории. Детально рассмотрен важный с точки зрения эксперимента [1] переход от дискретного спектра излучения осциллятора к дискретному спектру ротатора. Отметим интересный факт появления непрерывного спектра излучения, возникающего при движении по сепаратрисе. Неэквидистантность энергетического колебательно-вращательного спектра нелинейного осциллятора, найденного в данной работе, отражает особенности нелинейной динамики данной системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бункин А.Ф., Нурматов А.А., Першин С.М. УФН, т. 176, № 8, С. 883—889.
2. Заславский Г.М. Введение в нелинейную физику / Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев. — М.: Наука, 1988. — 308 с.
3. Чириков Б.В. Нелинейный резонанс. Учебное пособие / Б. В. Чириков. — Новосибирск.: Изд. НГУ, 1977. — 81 с.
4. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: в 10-и т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2001. — Т. 1.: Механика. — 215 с.
5. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: в 10-и т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2001. — Т. 2.: Теория поля. — 509 с.
6. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: в 10-и т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2001. — Т. 3.: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — 803 с.
7. Давыдов А.С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. — М.: Наука, 1973. — 704 с.
8. Лаврентьев М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. — М.: Физматлит, 1973. — 736 с.
9. Everitt M.J., Clark T.D., Stiffell P.B. Signatures of chaoticlike and nonchaoticlike behavior in a nonlinear quantum oscillator through photon detection Phys. Rev. E72, 066209 (2005).