

ЛОКАЛИЗОВАННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ С ПОМОЩЬЮ ФОНОНОВ

Грабчиков А. С.¹⁾, Дунина Е. Б.²⁾, Корниенко А. А.²⁾, Орлович В. А.¹⁾

¹⁾Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

²⁾Витебский государственный технологический университет
Витебск, Беларусь

Работа твердотельного лазера с использованием внутрирезонаторного вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) для преобразования частоты сопровождается генерацией интенсивного фононного поля [1]. Поскольку ВКР происходит внутри кристалла, помещенного в резонатор, то падающие фотоны с волновым вектором Q и соответственно рассеянные с волновым вектором Q_1 являются когерентными. Из условия сохранения импульса $Q = Q_1 + k$ следует, что ВКР сопровождается генерацией вполне определенного типа фононов с волновым вектором k . Это должно приводить к значительному увеличению числа заполнения n_k для этого типа фононов. Известно [2], что амплитуда смещения атомов в кристаллической решетке пропорциональна $\sqrt{n_k}$. Поэтому увеличение числа заполнения n_k сопровождается ростом амплитуды смещения атомов. При больших амплитудах смещения функция потенциальной энергии может иметь дополнительный локальный минимум [3]. Целью данной работы является теоретическое исследование характера колебательного движения атомов в потенциальном поле с дополнительным локальным минимумом.

Локальный минимум моделировался с помощью гауссовской функции типа:

$$U_{\text{лок}} = -A \exp(-\lambda(x - x_1)^2),$$

где A, λ, x_1 – параметры, задающие глубину, ширину и соответственно положение локального минимума. Решение уравнения Шредингера для частицы в модифицированном потенциале

$$U = U_0 + U_{\text{лок}}$$

определялось в энергетическом представлении. Здесь $U_0 = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ – невозмущенный потенциал. В качестве базисных использовались невозмущенные функции гармонического осциллятора.

Выполненные расчеты показали, что при энергиях колебаний меньших, чем энергия локального минимума, плотность распределения координат практически не отличается от соответствующего распределения невозмущенного осциллятора. Однако при энергиях колебаний близких к энергии локального минимума график распределения плотности вероятности распределения координаты становится сильно асимметричным. Такое распределение можно трактовать как колебания около нового положения равновесия. Следовательно, в реальных системах генерация определенного типа фононов может сопровождаться стационарным изменением длины химической связи между отдельными атомами.

1. Grabchikov A.S., Kuzmin A.N., Lisinetskii V.A., Ryabtsev G.I., Orlovich V.A., Demidovich A.A. *J. Alloys & Compounds* 300-301 (200) 300-302

2. Давыдов А.С. Теория твердого тела. – М.: «Наука», 1976

3. Урусов В.С., Дубровинский Л.С. ЭВМ – моделирование структуры и свойств минералов. – Изд. Московского университета, 1989