

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ КВАНТОВЫХ БИФУРКАЦИЙ, ПРИВОДЯЩЕЙ К ПЕРЕВОРОТУ ВРАЩАТЕЛЬНОГО МУЛЬТИПЛЕТА

О.И.Даварашвили, Б.И.Жилинский, В.М.Кривцун,
Д.А.Садовский Е.П.Снегирев

“Переворот” энергетического спектра молекулы в ходе вращательного возбуждения соответствует серии бифуркаций в классической предельной задаче, последовательность и тип которых определяются условиями симметрии. Это явление исследовано в спектре высокого разрешения полосы R_3^- состояния ν_3 молекулы CF_4 .

Простейшие качественные изменения, происходящие в энергетическом спектре квантовой системы при изменении ее интегралов движения широко исследуются в ядерной и молекулярной физике на различных модельных гамильтонианах ^{1–5}. Элементарные качественные (критические) явления соответствуют элементарным бифуркациям в классической задаче, которая получается из исходной квантовой задачи при переходе к классическому пределу на основе обобщенных когерентных состояний. Особую роль в исследовании квантовых бифуркаций играет стратификация фазового пространства классической задачи под действием группы симметрии G . Локальная симметрия стационарных точек $g \subset G$ позволяет дать общую классификацию бифуркаций ¹.

Если в фазовом пространстве под действием группы G помимо нульмерных стратов, точки которых входят в минимальный набор стационарных точек задачи, образуются страты большей размерности, то появляется возможность для качественных изменений более сложного характера. Для однопараметрической задачи особый интерес представляет система из нульмерных стратов, связанных одномерными стратами. В этом случае при изменении параметра стационарные точки перемещаются по одномерному страту, вызывая последовательность элементарных бифуркаций в стационарных точках, лежащих на нульмерных стратах. Порядок следования обусловлен взаимным расположением стратов, а, значит, действием G . Такая последовательность представляется как одно сложное качественное изменение, имеющее в отличие от входящих в нее бифуркаций глобальный характер.

В области молекулярных задач одним из наиболее удобных объектов для экспериментального исследования обсуждаемых явлений оказались вращательные мультиплеты молекул типа сферического волчка ⁶. В этом случае в фазовом пространстве S^2 действие группы $G = O_k$ порождает систему нульмерных стратов характеризуемых локальной симметрией $g = C_2, C_3, C_4$, связанных одномерными стратами C_3 и двумерный страт общего положения (рис. 1). Последовательность бифуркаций при данной стратификации вызывается движением стационарной точки C_3 при изменении параметра задачи – полного углового момента J , т. е. в ходе вращательного возбуждения ⁷. В квантовой задаче данной последовательности классических бифуркаций соответствует переворот (*crossover*) вращательного мультиплета. Это явление отмечалось ранее в ⁸ при изучении полосы ν_3 молекулы CH_4 , однако характер изменения энергетического спектра вблизи точки переворота ранее не анализировался ни теоретически ни экспериментально. В то же время из общего теоретического анализа следует: а) для молекул типа сферического волчка явление переворота заключается в последовательности элементарных бифуркаций вида $e = C_2 \rightarrow C_3 \rightarrow C_4 \rightarrow C_2$ или $o = C_2 \rightarrow C_4 \rightarrow C_3 \rightarrow C_2$ (рис. 1) и сопровождается образованием 12-кратных кластеров энергетических уровней при значениях J , отвечающих стадии переворота; б) детальное экспериментальное исследование последовательности бифуркаций в спектре квантовой системы, в частности образования 12-кратных кластеров, возможно при достаточно высоких значениях J ; в) фено-

менологическое описание вращательного спектра с помощью параметрического эффективно-го гамильтониана чрезвычайно чувствительно к информации о вращательных переходах в области переворота; г) вследствие сильного сужения вращательного мультиплета вблизи переворота, для его экспериментального изучения требуется более высокое спектральное разрешение, чем для соседних участков спектра.

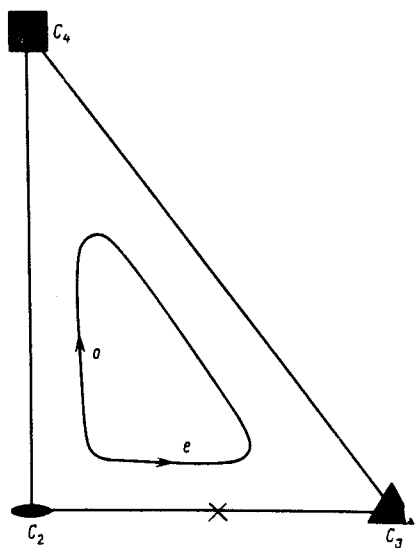


Рис. 1. Элементарная ячейка группы O_h и расположение стационарных точек. Движение точки C_3 в плоскости симметрии σ на различных стадиях переворота

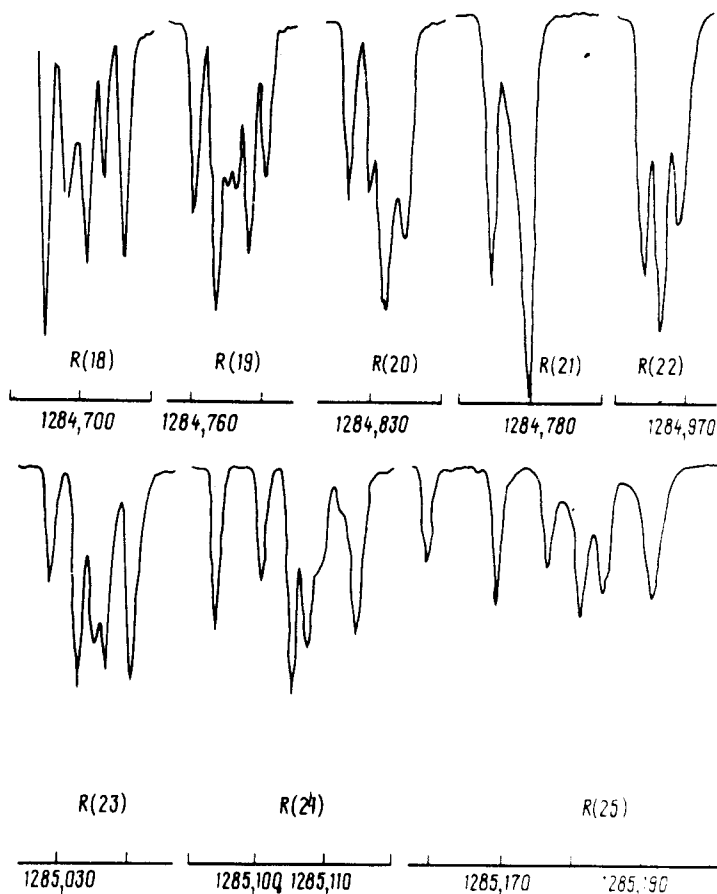


Рис. 2. ИК спектр высокого разрешения полосы R_3^- колебательного состояния ν_3 молекулы CF_4 , отвечающий области переворота мультиплета F^-

В этой связи особый интерес представляла вращательная структура $F^- (R = J - 1)$ ветви состояния $\nu_3(F_2)$ молекулы CF_4 , где имевшаяся экспериментальная информация⁹ не захватывала область переворота при $J \approx 22$. Экспериментальный спектр полосы R_3^- молекулы CF_4 (рис. 2) был зарегистрирован нами на диодном лазерном спектрометре. Аппаратурное разрешение прибора составляет $\approx 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ при доплеровской ширине линии $\approx 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ ($T = 77 \text{ К}$). Давление газа CF_4 достигало 0,05 торр. Точность градуировки абсолютной шкалы волновых чисел по реперным спектрам N_2O , H_2O , HDO , D_2O составила $\approx 5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Явление переворота вызывает аномальное сужение линий $R(21)$, $R(22)$, отвечающих переходам на уровни в области максимального сжатия мультиплета F^- (рис. 2). Согласно предварительному анализу в CF_4 наблюдается переворот типа $-e$. Более подробно о результатах анализа спектра и кластерной структуры мультиплета F^- будет сообщено в отдельной работе. Авторы признательны Ж.Пьеру за проведение совместных исследований, во многом стимулировавших данную работу.

Литература

1. Жилинский Б.И., Павличенков И.М. ЖЭТФ, 1987, 92, 387.
2. Павличенков И.М. ЖЭТФ, 1989, 96, 404.
3. Zhang W.M et al. Phys. Rev. C., 1989, 38, 1475.
4. Uwano Y. Physica D, 1989, 35, 1.
5. Fonnargiotakis M. et al. J. Chem. Phys., 1989, 91, 1389.
6. Sadovskii D.A., Zhilinskii B.I. Molec. Phys., 1988, 65, 109.
7. Pierre G. et al. Europhys. Lett., 1989, 10, in press.
8. Gray D.L. et al. J. Molec. Spectr., 1979, 77, 440.
9. Takami M. J. Chem. Phys., 1981, 74, 4276.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Институт спектроскопии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
28 ноября 1989 г.