РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД М О С К В А ТОМ 160, ВЫПУСК 6 (12) ДЕКАБРЬ 2021 Р А Н

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

атомы, молекулы, оптика

Циркулярно поляризованная компонента в излучении Смита–Парселла	
Потылицын А. П., Шкитов Д. А.	763
Соотношения неопределенностей для тригонометрических операторов разности фаз квантовых электромагнитных полейКозловский А. В.	774
Схемы и параметры резонансного двухфотонного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ моле- кул ${ m UF}_6$ бихроматическим лазерным ИК-излучением Макаров Г. Н.	786
Оже-переходы в квазимолекуле при столкновении атомов неона в кэВ-диапазоне энергий Михайлов В. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев А. Н.	794
Закон Кирхгофа в излучении смеси молекулярных газов Жиляев Д. А., Смирнов Б. М.	807
Форма линии субдоплеровских резонансов в газе атомов щелочных металлов в поле встречных би- хроматических лазерных пучков Михайлов А. М., Будо Р., Бражников Д. В.	818
Особенности движения ультрахолодных атомов в квазипериодических потенциалахах	835
О возможности сохранения возбуждения в ансамбле одинаковых осцилляторов Башаров А. М., Трубилко А. И.	865

[©] Российская академия наук, 2021

[©] Редколлегия журнала Ж
ЭТФ (составитель), 2021

твердые тела и жидкости

Структура, электронные свойства и устойчивость углеродных бислоев из атомов в sp^3 -гибридизированных состояниях Грешняков В. А., Беленков Е. А.	873
Эффективное трение и подвижность графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) на плоской многослойной подложке h-BN Савин А. В.	885

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Неклассические процессы переноса примеси в резко контрастной среде в присутствии одиночной крупномасштабной неоднородностиКондратенко П. С., Леонов К. В.	898
Магнитосопротивление магнитных нанокомпозитов вблизи порога перколяции в сильных магнитных полях	002
денков А. Н., Васильев А. Л., Ситников А. В., Рыльков В. В., Грановскии А. Б.	903
Пузыри с присоединенными квантовыми вихрями в захваченных бинарных бозе-конденсатах	
Рубан В. П.	912
Предкритическая термоакустика в гелии Кешишев К. О., Марченко В. И., Подоляк Е. Р.	922

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Нелинейный планарный эффект Холла в киральном топологическом полуметалле CoSi Есин В. Д., Тимонина А. В., Колесников Н. Н., Девятов Э. В.	928
Алфавитный указатель тома 160 за 2021 г	935
Предметный указатель тома 160 за 2021 г	942

ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАННАЯ КОМПОНЕНТА В ИЗЛУЧЕНИИ СМИТА – ПАРСЕЛЛА

А. П. Потылицын ^{a,b*}, Д. А. Шкитов ^{a**}

^а Национальный исследовательский Томский политехнический университет 634050, Томск, Россия

^b Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» 115409, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 21 мая 2021 г., после переработки 5 июля 2021 г. Принята к публикации 5 июля 2021 г.

Рассмотрены поляризационные характеристики излучения Смита – Парселла (ИСП) для модельной решетки, состоящей из наклонных идеально проводящих полос (стрипов), разделенных вакуумными промежутками, а также для «реальной» решетки с треугольным профилем периода, и показано, что кроме линейной поляризации ИСП обладает циркулярно поляризованной компонентой. Полученные результаты демонстрируют возможность создания монохроматического источника излучения с эллиптической поляризацией в терагерцевом диапазоне длин волн.

DOI: 10.31857/S0044451021120014

1. ВВЕДЕНИЕ

В текущем столетии были разработаны и нашли широкое применение источники терагерцевого (ТГц) излучения [1,2]. Мощные ТГц-источники были созданы на основе лазеров на свободных электронах [3,4], а также на основе когерентного синхротронного излучения на электронных накопителях [5,6]. Компактные источники ТГц-излучения на основе лазерных технологий [7] в настоящее время получили широкое распространение.

Однако, в ряде случаев пользователям требуется источник монохроматического ТГц-излучения с возможностью плавной регулировки частоты в широких пределах. Подобный источник, основанный на эффекте Смита–Парселла с использованием нерелятивистских и умеренно релятивистских электронных пучков [8,9], планируется к разработке в ближайшем будущем.

Излучение Смита – Парселла (ИСП) генерируется пучком электронов, пролетающих в вакууме вблизи решетки из проводящего материала, частота которого определяется дисперсионным соотношением

$$\nu_k = k\nu_f, \quad \nu_f = \beta c/d(1 - \beta \cos \theta).$$
 (1)

Здесь $k = 1, 2, 3, \ldots, \nu_f$ — фундаментальная частота, k — порядок дифракции излучения, d — период решетки, βc — скорость электрона, θ — угол наблюдения.

В некоторых областях наряду с монохроматичностью требуется использовать циркулярно поляризованное излучение (например, в исследованиях киральных биофизических объектов, метаматериалов, магнитооптике).

Общеизвестный оптический метод, основанный на использовании пластинки в четверть длины волны [10], обеспечивает трансформацию линейной поляризации в циркулярную в узком диапазоне длин волн. Недавно был предложен метод получения циркулярно поляризованного излучения с помощью метаматериалов [11]. В работе [12] исследовался «циркулярный поляризатор» на основе стандартного проволочного поляризатора и системы зеркал для регулирования фазовой задержки.

Поляризационные свойства ТГц-излучения, полученного при взаимодействии фемтосекундных лазерных пучков с газом, исследовались в работах [13–15], где было показано, что поляризация результирующего излучения, как правило, линейная.

В настоящей работе показана возможность получения циркулярно поляризованного монохромати-

^{*} E-mail: potylitsyn@tpu.ru

^{**} E-mail: shkitovda@tpu.ru

ческого излучения на основе эффекта Смита – Парселла.

2. ИЗЛУЧЕНИЕ СМИТА–ПАРСЕЛЛА КАК РЕЗОНАНСНОЕ ДИФРАКЦИОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Простейшая модель ИСП, позволяющая аналитически рассчитывать спектрально-угловые и поляризационные характеристики излучения от решетки, состоящей из набора проводящих полосок (стрипов), разделенных вакуумными промежутками, основана на модели резонансного дифракционного излучения [16, 17].

Дифракционное излучение (ДИ) можно рассматривать как излучение поляризационных токов, которые индуцируются («наводятся») на поверхности проводника, вблизи которого пролетает заряд [17]. В цитируемой монографии рассмотрены основные характеристики ДИ и показано, что излучение возникает, если прицельный параметр а — кратчайшее расстояние между траекторией заряда и поверхностью проводника, меньше (или сравнимо) с величиной «эффективного» радиуса движущегося кулоновского поля заряда $\gamma \beta \lambda / 2\pi$ (γ — лоренц-фактор, $\beta = v/c = \sqrt{1 - \gamma^{-2}}$ — нормализованная скорость заряда, λ — длина волны ДИ). Следует отметить, что при движении заряда параллельно бесконечной поверхности проводника ДИ не возникает, т.е. наличие «оптических неоднородностей» (в рассматриваемом случае границ (краев) проводника) является необходимым условием возникновения ДИ.

Авторы работы [18] получили точное решение уравнений Максвелла, описывающих спектрально-угловое распределение ДИ заряда при его наклонном пролете вблизи идеально проводящей полуплоскости.

Поле ДИ $\mathbf{E} = \{E_x, E_y, E_z\}$, найденное в [18], определено в системе координат, связанной с полуплоскостью. Однако более удобной является система, в которой полярный и азимутальные углы определены относительно скорости заряда, которая связана с исходной поворотом вокруг края мишени на угол θ_0 (см. рис. 1).

Далее, для расчета поляризационных характеристик необходимо использовать компоненты поля, перпендикулярные волновому вектору k. Введем поляризационные орты [17]:

$$\mathbf{e}_2 = c_{norm}[\mathbf{b}_1, \mathbf{k}_0], \quad \mathbf{e}_1 = [\mathbf{e}_2, \mathbf{k}_0], \quad (2)$$

где $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}/\omega$, ω — круговая частота излучения, \mathbf{b}_1 — единичный вектор, направленный вдоль края мише-



Рис. 1. Схема генерации излучения Смита–Парселла на решетке, состоящей из наклонных стрипов (a — прицельный параметр, h — ширина стрипа, θ_0 — угол наклона стрипа, θ — полярный угол, χ — азимутальный угол, характеризующие распространение ИСП)

ни, c_{norm} — нормировочный множитель (см. далее). Такой выбор ортов оставляет их неизменными при повороте на угол θ_0 . Исходя из найденных в [18] декартовых компонент поля легко получить поляризационные компоненты поля ДИ в рассматриваемой системе (см. рис. 1).

Выразим угловые переменные ψ, ϕ из статьи [18] через полярный и азимутальный углы θ, χ :

$$\sin\phi = \frac{-\cos\theta\sin\theta_0 + \sin\theta\cos\theta_0\cos\chi}{\sqrt{1 - \sin^2\theta\sin^2\chi}},\qquad(3a)$$

$$\cos \phi = \frac{\cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos \chi}{\sqrt{1 - \sin^2 \theta \sin^2 \chi}}, \quad (3b)$$
$$\cos \psi = \sin \theta \sin \chi.$$

Для геометрии
$$\chi = 0$$
 из (3a), (3b) имеем
 $\phi = \theta - \theta_0.$ (4)

Даже для малых отклонений от плоскости, перпендикулярной решетке ($\chi = 0$), экспоненциальная зависимость от азимута [18] приводит к существенному подавлению компонент поля E_{1DR} и E_{2DR} . Этот факт позволяет использовать приближенное соотношение (4) во всей области азимутальных углов при вычислении компонент поля

$$E_{1DR} = \frac{B_{q\omega}\sqrt{\omega}}{\sqrt{\cos\theta_x}} \frac{\sin\theta_x}{D} \sqrt{1 + \cos(\theta - \theta_0)} \times \left(\cos\theta_0 + i\sin\theta_0/\sqrt{\gamma^{-2} + (\beta\sin\theta_x)^2}\right), \quad (5a)$$

$$E_{2DR} = \frac{B_{q\omega}\sqrt{\omega}}{\sqrt{\cos\theta_x}} \frac{1}{D} \frac{\sin(\theta - \theta_0)}{\sqrt{1 + \cos(\theta - \theta_0)}} \times \left(\beta\cos\theta_x + \cos\theta_0 + i\sin\theta_0\sqrt{\gamma^{-2} + (\beta\sin\theta_x)^2}\right), \quad (5b)$$

где

$$B_{q\omega} = \frac{e}{4\pi^2} \exp\left(-2\frac{\pi a}{\gamma\beta\lambda}\sqrt{1 + (\gamma\beta\sin\theta_x)^2}\right) \times \frac{\sqrt{\cos\theta_x - \cos\theta_0/\beta - i\sin\theta_0\sqrt{\gamma^{-2} + (\beta\sin\theta_x)^2/\beta}}}{\sqrt{\omega}\left(\sqrt{\gamma^{-2} + (\beta\sin\theta_x)^2}\cos\theta_0 + i\sin\theta_0\right)},$$

$$D = \cos\theta_0 - \beta\cos\theta_x\cos(\theta - \theta_0) + i\sin\theta_0\sqrt{\gamma^{-2} + (\beta\sin\theta_x)^2}.$$
 (6)

В формулах (5а), (5b) для удобства используется угол θ_x (вместо азимутального угла χ), определяемый из соотношения

$$\theta_x = \pi/2 - \psi, \quad \sin \theta_x = \sin \theta \sin \chi.$$
 (7)

Нормировочная константа в (2) выражается через введенные угловые переменные следующим образом: $c_{norm} = 1/\cos\theta_x$.

Выражения (5а), (5b) описывают характеристики ДИ от бесконечной полуплоскости, т. е. ДИ генерируется только на одном крае. В реальном случае поле ДИ от бесконечной полосы (стрипа) шириной h, должно вычисляться с учетом этой конечной ширины. В работе [19] предложен метод расчета характеристик ДИ на основе метода поляризационных токов, который позволяет учесть реальную геометрию мишени. Другая, более простая модель, основана на расчете ДИ от стрипа, как результат интерференции полей ДИ от двух краев идеально проводящей мишени.

Пусть решетка, на которой генерируется ИСП, состоит из наклонных полос из идеально проводящего материала (см. рис. 1). Поле ИСП в этой модели описывается выражением [16]

$$\mathbf{E}_{SPR} = \mathbf{E}_{DR} F_2 F_3,\tag{8}$$

где \mathbf{E}_{DR} — поле дифракционного излучения (ДИ) от края наклонной идеально проводящей полуплоскости, F_2 — функция, учитывающая интерференцию полей от обоих краев полосы, F_3 — резонансная функция, описывающая излучение от N идентичных источников. В этой системе функция F_2 выражается следующим образом [17]:

$$F_2 = 1 - \exp\left(\Delta\chi_1 + i\Delta\phi_1\right),\tag{9}$$

где

$$\Delta \chi_1 = \frac{2\pi h \sin \theta_0}{\gamma \lambda} \sqrt{1 + (\gamma \beta \sin \theta_x)^2},$$

$$\Delta \phi_1 = \frac{2\pi h}{\lambda} \left(\frac{\cos \theta_0}{\beta} - \cos(\theta - \theta_0) \right).$$

Последний множитель в (8), описывающий излучение N источников, имеет вид

$$F_3 = [1 - \exp iN\Phi]/[1 - \exp i\Phi],$$

где

$$\Phi = 2\pi d\lambda^{-1} (1/\beta - \cos\theta).$$

По известным компонентам поля \mathbf{E}_{iDR} вычисляется спектрально угловое распределение ИСП:

$$\frac{dW}{d\omega d\Omega} = \frac{1}{c} \left[|E_{1SPR}|^2 + |E_{2SPR}|^2 \right].$$
(10)

Последнее выражение получено для дальней зоны, где отсутствует зависимость характеристик излучения от расстояния до источника. Оценка расстояния, соответствующего этому критерию для случая ИСП, получена в [19].

Поляризационные характеристики ИСП описываются параметрами Стокса ξ_i :

$$\xi_1 = \frac{E_{1SPR}^* E_{2SPR} + E_{1SPR} E_{2SPR}^*}{|E_{1SPR}|^2 + |E_{2SPR}|^2},$$
 (11a)

$$\xi_2 = \frac{i \left(E_{1SPR}^* E_{2SPR} - E_{1SPR} E_{2SPR}^* \right)}{|E_{1SPR}|^2 + |E_{2SPR}|^2}, \quad (11b)$$

$$\xi_3 = \frac{|E_{1SPR}^*|^2 - |E_{2SPR}|^2}{|E_{1SPR}|^2 + |E_{2SPR}|^2}.$$
 (11c)

Параметры Стокса ξ_1, ξ_3 характеризуют линейную поляризацию ($P_{lin} = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_3^2}$ — скаляр), параметр ξ_2 (псевдоскаляр) — циркулярную. По определению, параметры Стокса связаны следующим соотношением:

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = 1. \tag{12}$$

При вычислении параметров Стокса множители $|Bq\omega\sqrt{\omega}|^2|F_2|^2|F_3|^2$ в числителе и знаменателе в (11) сокращаются, что приводит к отсутствию явной зависимости поляризационных характеристик от длины волны. Тем не менее, неявная зависимость от длины волны, которая определяется полярным углом θ , остается во всех приведенных формулах (11).

Запишем формулы для ξ_i после упрощения выражений (11а)–(11с):

$$\xi_1 = -\sqrt{s}\sin\theta_x \sin(\theta - \theta_0)/S, \qquad (13a)$$

$$\xi_2 = -\sqrt{s}\sin(\theta - \theta_0)\sin\theta_0\sin\theta_x\cos\theta_x/S, \quad (13b)$$

$$\xi_3 = \frac{1}{2S} \{ (1 + \cos(\theta - \theta_0)) \sin^2 \theta_x (1 - \beta \cos \theta_x \cos \theta) - s(1 - \cos(\theta - \theta_0))(1 + \beta \cos \theta_x \cos \theta) \}.$$
(13c)

765

где

$$S = \frac{1}{2} \{ (1 + \cos(\theta - \theta_0)) \sin^2 \theta_x (1 - \beta \cos \theta_x \cos \theta) + s(1 - \cos(\theta - \theta_0))(1 + \beta \cos \theta_x \cos \theta) \},$$

$$s = \gamma^{-2} + (\beta \sin \theta_x)^2.$$
(14)

Легко показать, что выражения для параметров Стокса (13) удовлетворяют соотношению (12). Другими словами, ИСП в дальней зоне для фиксированного направления волнового вектора обладает 100-процентной, вообще говоря, эллиптической поляризацией.

Из выражений (13а)–(13с) вытекают следствия:

а) в плоскости, перпендикулярной «средней» плоскости решетки ($\theta_x = 0$), приравниваются нулю параметры ξ_1 , ξ_2 , а линейная поляризация в этой плоскости достигает 100 % ($\xi_3(\theta_x = 0) = -1$);

б) для «плоской» решетки ($\theta_0 = 0$) циркулярная поляризация равна нулю;

в) в «правом» и «левом» полупространстве относительно перпендикулярной плоскости ($\theta_x > 0$, $\theta_x < 0$) параметры ξ_1, ξ_2 обладают противоположными знаками.

Отметим, что циркулярная поляризация ξ_2 возникает только в том случае, когда из кинематических переменных, соответствующих рассматриваемой геометрии, можно получить псевдоскаляр. В случае дифракционного излучения подобный псевдоскаляр можно получить, рассматривая три вектора — β , \mathbf{k}_0 и перпендикуляр к краю стрипа, лежащий в плоскости стрипа $\mathbf{b}_2 = \{1, 0, 0\}$. Смешанное произведение (β , $[\mathbf{b}_2, \mathbf{k}_0]$) = $\sin \theta_0 \sin \theta_x$ как раз и описывает поведение циркулярной поляризации.

3. ИЗЛУЧЕНИЕ СМИТА–ПАРСЕЛЛА ПО ОБОБЩЕННОМУ МЕТОДУ ПОВЕРХНОСТНЫХ ТОКОВ

В работах [20, 21] авторами был предложен и развит метод поляризационных токов, частным случаем которого является обобщенный метод поверхностных токов [22], в случае если мишень представляет собой идеальный проводник. На практике последний подходит для расчета характеристик излучения в оптическом, инфракрасном и ТГц-диапазонах, в том числе всех компонент поля излучения от металлических мишеней в заданной точке пространства. Метод применим для переходного излучения (ПИ), дифракционного излучения (ДИ) и излучения Смита – Парселла. Обобщенный метод поверхностных токов (ОМПТ) основывается на макроскопических уравнениях Максвелла, поэтому на него накладываются ограничения макроскопического подхода [23]. Метод применим для заряженных частиц с практически произвольными энергиями (начиная от сотен кэВ и более) и практически произвольными углами падения к поверхностям (исключая скользящее падение), а также для длин волн от оптических до миллиметровых. Мы применяем данный метод для релятивистских электронов ($\gamma > 10$) и субмиллиметрового диапазона длин волн. Более подробно вопрос ограничений метода рассмотрен в работе [24].

В ОМПТ источником поля излучения являются поверхностные токи на поверхности проводника, которые возникают за счет динамической поляризации атомов мишени кулоновским полем пролетающей заряженной частицы. Поле излучения от произвольной поверхности имеет вид

$$\mathbf{E}_{R}^{D}(\mathbf{r}_{D},\lambda) = \frac{1}{2\pi} \times \\ \times \iint \left[\left[\mathbf{n}(\mathbf{r}_{T}), \mathbf{E}_{e}^{T}(\mathbf{r}_{T},\lambda) \right], \nabla G(\mathbf{r}_{T},\mathbf{r}_{D},\lambda) \right] dS_{T}.$$
(15)

Здесь $\mathbf{n}(\mathbf{r}_T)$ — единичный вектор нормали к поверхности мишени в заданной точке, $\mathbf{E}_e^T(\mathbf{r}_T, \lambda)$ кулоновское поле электрона, $\nabla G(\mathbf{r}_T, \mathbf{r}_D, \lambda)$ — градиент функции Грина, $\mathbf{r}_T = \{x_T, y_T, z_T\}$ — координата точки на поверхности мишени, расположенной на расстоянии *a* от траектории частицы, $\mathbf{r}_D =$ $= \{x_D, y_D, z_D\}$ — координата точки наблюдения (точечного детектора), dS_T — элементарная площадь поверхности мишени, λ — длина волны излучения, скобки $[\cdot, \cdot]$ — обозначают векторное произведение. Функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{r}_T, \mathbf{r}_D, \lambda) = e^{ik|\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T|} / |\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T|.$$

Ранее этот метод уже был использован для моделирования характеристик ДИ [25]. В работе реализован численный код, в котором все координаты и направления задаются в глобальной системе координат, где ось Z привязана к направлению движения частицы и оси образуют правую систему координат. Начало координат в глобальной системе координат по оси Z выбирается в точке, по нормали ближайшей к центру решетки (см. рис. 2). Для произвольной плоской мишени вектор нормали можно представить в виде

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}_T) = A(\psi) \times \{0, 0, 1\},\$$

где $A(\psi)$ — трехмерная матрица поворота нормали к мишени на угол ψ , знак «×» — матричное про-



Рис. 2. Графические пояснения к системе координат, используемой в моделировании

изведение. Для случая исследуемой решетки и выбранной системы координат, матрица поворота $A(\psi)$ вокруг оси Y равна

$$\begin{pmatrix} \cos\psi & 0 & \sin\psi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\psi & 0 & \cos\psi \end{pmatrix}$$

Аналогично можно представить и координаты точек на детекторе в случае плоской поверхности его апертуры:

$$\mathbf{r}_D = \{x_D, y_D, z_D\} = B(\theta) \times \{X_D, Y_D, L\},\$$

где $B(\theta)$ — матрица поворота на полярный угол θ вокруг оси Y, L — расстояние от центра глобальной системы координат (точка 0,0,0) до центра апертуры детектора (точка с координатами $B(\theta) \times \{0,0,L\}$), $\{X_D, Y_D\}$ — координаты на плоскости детектора до поворота (см. рис. 2).

Поле, создаваемое электроном, определяется следующим образом [17]:

$$\mathbf{E}_{e}^{T}(\mathbf{r}_{T},\lambda) = \frac{2q}{\beta^{2}c\gamma\lambda} \exp\left(i\frac{k}{\beta}z_{T}\right) \times \\ \times \left\{\frac{x_{T}}{\rho}K_{1}\left(\frac{k\rho}{\beta\gamma}\right), \frac{y_{T}}{\rho}K_{1}\left(\frac{k\rho}{\beta\gamma}\right), -\frac{i}{\gamma}K_{0}\left(\frac{k\rho}{\beta\gamma}\right)\right\}.$$

Здесь q — заряд частицы, γ — лоренц-фактор частицы, c — скорость света, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, β — относительная скорость частицы, $\rho = \sqrt{x_T^2 + y_T^2}$, K_1 и K_0 — модифицированные функции Бесселя соответственно первого и нулевого порядков. Частица движется в положительном на-



Рис. 3. Схема генерации излучения от сплошной периодической решетки, синяя стрелка показывает направление движения и траекторию частицы относительно решетки, цифры 1 и 2 и векторы **n**₁ и **n**₂ обозначают прямые и

обратные стрипы и нормали к ним, соответственно

правлении оси Z. Градиент функции Грина принимает вид

$$\nabla G(\mathbf{r}_T, \mathbf{r}_D, \lambda) =$$

$$= \frac{\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T}{|\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T|} e^{ik|\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T|} \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_D - \mathbf{r}_T|} - ik\right).$$

Определив поле излучения, можно рассчитать спектрально-угловое распределение интенсивности излучения в точке, расположенной под углом θ на расстоянии L:

$$\frac{d^2 W_e}{d\omega \, d\Omega} = |\mathbf{E}_R^D(\mathbf{r}_D, \lambda)|^2 = \\ = cL^2 \left(|E_{Rx}^D|^2, |E_{Ry}^D|^2, |E_{Rz}^D|^2 \right), \quad (16)$$

где $\{E_{Rx}^{D}, E_{Ry}^{D}, E_{Rz}^{D}\}$ — компоненты поля излучения.

Заметим, что, используя данный подход, можно численно решить задачу генерации ПИ и ДИ (в том числе ИСП) от конечной мишени, что было сделано ранее [25]. Численный код реализован в системе Wolfram Mathematica 12.0 [26]. Расчет проводился на суперкомпьютере ТПУ [27]. Пример расчета излучения с применением численной реализации на основе данного метода также представлен другими авторами в работе [28]. В разработанном коде моделирование излучения в ближней или дальней зоне (соответственно в зоне Френеля или Фраунгофера), определяется в зависимости от заданного расстояния от центра глобальной системы координат до центра точечного детектора, длины волны излучения, размеров решетки, а также угла наблюдения.

Профиль решетки в моделировании учитывается следующим образом. Полное излучение от решетки представляет собой сумму полей излучения от каждой плоской грани в отдельности (см. рис. 3), что можно представить в виде

$$\mathbf{E}_{R}^{grating}(\mathbf{r}_{D},\lambda) = \sum_{S_{T_{k}}} \mathbf{E}_{R_{k}}^{D}(\mathbf{r}_{D},\lambda).$$
(17)

Здесь S_{T_k} — площадь поверхности мишени k-ой грани в профиле решетки, здесь k меняется от 1 до 2N, N-количество периодов в решетке, $\mathbf{E}^{D}_{R_{k}}-$ поле излучения от k-й плоской грани, $\mathbf{E}_{B}^{grating}$ — полное поле излучения от решетки с заданным профилем, состоящим из набора плоских граней. При этом нужно отметить, что профиль решетки состоит из граней двух типов, назовем их прямые и обратные стрипы, где первые это те грани, вектор нормали которых направлен в отрицательном направлении по оси Z, а вторые — в положительном. Для рассматриваемой решетки матрица поворота нормали $A(\psi)$ определена соответственно углами $\psi_1 = 120^\circ$ и $\psi_2 = 30^\circ$ (см. рис. 3). Точечные детекторы в расчетах спектральных характеристик располагались в плоскости наблюдения под полярными углами $\theta_1 = 45^\circ$ и $\theta_2 = 135^\circ$ при нулевом азимутальном угле. В рассматриваемом случае поперечный размер решетки H равен 30 мм, расстояние L = 5 м.

Разработанный численный код устроен таким образом, что возможно задавать практически произвольную геометрию решетки, состоящую из набора плоских граней конечных размеров. Однако в коде не учитываются переотражения излучения от первых граней на последующих гранях. Также при расчетах не учитывается эффект экранировки поля заряженных частиц на предыдущих гранях при расчете поля излучения на последующих (так называемый эффект тени [29]).

В данной работе был сделан расчет для двух видов решеток. Для сравнения с аналитическими расчетами моделирование выполнялось для решетки, состоящей только из прямых стрипов (решетка с вакуумными промежутками) — суммирование проводилось только по нечетным индексам k в формуле (17). В том же коде выполнялось моделирование для полной решетки, состоящей из прямых и обратных стрипов (сплошная решетка). Расчет интеграла по поверхности решетки осуществлялся с помощью возможностей символьной геометрии системы Wolfram Mathematica по вычислению интегралов по заданным поверхностям на основе метода Монте-Карло.

Далее, для расчета поляризационных характеристик излучения необходимо использовать компоненты поля, перпендикулярные волновому вектору излучения, направленному в точку наблюдения. Введем поляризационные орты через векторные произведения (см. ранее (2)):

$$\mathbf{e}_1 = [\mathbf{e}_2, \mathbf{k}_0], \quad \mathbf{e}_2 = c'_{norm}[\mathbf{b}, \mathbf{k}_0], \tag{18}$$

где в выбранной глобальной системе координат $\mathbf{k}_0 = \cos \chi \sin \theta, \sin \chi \sin \theta, \cos \theta$ — единичный вектор, направленный в точку наблюдения, $c'_{norm} = 1/\sqrt{1 - (\sin \chi \sin \theta)^2}$ — нормировочный коэффициент, $\mathbf{b} = \{0, -1, 0\}$ — единичный вектор, направленный поперек решетки, т.е. вдоль стрипов, θ — полярный угол, отсчитываемый от оси Z, χ — азимутальный угол, отсчитываемый от оси X в плоскости $XY, \chi = \arctan\left(\frac{Y_D}{L}\sin\theta\right)$. Таким образом можно получить поляризационные компоненты поля ИСП в плоскости наблюдения:

$$E_1 = \mathbf{E}_R^{grating} \cdot \mathbf{e}_1, \quad E_2 = \mathbf{E}_R^{grating} \cdot \mathbf{e}_2. \tag{19}$$

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ СМИТА–ПАРСЕЛЛА ПО РАЗЛИЧНЫМ МОДЕЛЯМ

На рис. 4–6 приведены характеристики ИСП, рассчитанные по модели резонансного дифракционного излучения, описанной в разд. 2, на рис. 7–9 — по модели поляризационных токов, описанной в разд. 3.

Спектры ИСП для плоской решетки (см. рис. 4*a*), полученные для углов наблюдения $\theta_1 = 45^\circ$ и $\theta_2 = 135^\circ$ демонстрируют набор спектральных линий с $\nu(45^\circ) = j \cdot 256$ ГГц, j = 1, 2, 3и $\nu(135^\circ) = j \cdot 44$ ГГц, $j = 2, 3, \ldots, 19$ в интервале частот $\nu = 50$ –850 ГГц. Если в первом случае наблюдается монотонно убывающая зависимость с ростом частоты, то во втором случае интенсивность ИСП меняется периодически с увеличением j. Для наклонной решетки (см. рис. 4*б*) наблюдаются примерно те же зависимости, однако изменения в интенсивностях спектральных линий более резкие. Следует указать, что для этой геометрии для угла наблюдения $\theta_2 = 135^\circ$ наблюдается подавление четных порядков (на частотах 88 и 176 ГГц).

Азимутальные зависимости ИСП (распределение интенсивности спектральных линий при изменении угла χ) показаны на рис. 5 для «объемной» решетки. Для излучения в «переднюю» полусферу ($\theta_1 = 45^\circ$) наблюдается «провал» интенсивности ИСП в плоскости симметрии ($\chi = 0$), тогда как для «задней» полусферы такой зависимости нет (см. рис. 5 δ).

На рис. 6 приведены поляризационные характеристики ИСП для «объемной» решетки. Для угла $\theta_1 = 45^\circ$ в области азимутальных углов $0.2 \ge$ $\ge |\chi| \ge 0.05$ циркулярная поляризация достигает



Рис. 4. Спектральные распределения ИСП по модели резонансного дифракционного излучения от «плоской» решетки $\theta_0 = 0$ (*a*) и от «объемной» решетки $\theta_0 = 30^\circ$ (*b*) для углов наблюдения $\theta = 45^\circ$ (зеленый цвет) и $\theta = 135^\circ$ (синий цвет). Расчет проводился по формуле (10) для $\chi = 0$

почти 100%. По мере увеличения угла θ (по мере сдвига спектральных линий в «мягкую» часть) циркулярная поляризация уменьшается (для $\theta_2 = 135^\circ$) до 40%.

Понятно, что для реальной апертуры коллиматора, формирующего пучок излучения, числитель и знаменатель в выражениях (11) необходимо усреднить по телесному углу $d\Omega = \sin \theta d\theta d\chi$ и только после этого вычислять усредненные параметры Стокса.

На рис. 7 приведены спектры ИСП для двух типов решеток и двух углов наблюдения. Моделирование проводилось для следующих параметров: ширина прямого стрипа 3.46 мм, ширина обратного стрипа 2 мм, профиль периода образует прямоугольный треугольник, остальные параметры приведены на рисунках.

Длина формирования для рассматриваемого случая [19] составляет примерно $N^2 d(1 + \cos \theta)$ и равна приблизительно 1500 мм. С выбранным



Рис. 5. Азимутальное распределение ИСП от «объемной» решетки для первых трех порядков для тех же параметров, что на рис. 46 при $\theta = 45^{\circ}$ (*a*) и $\theta = 135^{\circ}$ (*б*)

значением монохроматичность спектральных линий ИСП, полученных при моделировании, практически совпадает со значениями, типичными для дальней зоны $\delta \nu_k / \nu_k = 1/kN$, где k — порядок дифракции излучения.

Сравнивая спектры излучения от решетки с вакуумными промежутками и сплошной решетки, видно, что они различаются по интенсивности. Для ИСП под углом наблюдения 45° (т.е. в переднюю полусферу относительно траектории частицы) наличие обратных стрипов в сплошной решетке по отношению к решетке с вакуумными промежутками дает деструктивную интерференцию от прямых и обратных стрипов. Напротив, для ИСП под углом наблюдения 135° (т. е. в заднюю полусферу) наличие обратных стрипов в сплошной решетке по отношению к решетке с вакуумными промежутками дает конструктивную интерференцию совместно от прямых и обратных стрипов. Сравнивая интенсивности ИСП по первому порядку дифракции, отметим, что для сплошной решетки излучение в заднюю полусферу обладает меньшей интенсивностью в 2.5 ра-



Рис. 6. Поляризационные характеристики ИСП, рассчитанные для «объемной» решетки с теми же параметрами, что на рис. 46, для углов наблюдения $\theta = 45^{\circ}$ (*a*) и $\theta = 135^{\circ}$ (*б*); параметры Стокса: ξ_1 — коричневый, ξ_2 — черный и ξ_3 — синий цвет

за, а для решетки с вакуумными промежутками — меньшей в 23 раза.

На рис. 8 приведены азимутальные распределения ИСП для двух углов 45° и 135° для частот соответственно $\nu_{1...5}(45^\circ) = 254.3, 507.1, 761.7, 1016.3,$ 1270.9 ГГц и $\nu_{1...5}(135^\circ) = 43.7, 87.9, 131.6, 175.8,$ 219.1 ГГц с 1 по 5 порядки.

Для излучения в «переднюю» полусферу «провал» интенсивности ИСП в плоскости симметрии $(\chi = 0)$ для обеих решеток не наблюдается. Тогда как для «задней» полусферы «провал» интенсивности ИСП в плоскости симметрии $(\chi = 0)$ в разной степени, которая уменьшается с ростом порядка, проявляется для всех порядков и для всех рассматриваемых типов решеток.

На рис. 8 и 9 азимутальные распределения и зависимости параметров Стокса представлены в зависимости от азимутального угла χ = = $\operatorname{arctg}(Y_D/L\sin\theta)$ соответственно для углов $\theta_1 = 45^\circ$ и $\theta_2 = 135^\circ$. Большой разброс на краях ин-



Рис. 7. Спектры ИСП для двух углов $\theta = 45^{\circ}$ (*a*) и $\theta = 135^{\circ}$ (*b*) для двух типов решеток: с вакуумными промежутками (штриховые кривые) и сплошной (сплошные кривые). Цифрами отмечены номера порядков дифракции

тервалов зависимостей параметров Стокса на рис. 9 обусловлен численным расчетом на основе метода Монте-Карло малых значений интенсивности при больших азимутальных углах.

На рис. 9 приведены поляризационные характеристики ИСП для двух углов, 45° и 135°, только для первого порядка дифракции.

Хорошо видно, что качественно характер поведения поляризации излучения от решетки с вакуумными промежутками и сплошной решетки практически одинаков. Но количественно конкретные значения параметров Стокса под тем или иным углом наблюдения могут значительно различаться. Так, для угла $\theta_1 = 45^{\circ}$ в области азимутальных углов $\chi > 0.1$ циркулярная поляризация ξ_2 достигает почти 100% для сплошной решетки и 70% для решетки с вакуумными промежутками. Для угла $\theta_2 =$ = 135° картина несколько иная — циркулярная поляризация ξ_2 достигает значений 100% в области азимутальных углов $\chi \ge 0.15$ для сплошной решет-



Рис. 8. Азимутальные распределения ИСП для двух углов $\theta = 45^{\circ}$ (*a*) и $\theta = 135^{\circ}$ (*б*) для двух типов решеток: с вакуумными промежутками (штриховые кривые) и сплошной (сплошные кривые) для порядков излучения с 1 по 5 (см. рис. 7)

ки. А для решетки с вакуумными промежутками циркулярная поляризация достигает 100 % для угла $\chi \approx 0.1$, а затем убывает до 70 % и снова несколько увеличивается.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано аналитически (для модельной решетки, состоящей из стрипов, разделенных вакуумными промежутками) и численным моделированием (для решетки с треугольным профилем), что излучение Смита – Парселла под азимутальным углом $\chi \neq 0$ является эллиптически поляризованным. Вклад циркулярно поляризованной компоненты ИСП возрастает по мере увеличения азимутального угла и для достаточно больших углов может достигать 100 %.

Для получения монохроматического пучка излучения следует коллимировать часть ИСП аперту-



Рис. 9. Зависимость трех параметров Стокса для первого порядка ИСП для двух углов $\theta = 45^{\circ}$ (*a*) и $\theta = 135^{\circ}$ (*б*) для двух типов решеток: с вакуумными промежутками (штриховые кривые) и сплошной (сплошные кривые)

рой, расположенной вне плоскости, перпендикулярной центральной плоскости решетки. При выборе апертуры коллиматора из условий [30]: $\delta \chi = \delta \theta \ge$ $\geq tg(\theta/2)/kN$, монохроматичность излучения будет определяться только числом периодов, поскольку от азимутального угла χ дисперсионное соотношение (1) не зависит. Отметим, что измерения циркулярной поляризации ИСП, судя по имеющимся публикациям, до настоящего времени не проводились.

Авторы работы [31] измерили линейную поляризацию когерентного ИСП в субтерагерцевом диапазоне. Эксперимент проводился на пучке электронов с энергией 20 ГэВ под углами наблюдения $\theta = 90^{\circ}$, $\chi = 0$. Авторы измерили линейную поляризацию ИСП для различных периодов решетки и показали, что степень линейной поляризации изменяется в пределах 0.55–0.85 для плоскости, перпендикулярной решетке. Следует отметить, что измерения проводились с детектором, размещенным на расстоянии 155 мм от решетки длиной 40 мм, т.е. условие дальней зоны не выполнялось. Можно ожидать, что циркулярно поляризованная компонента ИСП при измерениях под углами $\chi \neq 0$ также будет весьма значительной, $\xi_2 \approx 0.5$.

В работе [32] также измерялась линейная поляризация ИСП в субтерагерцевом диапазоне на пучке электронов ускорителя LUCX с энергией 8 МэВ. Исследования проводились в области углов $\theta = 90^{\circ} \pm 5^{\circ}, \chi = 0$ при использовании вращающегося проволочного поляризатора. Как и в предыдущем случае, условие размещения детектора в дальней зоне не соблюдалось. Результаты измерений линейной поляризации ИСП колебались в широком диапазоне для разных углов наблюдения, однако, в среднем, степень линейной поляризации может быть оценена на уровне 50 %. Авторы объясняют заметное отличие экспериментального результата от моделирования несовпадением оси вращения поляризатора с оптической осью используемого интерферометра, а также большим захватом по азимутальному углу.

Методику поляризационных измерений с вращающимся поляризатором [32] можно использовать для доказательства наличия эллиптической поляризации ИСП. При увеличении азимутального угла линейная поляризация ИСП уменьшается, что легко можно измерить экспериментально. Уменьшение степени линейной поляризации вплоть до нуля (при достаточно большом угле χ) будет свидетельствовать в пользу наличия циркулярно поляризованной компоненты ИСП.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования, выделенной Томскому политехническому университету в рамках программы развития и по проекту № FSWW 2020-0008. Расчеты выполнены на вычислительном кластере Томского политехнического университета.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. M. Tonouchi, Nat. Photon. 1, 97 (2007).
- C. G. Wade, N. Sibalic, N. R. de Melo et al., Nat. Photon. 11, 40 (2017).
- A. Doria, G. P. Gallerano, E. Giovenale et al., Phys. Rev. Lett. 93, 264801 (2004).
- E. A. Antokhin, R. R. Akberdin, V. S. Arbuzov et al., Nucl. Instr. Meth. A 528, 15 (2004).
- 5. G. P. Williams, Rep. Prog. Phys. 69, 301 (2006).

- Y.-L. Mathis, B. Gasharova, and D. Mosset, J. Biolog. Phys. 29, 313 (2003).
- K. Y. Kim, A. J. Taylor, J. H. Glownia et al., Nat. Photon. 2, 605 (2008).
- V. L. Bratman, A. E. Fedorov, and P. B. Makhalov, Appl. Phys. Lett. 98, 061503 (2011).
- 9. Y. Liang, Y. Du, and X. Su, Appl. Phys. Lett. 112, 053501 (2018).
- M. Born and E. Wolf, *Principle of Optics*, Cambridge University Press (2013).
- 11. J. B. Masson and G. Gallot, Opt. Lett. 31, 265 (2006).
- 12. D. T. Chuss, E. J. Wollack, R. Henry et al., Appl. Opt. 51, 197 (2012).
- 13. F. Miyamaru and M. Hangyo, Appl. Optics 43, 1412 (2004).
- 14. C. H. Morris, R. V. Aguilar, A. V. Stier et al., Opt. Exp. 20, 12303 (2012).
- M. Neskat and N. P. Armitage, Opt. Exp. 20 (27), 29063 (2012).
- 16. A. P. Potylitsyn, Phys. Lett. A 238, 12 (1998).
- A. P. Potylitsyn, M. I. Ryazanov, M. N. Strikhanov, and A. A. Tishchenko, *Diffraction Radiation from Relativistic Particles*, Springer, Heidelberg (2010).
- 18. А. П. Казанцев, Г. И. Сурдутович, ДАН СССР 7, 90 (1963).
- **19**. Д. В. Карловец, А. П. Потылицын, Письма в ЖЭТФ **84**, 579 (2006).
- **20**. М. И. Рязанов, И. С. Тилинин, ЖЭТФ **71**, 6 (1976).
- **21**. Д. В. Карловец, А. П. Потылицын, Письма в ЖЭТФ **90**, 5 (2009).
- **22**. Д. В. Карловец, А. П. Потылицын, ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
- 23. М. И. Рязанов, Письма в ЖЭТФ 39, 12 (1984).
- **24**. А. С. Коньков, Дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук., ТПУ, Томск (2015).
- D. A. Shkitov, Proc. 26th Russian Particle Accelerator Conference, THPSC56 (2018).
- Wolfram Mathematica, http://www.wolfram.com/ mathematica/.

- 27. Гибридный высокопроизводительный сервер на базе ЦПУ/ГПУ Т-Платформы, https://www.t-platforms.ru/.
- 28. D. V. Karlovets and A. P. Potylitsyn, Phys. Lett. A 373, 22 (2009).
- 29. G. A. Naumenko, A. P. Potylitsyn, Yu. A. Popov et al., Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C 34, 4 (2011).
- 30. A. Aryshev, A. Potylitsyn, G. Naumenko et al., Phys. Rev. ST AB 20, 024701 (2017).
- 31. F. Bakkali Taheri, I. V. Konoplev, G. Doucas et al., Proc. 7th Int. Particle Accelerator Conf., MOPMR041 (2016).
- H. Harrison, PhD Thesis, Univ. of Oxford, England (2018).

СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ДЛЯ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ КВАНТОВЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

А. В. Козловский*

Физический институт Российской академии наук им. П. Н. Лебедева 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 2 июня 2021 г., после переработки 5 июля 2021 г. Принята к публикации 5 июля 2021 г.

Получены и проанализированы соотношения неопределенностей для операторов разности фаз двух электромагнитных полей, предложенных нами ранее [10]. Проведены исследования соотношения неопределенностей для операторов косинуса и синуса разности фаз, а также для операторов суммы числа фотонов и операторов разности фаз двух полей. Рассмотрены фоковские и когерентные квантовые состояния полей, общие состояния квантовых суперпозиций когерентных состояний полей и состояния «шредингеровского кота» полей. Исследуется строгое соотношение неопределенностей (неравенство Коши – Шварца) и соотношение неопределенностей Гейзенберга для указанных операторов и квантовых состояний полей. На примерах рассмотренных состояний полей показаны различия между строгими соотношениями неопределенностей и соотношениями неопределенностей Гейзенберга для тригонометрических операторов разности фаз полей. Показано, что строгие соотношения неопределенностей и соотношения неопределенностей Гейзенберга качественно различны как для когерентных состояний, так и для состояний квантовых суперпозиций, и совпадают в случае фоковских состояний полей.

DOI: 10.31857/S0044451021120026

1. ВВЕДЕНИЕ

Решение проблемы последовательного и полного квантовомеханического описания электромагнитного поля сталкивается со значительными теоретическими трудностями, связанными с определением квантовомеханической фазы поля. Квантовомеханический подход к определению фазы поля необходим в условиях слабых и ультраслабых электромагнитных полей с числом фотонов порядка единицы: $\langle \hat{n} \rangle \sim 1$, применяемых при решении задач в области квантовых технологий. В ряде работ [1-9] предложено несколько подходов к построению эрмитовых тригонометрических квантовых операторов фазы электромагнитного поля. Существенной особенностью результатов этих работ является то, что предлагаемые в них операторы синуса и косинуса фазы не удовлетворяют основному тригонометрическому соотношению; т. е. $\hat{\cos}^2 \phi + \hat{\sin}^2 \phi \neq \hat{1}$. Вследствие этого, для получения операторов разности фаз двух полей, величин, широко используемых на практике для описания явлений интерференции, операторы такого рода применены быть не могут, так как стандартные формулы для разности и суммы фаз в условиях нарушения основного соотношения тригонометрии не выполняются.

В работе [10] нами предложены эрмитовы операторы синуса и косинуса разности фаз двух полей, удовлетворяющие основному соотношению тригонометрии. Тригонометрические операторы разности фаз (ТОРФ) определяются в [10] с помощью интерференционных операторов пассивного светоделителя. В настоящей работе нами проводятся дальнейшие исследования свойств ТОРФ, предложенных в [10]. Получены и проанализированы различные соотношения неопределенностей для этих операторов. Исследуются строгие соотношения неопределенностей, представляющие собой неравенство Коши-Шварца для ТОР $\Phi \hat{C}_I$ и \hat{S}_I , а также тригонометрические соотношения неопределенностей (ТСН) для операторов суммы числа фотонов двух полей $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{C}_I , \hat{S}_I . Также исследовано соотношение

^{*} E-mail: kozlovskiyav@lebedev.ru

неопределенностей Гейзенберга для указанных пар операторов.

Рассмотрены когерентные квантовые состояния двух полей, наиболее близкие по своим свойствам к классическому электромагнитному полю, а также ярко выраженные неклассические квантовые фоковские состояния и состояния общих суперпозиций двух когерентных состояний.

Рассмотрены частные случаи состояния общих суперпозиций когерентных состояний — состояния «шредингеровского кота», находящие свое применение в областях квантовой метрологии и квантовых вычислений.

2. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ДЛЯ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ полей

Рассматриваемое нами строгое соотношение неопределенностей (ССН), представляет собой неравенство Коши-Шварца [11, 12] для любых двух эрмитовых операторов поля \hat{A} и \hat{B} и имеет следующий вид:

$$\left\langle \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta \hat{B}\right)^2 \right\rangle \ge \left| \left\langle \hat{A}, \hat{B} \right\rangle \right|^2,$$
 (1)

где $\left\langle \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right\rangle$, $\left\langle \left(\Delta \hat{B}\right)^2 \right\rangle$ — дисперсии операторов \hat{A} и \hat{B} , а $\left\langle \hat{A}, \hat{B} \right\rangle \equiv \left\langle \hat{A}\hat{B} \right\rangle - \left\langle \hat{A} \right\rangle \left\langle \hat{B} \right\rangle$

— ковариация (центральный корреляционный момент) для данных операторов.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга (СНГ), исследуемое нами для тригонометрических операторов разности фаз двух электромагнитных полей наряду со строгим соотношением неопределенностей (1), имеет следующий вид:

$$\left\langle \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta \hat{B}\right)^2 \right\rangle \ge \frac{\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|^2}{4}.$$
 (2)

Отметим, что СНГ накладывает менее жесткое ограничение на величину произведения дисперсий операторов (флуктуаций наблюдаемых) по сравнению с ограничением, следующим из ССН [12].

Причины различий СНГ и ССН и критерии применимости того или иного соотношения представлены и обсуждаются в работе [12].

Соотношение Гейзенберга (2) имеет место только тогда, когда

$$\left\langle \left\{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \right\} \right\rangle = 0$$

где

$$\left\{\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}\right\} \equiv \Delta \hat{A} \ \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \ \Delta \hat{A}$$

— антикоммутатор операторов

И

$$\Delta \hat{B} \equiv \hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle$$

 $\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle$

Соотношения неопределенностей (1) и (2) рассматриваются в настоящей работе для ТОРФ, определяемых с помощью операторов интерференции двух полей, поступающих на входы пассивного светоделителя и характеризующих интенсивности (числа фотонов) полей на выходе из светоделителя [10].

Согласно квантовой теории операторы рождения/уничтожения электромагнитных полей

$$\hat{a}_i^{\dagger}, \hat{a}_i, \quad i = 1, 2,$$

рассматриваемых нами, удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям

$$\left[\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{\dagger}\right] = \delta_{i,j}, \quad i,j = 1,2.$$

$$(3)$$

Введем в рассмотрение эрмитовы операторы косинуса и синуса разности фаз полей \hat{a}_1 и \hat{a}_2 , используя интерференционные операторы \hat{I}_C и \hat{I}_S светоделителя,

$$\hat{I}_C \equiv \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 + \hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1, \tag{4}$$

$$\hat{I}_S \equiv i \left(\hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1 - \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 \right), \qquad (5)$$

в следующем симметризованном виде [10]:

$$\hat{C}_I \equiv \hat{\cos}(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[\hat{K}_I \hat{I}_C + \hat{I}_C \hat{K}_I \right],$$
 (6)

$$\hat{S}_I \equiv \hat{\sin}(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[\hat{K}_I \hat{I}_S + \hat{I}_S \hat{K}_I \right],$$
 (7)

где

$$\hat{K}_I \equiv \frac{1}{\sqrt{\hat{I}_C^2 + \hat{I}_S^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + 2\,\hat{n}_1\hat{n}_2\right)}},\qquad(8)$$

поскольку сумма квадратов операторов интерференции выражаются через операторы числа фотонов входных полей светоделителя согласно

$$\hat{I}_C^2 + \hat{I}_S^2 = 2\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + 2\,\hat{n}_1\hat{n}_2\right).$$

Может быть показано, что операторы \hat{C}_I и \hat{S}_I , определяемые с помощью (6) и (7), не коммутируют между собой:

$$\left[\hat{C}_I, \hat{S}_I\right] \neq 0$$

Операторы квадрата косинуса и синуса разности фаз полей, выражаемые через операторы интерференции, запишем также в симметризованном виде [10] согласно

$$\hat{C}_I^2 \equiv \hat{\cos}^2(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[\hat{K}_I^2 \ \hat{I}_C^2 + \hat{I}_C^2 \ \hat{K}_I^2 \right], \quad (9)$$

$$\hat{S}_{I}^{2} \equiv \hat{\sin}^{2}(\phi_{1} - \phi_{2}) = \frac{1}{2} \left[\hat{K}_{I}^{2} \, \hat{I}_{S}^{2} + \hat{I}_{S}^{2} \, \hat{K}_{I}^{2} \right].$$
(10)

Нетрудно убедиться, что определенные таким образом операторы квадратов тригонометрических функций точно удовлетворяют основному тригонометрическому соотношению, т. е.

$$\hat{C}_I^2 + \hat{S}_I^2 = \hat{1}.$$

Выполнение этого соотношение обеспечивается выбором вида нормировочного оператора \hat{K}_I согласно формуле (8).

Отметим, что операторы, определяемые формулами (6) и (7), возведенными в квадрат, не удовлетворяют основному тригонометрическому соотношению в квантовом режиме слабых полей.

3. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ, ДИСПЕРСИИ И КОРРЕЛЯЦИИ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ

В настоящем разделе нами найдены выражения для наблюдаемых средних ТОРФ, средних квадратов и дисперсий (флуктуаций), а также корреляционных функций ТОРФ для полей в произвольных квантовых состояниях.

Операторы косинуса и синуса (6) и (7) в базисе фоковских квантовых состояний двух полей могут быть записаны в виде

$$\hat{C}_{I} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{1}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 1\rangle \langle n_{1} + 1, n_{2}| + \text{H.c.}), \quad (11)$$

$$\hat{S}_{I} = \frac{i}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{1}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 1\rangle \langle n_{1} + 1, n_{2}| - \text{H.c.}), \quad (12)$$

где введено обозначение

$$K_{1}(n_{1}, n_{2}) \equiv \sqrt{\frac{(n_{1}+1)(n_{2}+1)}{2}} \times \left[\frac{1}{\sqrt{n_{1}+n_{2}+1+2n_{1}(n_{2}+1)}} + \frac{1}{\sqrt{n_{1}+n_{2}+1+2n_{2}(n_{1}+1)}}\right] + \frac{1}{\sqrt{n_{1}+n_{2}+1+2n_{2}(n_{1}+1)}} \left[. \quad (13)\right]$$

Для операторов квадратов тригонометрических функций разности фаз, в свою очередь, с помощью (9), (10) и (8) находим в базисе фоковских состояний следующие выражения:

$$\hat{C}_{I}^{2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} K_{2}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 2\rangle \langle n_{1} + 2, n_{2}| + \text{H.c.}), \quad (14)$$

$$\hat{S}_{I}^{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} K_{2} \left(n_{1}, n_{2} \right) \times \\ \times \left(|n_{1}, n_{2} + 2 \rangle \langle n_{1} + 2, n_{2}| + \text{H.c.} \right), \quad (15)$$

где введено обозначение

$$K_{2}(n_{1}, n_{2}) \equiv \sqrt{(n_{1}+1)(n_{1}+2)(n_{2}+1)(n_{2}+2)} \times \left[\frac{1}{n_{1}+n_{2}+2+2n_{1}(n_{2}+2)} + \frac{1}{n_{1}+n_{2}+2+2n_{2}(n_{1}+2)}\right] + \frac{1}{n_{1}+n_{2}+2+2n_{2}(n_{1}+2)} \left[. \quad (16)\right]$$

Средние значения ТОРФ для произвольных квантовых состояний двух полей $|x_1\rangle$ и $|x_2\rangle$ с помощью формул (11), (12) могут быть найдены в виде

$$\left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \langle x_{1}, x_{2} | \hat{C}_{I} | x_{1}, x_{2} \rangle =$$

$$= \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{1} \left(n_{1}, n_{2} \right) \operatorname{Re} \left(\langle x_{1} | n_{1} \rangle \langle n_{2} | x_{2} \rangle \times \langle x_{2} | n_{2} + 1 \rangle \langle n_{1} + 1 | x_{1} \rangle \right), \quad (17)$$

$$\left\langle \hat{S}_{I} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \langle x_{1}, x_{2} | \hat{S}_{I} | x_{1}, x_{2} \rangle =$$

$$= \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{1} \left(n_{1}, n_{2} \right) \operatorname{Im} \left(\langle x_{1} | n_{1} \rangle \langle n_{2} | x_{2} \rangle \times$$

$$\times \langle x_{2} | n_{2} + 1 \rangle \langle n_{1} + 1 | x_{1} \rangle \right). \quad (18)$$

Используя (14)–(16), для средних значений квадратов ТОРФ получаем

$$\left\langle \hat{C}_{I}^{2} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \langle x_{1}, x_{2} | \hat{C}_{I}^{2} | x_{1}, x_{2} \rangle =$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{2} (n_{1}, n_{2}) \times$$

$$\times \operatorname{Re} \left(\langle x_{1} | n_{1} \rangle \langle n_{2} | x_{2} \rangle \langle x_{2} | n_{2} + 2 \rangle \langle n_{1} + 2 | x_{1} \rangle \right), \quad (19)$$

$$\left\langle \hat{S}_{I}^{2} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \left\langle x_{1}, x_{2} | \hat{S}_{I}^{2} | x_{1}, x_{2} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{2} \left(n_{1}, n_{2} \right) \times$$

$$\times \operatorname{Re} \left(\left\langle x_{1} | n_{1} \right\rangle \left\langle n_{2} | x_{2} \right\rangle \left\langle x_{2} | n_{2} + 2 \right\rangle \left\langle n_{1} + 2 | x_{1} \right\rangle \right). \quad (20)$$

Средние значения произведения ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I для произвольных состояний полей, необходимые для расчетов ССН (если положить в формуле (1) $\hat{A} = \hat{C}_I, \hat{B} = \hat{S}_I$), могут быть записаны в виде

$$\left\langle \hat{C}_{I}\hat{S}_{I} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \langle x_{1}, x_{2} | \hat{C}_{I}\hat{S}_{I} | x_{1}, x_{2} \rangle =$$

$$= \frac{i}{4} \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{1}^{2} (n_{1}, n_{2}) \left(\left| \langle x_{1} | n_{1} + 1 \rangle \right|^{2} | \langle n_{2} | x_{2} \rangle \right|^{2} - \left| \langle x_{1} | n_{1} \rangle \right|^{2} | \langle n_{2} + 1 | x_{2} \rangle |^{2} \right) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{1} (n_{1}, n_{2} + 1) K_{1} (n_{1} + 1, n_{2}) \times$$

$$\times \operatorname{Im} \left(\langle x_{1} | n_{1} \rangle \langle n_{2} | x_{2} \rangle \langle x_{2} | n_{2} + 2 \rangle \langle n_{1} + 2 | x_{1} \rangle \right). \quad (21)$$

Средние значения коммутаторов ТОРФ для произвольных состояний полей, определяющие правые части СНГ (если положить в формуле (2) $\hat{A} = \hat{C}_I$, $\hat{B} = \hat{S}_I$), находятся с помощью следующего выражения:

$$\left\langle \left[\hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right] \right\rangle_{x_{1}, x_{2}} \equiv \langle x_{1}, x_{2} | \left[\hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right] | x_{1}, x_{2} \rangle =$$

$$= \frac{i}{2} \sum_{n_{1}, n_{2}=0}^{\infty} K_{1}^{2} \left(n_{1}, n_{2} \right) \left(\left| \langle x_{1} | n_{1}+1 \rangle \right|^{2} | \langle n_{2} | x_{2} \rangle \right|^{2} - \left| \langle x_{1} | n_{1} \rangle \right|^{2} | \langle n_{2}+1 | x_{2} \rangle |^{2} \right). \quad (22)$$

Левая часть соотношения неопределенностей (СН) для оператора суммы числа фотонов и ТОРФ \hat{C}_I (присутствующая в формулах (1) и (2) при $\hat{A} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$, $\hat{B} = \hat{C}_I$) имеет вид

$$L_{x_1,x_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{C}_I\right) = \left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2 \right\rangle_{x_1,x_2} \times \left\langle \left(\Delta \hat{n}_1\right)^2 \right\rangle_{x_1} + \left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2 \right\rangle_{x_2,x_2} \left\langle \left(\Delta \hat{n}_2\right)^2 \right\rangle_{x_2}, \quad (23)$$

где дисперсии числа фотонов каждого из полей есть

$$\left\langle \left(\Delta \hat{n}_{j}\right)^{2}\right\rangle_{x_{j}} = \sum_{n_{j}=0}^{\infty} n_{j}^{2} \left|\langle x_{j} \mid n_{j} \rangle\right|^{2} - \left(\sum_{n_{j}=0}^{\infty} n_{j} \left|\langle x_{j} \mid n_{j} \rangle\right|^{2}\right)^{2}, \quad j = 1, 2. \quad (24)$$

Правая часть ССН при этом имеет вид

$$R_{t,x_1,x_2}\left(\hat{n}_1+\hat{n}_2,\hat{C}_I\right) = \left|\left\langle \left(\hat{n}_1+\hat{n}_2\right),\hat{C}_I\right\rangle_{x_1,x_2}\right|^2 \equiv \\ \equiv \left|\left\langle \left(\hat{n}_1+\hat{n}_2\right)\hat{C}_I\right\rangle_{x_1,x_2} - \\ -\left\langle\hat{n}_1+\hat{n}_2\right\rangle_{x_1,x_2}\left\langle\hat{C}_I\right\rangle_{x_1,x_2}\right|^2. \quad (25)$$

Аналогично выглядит правая часть ССН $R_{t,x_1,x_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right)$ с заменой в (25) \hat{C}_I на \hat{S}_I .

Для корреляторов оператора суммы числа фотонов и ТОРФ получаем

$$\left\langle \left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right)\hat{C}_{I}\right\rangle _{x_{1},x_{2}} \equiv \left\langle x_{1},x_{2}\right|\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right)\hat{C}_{I}|x_{1},x_{2}\right\rangle =$$

$$=\sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty}K_{3}\left(n_{1},n_{2}\right)\operatorname{Re}\left(\left\langle x_{1}\right.\left|n_{1}\right\rangle\left\langle n_{2}\right|\left.x_{2}\right\rangle\times\right.\right.$$

$$\times\left\langle x_{2}|n_{2}+1\right\rangle\left\langle n_{1}+1|\left.x_{1}\right\rangle\right),\quad(26)$$

$$\left\langle \left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right)\hat{S}_{I}\right\rangle _{x_{1},x_{2}}\equiv\left\langle x_{1},x_{2}\right|\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right)\hat{S}_{I}|x_{1},x_{2}\right\rangle =$$

$$=-\sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty}K_{3}\left(n_{1},n_{2}\right)\operatorname{Im}\left(\left\langle x_{1}\mid n_{1}\right\rangle\left\langle n_{2}\mid x_{2}\right\rangle\times\right)$$

$$\times\left\langle x_{2}\mid n_{2}+1\right\rangle\left\langle n_{1}+1\mid x_{1}\right\rangle\right),\quad(27)$$

где обозначено

 $K_3(n_1, n_2) = (n_1 + n_2 + 1) K_1(n_1, n_2).$

4. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ПОЛЕЙ В ФОКОВСКИХ СОСТОЯНИЯХ

Рассмотрим случай, когда оба электромагнитных поля, разность фаз которых исследуются нами, находятся в фоковских состояниях $|n_{01}\rangle$ и $|n_{02}\rangle$, n_{01} , $n_{02} \geq 0$. Найдем левые части соотношений неопределенностей для операторов разности фаз \hat{C}_I и \hat{S}_I (полагая в формулах (1) и (2) $\hat{A} = \hat{C}_I$, $\hat{B} = \hat{S}_I$), определяемые для произвольных квантовых состояний полей выражениями (17)–(20). Дисперсии ТОРФ $\left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2 \right\rangle_{n_{01},n_{02}}$ и $\left\langle \left(\Delta \hat{S}_I\right)^2 \right\rangle_{n_{01},n_{02}}$ в случае фоковских состояний полей, входящие в левую часть CH,

$$L_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \\ \equiv \left\langle \left(\Delta\hat{C}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{n_{01},n_{02}} \left\langle \left(\Delta\hat{S}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{n_{01},n_{02}},$$

находятся путем подстановки в выражения для этих величин (17)–(20) скалярных произведений вида $\langle n \mid n' \rangle = \delta_{n,n'}$. В результате получаем соотношения

$$\left\langle \left(\Delta \hat{C}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{n_{01},n_{02}} = \left\langle \left(\Delta \hat{S}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{n_{01},n_{02}} = \frac{1}{2},$$

при этом средние значения ТОРФ равны

$$\left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{n_{01}, n_{02}} = \left\langle \hat{S}_{I} \right\rangle_{n_{01}, n_{02}} = 0$$

это означает, что случайная величина разности фаз обладает равномерным распределением со значениями от 0 до 2π .

Таким образом, получаем, что левая часть CH для ТОРФ в случае фоковских состояний полей есть

$$L_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = \frac{1}{4}.$$
 (28)

Найдем далее правые части точного соотношения неопределенностей (неравенства Коши–Шварца, ССН) и соотношения неопределенностей Гейзенберга (СНГ). Из выражений для этих двух неравенств (1) и (2) в случае, если $\hat{A} = \hat{C}_I$, $\hat{B} = \hat{S}_I$, с помощью соотношения ортонормированности векторов фоковских состояний $\langle n \mid n' \rangle = \delta_{n,n'}$ получаем формулу для ковариации ТОРФ, входящей в правую часть ССН:

$$\left\langle \hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right\rangle_{n_{01}, n_{02}} \equiv \langle n_{01}, n_{02} | \hat{C}_{I} \hat{S}_{I} | n_{01}, n_{02} \rangle - - \langle n_{01}, n_{02} | \hat{C}_{I} | n_{01}, n_{02} \rangle \langle n_{01}, n_{02} | \hat{S}_{I} | n_{01}, n_{02} \rangle = = \frac{i}{4} \sum_{n_{1}, n_{2}=0}^{\infty} K_{1}^{2} (n_{1}, n_{2}) \times \times \left(\delta_{n_{01}, n_{1}+1}^{2} \delta_{n_{02}, n_{2}}^{2} - \delta_{n_{01}, n_{1}}^{2} \delta_{n_{02}, n_{2}+1}^{2} \right), \quad (29)$$

и для среднего коммутатора, определяющего правую часть СНГ, находим

$$\left\langle \left[\hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right] \right\rangle_{n_{01}, n_{02}} \equiv \left\langle n_{01}, n_{02} \right| \left[\hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right] \left| n_{01}, n_{02} \right\rangle = 2 \left\langle \hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right\rangle_{n_{01}, n_{02}}.$$
 (30)

Таким образом, получены следующие выражения для правых частей ССН и СНГ в случае фоковских состояний полей:

$$R_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right\rangle_{n_{01},n_{02}}\right|^{2} =$$

$$= \frac{1}{4}\left|\left\langle\left[\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right]\right\rangle_{n_{01},n_{02}}\right|^{2},$$

$$R_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right\rangle_{n_{01},n_{02}}\right|^{2} =$$

$$= \frac{1}{4}\left|\left\langle\left[\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right]\right\rangle_{n_{01},n_{02}}\right|^{2}, \quad n_{01},n_{02} > 0.$$
(31)

Из равенств (31) следует, что для полей в фоковских состояниях ССН и СНГ совпадают для любых $n_{01}, n_{02} \ge 0.$

Из выражения (29) также следует, что, если $n_{01}, n_{02} > 0$, то правые части CH есть

$$R_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = \frac{1}{16} \left[K_{1}^{2}\left(n_{01},n_{02}-1\right) - K_{1}^{2}\left(n_{01}-1,n_{02}\right)\right]^{2}.$$
 (32)

При $n_{01} = 0, n_{02} > 0$ имеем

$$R_{0,n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = \frac{1}{16}K_{1}^{4}\left(n_{01},n_{02}-1\right)$$

При $n_{01} > 0$, $n_{02} = 0$ получаем

$$R_{0,n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = \frac{1}{16}K_{1}^{4}\left(n_{01}-1,0\right).$$

В случае $n_{01} = n_{02} = 0$ находим

$$R_{0,0}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)=0.$$

Для больших значений $n_{01}, n_{02} \rightarrow \infty$ правая часть CH стремится к нулю, так как

$$\left\langle \hat{C}_{I}, \hat{S}_{I} \right\rangle_{n_{01}, n_{02}} \to 0,$$

т.е. ТОРФ не коррелируют между собой.

На рис. 1 изображена зависимость правой части СН $R_{n_{01},n_{02}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right)$ от значений чисел фотонов n_{01} и n_{02} фоковских состояний полей $|n_{01}\rangle$ и $|n_{02}\rangle$, $0 \leq n_{01}, n_{02} \leq 10$. На рисунке видно, что правая часть СН заметно отличается от 0 только для малых значений n_{01} или n_{02} вблизи 0, т.е. в случае когда одно из полей находится в состоянии близком к вакуумному состоянию.

Левая часть CH значительно превышает левую часть CCH и CHГ для всех значений n_{01} и n_{02} за исключением состояний полей

$$|n_{01} = 0\rangle, |n_{02} = 1\rangle$$

И

$$|n_{01} = 1\rangle, |n_{02} = 0\rangle,$$



Рис. 1. Зависимость правой части соотношения неопределенностей операторов косинуса и синуса разности фаз

$$R_{t,n01,n02}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \\ \equiv \left|\left\langle\hat{C}_{I}\hat{S}_{I}\right\rangle_{n01,n02} - \left\langle\hat{C}_{I}\right\rangle_{n01,n02}\left\langle\hat{S}_{I}\right\rangle_{n01,n02}\right|^{2}$$

для фоковских состояний полей $|n_1
angle$ и $|n_2
angle$ от средних значений числа фотонов n_{01} и n_{02} состояний

т.е. в случаях, когда одно из полей находится в вакуумном состоянии, а состояние другого поля является однофотонным. В этих особых случаях

$$R_{1,0}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = R_{0,1}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = L_{1,0}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = \frac{1}{4},$$

и это означает, что фоковские состояния полей являются состояниями с минимальной неопределенностью TOPФ только для разностей фаз однофотонного и вакуумного состояний полей.

Вместе с тем, рассматривая СН для оператора полного числа фотонов

$$\hat{N}_1 + \hat{N}_2 = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$$

и ТОР
Ф \hat{C}_I и \hat{S}_I с помощью формул (26) и (27) и соотношения

$$\left\langle \left(\Delta \left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right)\right)^{2}\right\rangle _{n_{01},n_{02}}=0,$$

нетрудно убедиться, что СН для $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I для полей в фоковских состояниях представляет собой равенство

$$R_{t,n_{01},n_{02}}\left(\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right),\hat{C}_{I}\right) =$$

$$=R_{t,n_{01},n_{02}}\left(\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right),\hat{S}_{I}\right) =$$

$$=L_{n_{01},n_{02}}\left(\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right),\hat{C}_{I}\right) =$$

$$=L_{n_{01},n_{02}}\left(\left(\hat{n}_{1}+\hat{n}_{2}\right),\hat{S}_{I}\right) = 0. \quad (33)$$

Следовательно, фоковские состояния полей являются квантовыми состояниями с минимальной неопределенностью для операторов полного (суммарного) числа фотонов двух полей и ТОРФ \hat{C}_I , \hat{S}_I для любых значений числа фотонов n_{01} , n_{02} .

В случае если одно из полей находится в фоковском, а другое поле в произвольном квантовом состоянии ($|n_{01}\rangle$, $|x_2\rangle$ или $|x_1\rangle$, $|n_{02}\rangle$), из выражений (17) и (18) следует, что средние значения ТОРФ в этом случае равны 0, а дисперсии ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I равны 1/2, так же как и в случае фоковских состояний обоих полей. Из формул (21) и (22) в случае, когда одно из полей находится в фоковском состоянии, следует, что ССН и СНГ совпадают между собой для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I . Так, например,

$$R_{t,n_{01},x_{2}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) = R_{H,n_{01},x_{2}}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right),\qquad(34)$$

причем

$$\left\langle \hat{C}_{I}\hat{S}_{I}\right\rangle_{n_{01},x_{2}} = \frac{i}{4}\sum_{n_{2}=0}^{\infty} \left(K_{1}^{2} \left(n_{01}-1, n_{2} \right) \left| \left\langle n_{2} \right| \left| x_{2} \right\rangle \right|^{2} - K_{1}^{2} \left(n_{01}, n_{2} \right) \left| \left\langle n_{2}+1 \right| \left| x_{2} \right\rangle \right|^{2} \right)$$
(35)

при $n_{01} > 0$ и

$$\left\langle \hat{C}_{I}\hat{S}_{I} \right\rangle_{n_{01},x_{2}} =$$

= $-\frac{i}{4} \sum_{n_{2}=0}^{\infty} K_{1}^{2}(0,n_{2}) \left| \left\langle n_{2}+1 \right| x_{2} \right\rangle \right|^{2}, \quad (36)$

при $n_{01} = 0$ для любого квантового состояния $|x_2\rangle$.

Поскольку оператор суммарного числа фотонов полей $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ коммутируют с ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I , ССН для операторов $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и \hat{C}_I , \hat{S}_I совпадают с СНГ для этих операторов в рассматриваемом случае полей в фоковском и произвольном квантовых состояниях. При этом правые части ССН и СНГ равны нулю. Отметим равенство нулю правой части СНГ для $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и \hat{C}_I , \hat{S}_I для любых квантовых состояний $|x_1\rangle$, $|x_2\rangle$, поскольку операторы суммы числа фотонов и ТОРФ коммутируют между собой.

5. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ПОЛЕЙ В КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЯХ

Рассмотрим теперь случай, когда оба поля находятся в когерентных состояниях

$$|x_j\rangle = |\alpha_j\rangle, \alpha_j = \sqrt{n_{\alpha_j}}e^{i\,\varphi_{\alpha_j}}, \quad j = 1, 2.$$



Найдем левые части CH для ТОР $\Phi \hat{C}_I$ и \hat{S}_I , представляющие собой произведение дисперсий ТОР Φ

$$\left\langle \left(\Delta \hat{C}_{I}\right)^{2}\right\rangle _{\alpha_{1},\alpha_{2}}\left\langle \left(\Delta \hat{S}_{I}\right)^{2}\right\rangle _{\alpha_{1},\alpha}$$

определяемые с использованием формул (17)–(20) и выражающиеся через скалярные произведения когерентных и фоковских состояний. Рис. 2. Зависимости *a*) левой части соотношений (1) и (2) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$L_{\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left\langle \left(\Delta\hat{C}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2} \left\langle \left(\Delta\hat{S}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}$$

б) правой части соотношения (1) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$R_{t,\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle\hat{C}_{I}\hat{S}_{I}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}-\left\langle\hat{C}_{I}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}\left\langle\hat{S}_{I}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}\right|^{2},$$

 в) правой части соотношения неопределенностей Гейзенберга (2) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$R_{H,\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \frac{1}{4} \left| \left\langle \left[\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right] \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2} \right|^{2},$$

для когерентных состояний полей $|\alpha_1\rangle$ и $|\alpha_2\rangle$, от средних значений числа фотонов n_2 и фазового угла φ_2 когерентного состояния $|\alpha_2\rangle$. Для фиксированных значений $n_{\alpha_1} = 1$ и $\varphi_{\alpha_1} = 0$ когерентного состояния $|\alpha_1\rangle$

Правые части CH, в свою очередь, находятся с помощью указанных скалярных произведений из формул (21), (22).

Скалярные произведения векторов состояний полей, необходимые для расчета левых и правых частей СН для случая когерентных состояний полей, могут быть записаны в виде

$$\langle m_j | \alpha_j \rangle = e^{-n_{\alpha_j}/2} \frac{n_{\alpha_j}^{m_j/2}}{\sqrt{m_j!}} e^{i m_j \varphi_{\alpha_j}},$$
 (37)
 $m_j = n_j, n_j + 1, n_j + 2, \quad j = 1, 2.$

Численные расчеты дисперсий, средних значений коммутаторов и ковариаций, определяющих левые и правые части ССН и СНГ, проводились нами путем подстановки значений скалярных произведений (37) в выражения (17)–(22).

Как показали расчеты, правые части ССН и СНГ для соотношений неопределенностей $\hat{C}_I - \hat{S}_I$ значительно различаются между собой. На рис. 2 показаны левые и правые части ССН и СНГ для ТОРФ в случае когерентных состояний полей, в зависимости от параметров состояния $|\alpha_2\rangle$ при фиксированном значении $\alpha_1 = 1$.

Как видно на рис. 2*a*, левая часть $L_{\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ СН достигает максимальных значений при малых числах фотонов когерентных состояний $n_1, n_2 \sim 1$ и монотонно убывает с их ростом. Как показано на рис. 26 и 2*b*, правые части $R_{t,n_{01},x_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ для ССН и $R_{H,n_{01},x_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ для СНГ значительно различаются между собой для любых значений параметров когерентных состояний α_1 и α_2 .

Сравнение левых и правых частей ССН и СНГ показывает, что левые части обоих СН в общем случае больше правых частей, т. е. когерентные состояния полей не являются для ТОРФ состояниями с наименьшей неопределенностью. Приближенное равенство левых и правых частей ССН имеет место только для определенных значений фазовых углов φ_{α_j} , j = 1, 2 и при больших значениях числа фотонов n_{α_i} , j = 1 и/или 2 (см. рис. $2a, \delta$).

Результаты расчетов СН для оператора суммы числа фотонов полей $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{C}_I , \hat{S}_I приведены на рис. 3. На рис. 3*a* показано, что левая часть $L_{\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right)$ принимает минимальное значение при малых значениях n_j , j = 1, 2 и возрастает с увеличением n_j , что связано с возрастанием дисперсии числа фотонов с ростом средних чисел фотонов когерентных состояний равных n_j . Так же как и в случае СН для \hat{C}_I и \hat{S}_I , различие между собой правых частей $R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right)$ и $R_{H,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right)$ велико.

Как отмечалось выше, операторы суммы числа фотонов ТОРФ полей коммутируют между собой,

$$\left[\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 \right), \hat{S}_I \right] = \left[\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 \right), \hat{C}_I \right] = 0,$$

вследствие чего правые части СНГ равны нулю:

$$R_{H,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right) = R_{H,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{C}_I\right) = 0.$$

В то же время правые части ТСН

$$R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right), \ R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{C}_I\right)$$

значительно отличаются от нуля для всех значений параметров когерентных состояний, как показано на рис. 36.

Отличие правой части ССН для операторов $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{C}_I или \hat{S}_I от левой части значительно, как и в случае ССН для \hat{C}_I и \hat{S}_I , и почти линейно растет с увеличением чисел фотонов когерентных состояний $n_{\alpha j}$ (см. рис. 3). Когерентные состояния не являются квантовыми состояниями полей с минимальной неопределенностью для ТОРФ \hat{C}_I или \hat{S}_I и оператора суммы чисел фотонов $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$.

Рассмотрим также случай, когда одно из полей находится в когерентном, а другое в фоковском квантовом состоянии. В таких условиях ССН и СНГ для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I совпадают. Правые части СН не зависят от фазы φ и значительно отличаются от нуля лишь при $n \sim 1$ и близки к нулю при $n \gg 1$.



Рис. 3. Зависимости a) левой части соотношений (1) и (2) для операторов суммы числа фотонов полей $\hat{n} \equiv \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и синуса разности фаз

$$L_{\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{n},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left\langle (\Delta \hat{n})^{2} \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2} \left\langle \left(\Delta \hat{S}_{I}\right)^{2} \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2},$$

б) правой части соотношения (1) для числа фотонов и синуса разности фаз

$$R_{t,\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{n},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle \hat{n}\;\hat{S}_{I}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2} - \left\langle \hat{n}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}\left\langle \hat{S}_{I}\right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}\right|^{2},$$

для когерентных состояний полей $|\alpha_1\rangle$ и $|\alpha_2\rangle$, от средних значений числа фотонов n_2 и фазового угла φ_2 когерентного состояния $|\alpha_2\rangle$. Для фиксированных значений $n_{\alpha_1} = 1$ и $\varphi_{\alpha_1} = 0$ когерентного состояния $|\alpha_1\rangle$

Правые части СН для операторов $\hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{C}_I, \hat{S}_I равны нулю для любых значений параметров состояний $|n_{01}\rangle, |\alpha_2\rangle$ (или $|\alpha_1\rangle, |n_{02}\rangle$). Это означает, что СН в случае таких квантовых состояний полей не накладывает никаких дополнительных ограничений на точность измерения полного (суммарного) числа фотонов и разности фаз полей.

6. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ДЛЯ ПОЛЕЙ В СОСТОЯНИЯХ СУПЕРПОЗИЦИИ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Рассмотрим теперь случай когда электромагнитные поля находятся в квантовых состояниях суперпозиций когерентных состояний [13–18]. Такие состояния полей $|\psi_{s,j}\rangle$, j = 1, 2 могут быть записаны в общем виде [18], следующим образом:

$$|\psi_{s,j}(\xi)\rangle = N_j \left(|\alpha_j\rangle + e^{i\xi} |\beta_j\rangle \right) =$$
$$= \sum_{n_j=0}^{\infty} Z_{n_j} |n_j\rangle, \quad j = 1, 2, \quad (38)$$

где

$$Z_{n_j} \equiv N_j \left(z_{n_j,\alpha_j} + e^{i\xi_j} z_{n_j,\beta_j} \right), \tag{39}$$

$$N_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \cos\theta_j e^{-\delta_j/2}\right)}},\tag{40}$$

$$\theta_j \equiv \xi_j + \sqrt{n_{\alpha_j} n_{\beta_j}} \sin \Delta_j, \qquad (41)$$

$$\Delta_j \equiv \varphi_{\beta_j} - \varphi_{\alpha_j},\tag{42}$$

$$\delta_j \equiv n_{\alpha_j} + n_{\beta_j} - 2\sqrt{n_{\alpha_j} n_{\beta_j}} \cos \Delta_j, \qquad (43)$$

$$\alpha_j = \sqrt{n_{\alpha_j}} e^{i \varphi_{\alpha_j}}, \quad \beta_j = \sqrt{n_{\beta_j}} e^{i \varphi_{\beta_j}}, \quad j = 1, 2,$$

и использованы обозначения

$$z_{n_j,\alpha_j} \equiv e^{-n_{\alpha_j}/2} \frac{\alpha_j^{n_j}}{\sqrt{n_j!}},$$

$$z_{n_j,\beta_j} \equiv e^{-n_{\beta_j}/2} \frac{\beta_j^{n_j}}{\sqrt{n_j!}}.$$
(44)

В случае если фазовые углы когерентных состояний, составляющих каждую из суперпозиций, равны между собой,

$$\varphi_{\alpha_j} = \varphi_{\beta_j}, \quad \Delta_j = 0, \quad j = 1, 2,$$

а числа фотонов когерентных состояний различаются, $n_{\alpha_j} \neq n_{\beta_j}$, состояния квантовых суперпозиций могут быть названы амплитудными суперпозициями когерентных состояний [18]. В другом важном частном случае, когда

$$\varphi_{\alpha_j} \neq \varphi_{\beta_j}, \quad \Delta_j \neq 0, \quad j = 1, 2,$$

И

$$n_{\alpha_j} = n_{\beta_j}$$

состояния суперпозиции могут быть названы состояниями фазовых суперпозиций двух когерентных состояний [18]. Фазовые состояния суперпозиции, имеющие значения параметров

$$\varphi_{\alpha_j} = \varphi_{\beta_j} + \pi, \quad j = 1, 2,$$

представляют собой известные и хорошо изученные квантовые состояния «шредингеровского кота» [13–21]. В случае

$$\xi_j = 0, \quad n_{\alpha_j} = n_{\beta_j}, \quad \varphi_{\alpha_j} = \varphi_{\beta_j} + \pi$$

состояния полей представляют собой четные состояния суперпозиций когерентных состояний, а в случае $\xi_i = \pi$ — нечетные состояния суперпозиций [20].

Квантовые состояния суперпозиций когерентных состояний поля обладают ярко выраженными неклассическими свойствами. Так, фазовые суперпозиции (включая состояния типа «шредингеровского кота») могут иметь флуктуации числа фотонов значительно ниже величины флуктуаций числа фотонов когерентного состояния поля (уровня дробового шума) [19–21].

Отметим, что в случае субпуассоновской статистики фотонов с дисперсией (флуктуациями) числа фотонов ниже пуассоновского уровня, присущего когерентному состоянию поля, нарушается неравенство Коши–Шварца для автокорреляционной функции интенсивности света [22,23].

Амплитудные суперпозиции когерентных состояний могут обладать малыми флуктуациями фазы поля существенно ниже уровня флуктуаций, присущих когерентным состояниям [21].

Соотношения неопределенностей для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I могут быть найдены из полученных выше выражений (17)–(22) для состояний полей общей суперпозиции когерентных состояний (38) путем подстановки в эти выражения значений скалярных произведений фоковских состояний и состояний суперпозиции:

$$\langle m_j | \varphi_{s,j} \rangle = Z_{m,j}, \quad m_j = n_j, n_j + 1, n_j + 2,$$

 $j = 1, 2.$ (45)

где $Z_{m,j}$ определяются формулами (39)–(44).

На рис. 4*a* изображен пример зависимости левой части ССН и СНГ от параметров состояний суперпозиций для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I . Левая часть ССН в случае состояний полей суперпозиции когерентных состояний L_{s_1,s_2} (\hat{C}_I, \hat{S}_I) качественно отличается от левой части ССН для когерентных состояний L_{α_1,α_2} (\hat{C}_I, \hat{S}_I) . На рис. 2*a* видно, что эта величина не зависит от значений фазовых углов когерентных состояний и монотонно убывает с ростом числа фотонов n_{α_2} , тогда как L_{s_1,s_2} (\hat{C}_I, \hat{S}_I) обладает



сильной зависимостью от φ_{α_2} и не убывает, а даже возрастает с увеличением n_{α_2} в широком интервале изменения значений φ_{α_2} . Указанные закономерности выполняются для любых значений параметров рассмотренных состояний полей.

На рис. 46 показан пример зависимости правой части ССН от параметров состояний суперпозиций для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I . Правая часть ТСН $R_{t,s_1,s_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ также качественно отличается от Рис. 4. Зависимости *a*) левой части соотношений (1) и (2) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$L_{s1,s2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left\langle \left(\Delta\hat{C}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{s1,s2} \left\langle \left(\Delta\hat{S}_{I}\right)^{2}\right\rangle_{s1,s2},$$

 б) правой части соотношения (1) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$R_{t,s1,s2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle\hat{C}_{I}\hat{S}_{I}\right\rangle_{s1,s2} - \left\langle\hat{C}_{I}\right\rangle_{s1,s2}\left\langle\hat{S}_{I}\right\rangle_{s1,s2}\right|^{2},$$

 в) правой части соотношения неопределенностей Гейзенберга (2) для операторов косинуса и синуса разности фаз

$$R_{H,\alpha 1,\alpha 2}\left(\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right) \equiv \frac{1}{4} \left| \left\langle \left[\hat{C}_{I},\hat{S}_{I}\right] \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2} \right|^{2},$$

для состояний суперпозиций когерентных состояний полей $|\psi_{s,j}(\xi)\rangle = N_j \left(|\alpha_j\rangle + e^{i\xi}|\beta_j\rangle\right), \ j=1,2,$ от средних значений числа фотонов n_2 и фазового угла φ_2 когерентного состояния $|\alpha_2\rangle$. Для фиксированных значений остальных параметров состояния суперпозиций $|\psi_{s,j}(\xi_j)\rangle, \ j=1,2,$ $n_{\alpha_1}=1, \ n_{\beta_1}=2, \ n_{\beta_2}=4$ и $\varphi_{\alpha_1}=\varphi_{\beta_1}=\varphi_{\beta_2}=0,$ $\xi_1=\xi_2=0$

правой части для когерентных состояний полей $R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$. Неравенство ССН (неравенство Коши–Шварца) выполняется для всех значений параметров квантовых состояний полей.

На рис. 46 показана зависимость правой части СНГ от параметров состояний суперпозиций для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I . Как и в случае когерентных состояний, правые части ССН и СНГ качественно различны. Правые части СНГ для состояний суперпозиции $R_{H,s_1,s_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ обладают зависимостью от параметров квантовых состояний, подобной зависимости $R_{H,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{C}_I,\hat{S}_I\right)$ для полей в когерентных состояниях (см. рис. 2 ϵ), но они значительно различаются по абсолютной величине. При этом правые части ССН и СНГ качественно различны как в случае суперпозиций когерентных состояний, так и в случае когерентных состояний полей.

На рис. 5*а* изображен пример зависимости левой части ССН и СНГ от параметров состояний суперпозиций для оператора $\hat{n} \equiv \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{S}_I . Левые части СН L_{s_1,s_2} (\hat{n}, \hat{S}_I) и L_{α_1,α_2} (\hat{n}, \hat{S}_I) возрастают с увеличением числа фотонов, но, в отличие от L_{α_1,α_2} (\hat{n}, \hat{S}_I) и L_{s_1,s_2} (\hat{n}, \hat{S}_I) , обладают сложной зависимостью от фазового угла когерентного состояния φ_{α_2} .



Рис. 5. Зависимости a) левой части соотношений (1) и (2) для операторов суммы числа фотонов полей $\hat{n} \equiv \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и синуса разности фаз

$$L_{s1,s2}\left(\hat{n},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left\langle (\Delta\hat{n})^{2} \right\rangle_{s1,s2} \left\langle \left(\Delta\hat{S}_{I}\right)^{2} \right\rangle_{s1,s2}$$

 б) правой части соотношения (1) для операторов числа фотонов и синуса разности фаз

$$R_{t,s1,s2}\left(\hat{n},\hat{S}_{I}\right) \equiv \left|\left\langle \hat{n}\;\hat{S}_{I}\right\rangle_{s1,s2} - \left\langle \hat{n}\right\rangle_{s1,s2}\left\langle \hat{S}_{I}\right\rangle_{s1,s2}\right|^{2},$$

для состояний суперпозиций когерентных состояний полей $|\psi_{s,j}(\xi)\rangle = N_j \left(|\alpha_j\rangle + e^{i\xi}|\beta_j\rangle\right), \quad j=1,2,$ от средних значений числа фотонов n_2 и фазового угла φ_2 когерентного состояния $|\alpha_2\rangle$. Для фиксированных значений остальных параметров состояния суперпозиций $|\psi_{s,j}(\xi_j)\rangle, j=1,2,$ $n_{\alpha_1} = 1, n_{\beta_1} = 2, n_{\beta_2} = 4$ и $\varphi_{\alpha_1} = \varphi_{\beta_1} = \varphi_{\beta_2} = 0,$ $\xi_1 = \xi_2 = 0$

На рис. 5б показана зависимость правой части ССН от параметров состояний суперпозиций для $\hat{n} \equiv \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ и ТОРФ \hat{S}_I . Правые части ССН $R_{t,s_1,s_2}\left(\hat{n}, \hat{S}_I\right)$ и $R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n}, \hat{S}_I\right)$ характеризуются резко различающимися между собой зависимостями от числа фотонов. В случае когерентных состояний полей $R_{t,\alpha_1,\alpha_2}\left(\hat{n},\,\hat{S}_I\right)$ велика для малых чисел фотонов $(n_{\alpha_2} \sim 1)$ и с ростом числа фотонов убывает (см. рис. 36), тогда как $R_{t,s_1,s_2}\left(\hat{n},\,\hat{S}_I\right)$ резко возрастает при больших числах фотонов $n_{\alpha_2} \gg 1$.

Правые части СНГ

$$R_{H,s_1,s_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{S}_I\right) = R_{H,s_1,s_2}\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2, \hat{C}_I\right) = 0,$$

так как оператор суммы числа фотонов коммутирует с ТОРФ.

Отметим, что состояния суперпозиции не являются квантовыми состояниями полей с минимальной неопределенностью для данных операторов, так как левая часть ССН больше правой для всех значений параметров состояний.

В частном случае состояний фазовых суперпозиций двух полей (состояний «шредингеровского кота», четных и нечетных) ССН и СНГ для суммы чисел фотонов и ТОРФ совпадают, тогда как для амплитудных суперпозиций правые части ССН и СНГ значительно различаются. ССН и СНГ для ТОРФ \hat{C}_I и \hat{S}_I полей в состояниях «шредингеровского кота» также качественно различаются.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе продолжены теоретические исследования квантовомеханических свойств тригонометрических операторов разности фаз двух электромагнитных полей, предложенных нами в работе [10].

Получены и исследованы соотношения неопределенностей для операторов синуса и косинуса разности фаз, а также соотношения неопределенностей для оператора суммы чисел фотонов двух полей и операторов синуса и косинуса разности фаз полей. Найдены и проанализированы строгие соотношения неопределенностей (неравенства Коши – Шварца для указанных пар операторов), а также соответствующие соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Рассмотрены случаи, когда поля находятся в квантовых когерентных состояниях, наиболее близких по своим свойствам к классическим электромагнитным полям. Исследованы случаи, когда оба поля (или одно из них) находятся в квантовых фоковских состояниях. Рассмотрены состояния квантовых суперпозиций когерентных состояний, проявляющие ярко выраженные неклассические свойства. Расчеты, проведенные нами, показали, что как строгие соотношения неопределенностей, так и соотношения Гейзенберга выполняются для предлагаемых операторов разности фаз полей для всех значений параметров рассмотренных квантовых состояний.

В работе показано, что точные соотношения неопределенностей для предлагаемых операторов разности фаз полей качественно отличаются от соответствующих соотношений неопределенностей Гейзенберга для когерентных состояний полей, а также для состояний квантовых суперпозиций когерентных состояний, и совпадают для фоковских состояний при всех значениях параметров состояний.

Найдены значения параметров квантовых состояний электромагнитных полей, для которых точные рассматриваемые тригонометрические операторы разности фаз соответствуют наблюдаемым с минимальной квантовой неопределенностью. Исследования проведены для слабых электромагнитных полей с малым числом фотонов (~ 1), используемых в области квантовых технологий.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. L. Susskind and J. Glogower, Physics 1, 49 (1964).
- P. Carruthers and M. M. Nieto, Phys. Rev. Lett. 14, 387 (1965).
- P. Carruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. 40, 411 (1968).
- 4. E. C. Lerner, Nuovo Cim. B 56, 183 (1968).
- 5. R. Lynch, J. Opt. Soc. Amer. B 3, 1006 (1986).
- 6. R. Lynch, J. Opt. Soc. Amer. B 4, 1723 (1987).
- J. W. Noh, A. Fougeres, and L. Mandel, Phys. Rev. A 45, 424 (1992).
- J. W. Noh, A. Fougeres, and L. Mandel, Phys. Rev. A 46, 2840 (1992).

- P. Riegler and K. Wodkiewicz, Phys. Rev. A 49, 1387 (1994).
- 10. А. В. Козловский, ЖЭТФ 159, 244 (2021).
- E. Schrödinger, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-Mathematische Klasse 14, 296 (1930).
- 12. А. В. Козловский, Опт. и спектр. 120, 626 (2016);
 128, 368 (2020).
- E. Schrödinger, Naturwissenschaften 23, 664 (1935);
 23, 823 (1935); 23, 844 (1935) [Eng. transl. by J. D. Trimmer, Proc. Amer. Philos. Soc. 124, 323 (1980)].
- 14. B. Yurke and D. Stoler, Phys. Rev. Lett. 57, 13 (1986).
- 15. B. Yurke and D. Stoler, Phys. Rev. A 35, 4846 (1987).
- G. J. Milburn and C. A. Holmes, Phys. Rev. Lett. 56, 2237 (1986).
- 17. D. F. Walls and G. J. Milburn, Phys. Rev. A 31, 2403 (1985).
- A. V. Kozlovskii, J. Mod. Opt. 63, 2356 (2016); 66, 463 (2019).
- W. Schleich, M. Pernigo, and Fam Le Kien, Phys. Rev. A 44, 2172 (1991).
- 20. V. Buzek, A. Vidiella-Barranco, and P. L. Knight, Phys. Rev. A 45, 6570 (1992).
- V. Buzek, A. D. Wilson-Gordon, P. L. Knight, and W. K. Lai, Phys. Rev. A 45, 8079 (1992).
- 22. D. V. Strekalov and G. Leuchs, in Quantum Photonics: Pioneering Advances and Emerging Applications, ed. by R. Boyd, S. Lukishova, and V. Zadkov, Springer Series in Optical Sciences, Vol. 217, p. 51 (2019).
- **23.** R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Oxford Univ. Press (2000).

СХЕМЫ И ПАРАМЕТРЫ РЕЗОНАНСНОГО ДВУХФОТОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ 2 u_3 МОЛЕКУЛ UF₆ БИХРОМАТИЧЕСКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИК-ИЗЛУЧЕНИЕМ

Г. Н. Макаров*

Институт спектроскопии Российской академии наук 108840, Троицк, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 17 июня 2021 г., после переработки 17 июня 2021 г. Принята к публикации 6 августа 2021 г.

На основе спектроскопических данных об обертонных состояниях колебания ν_3 молекул UF_6 и о частотах генерации CF_4 - и пара-H_2-лазеров, генерирующих в области 16 мкм, выполнен анализ и рассмотрена возможность резонансного двухфотонного изотопно-селективного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул UF_6 бихроматическим ИК-излучением этих лазеров. Предложены схемы и приведены параметры возбуждения молекул $^{238}UF_6$ и $^{235}UF_6$ в состояния $2\nu_3$ двумя лазерами, частоты излучений которых отстроены на $3.5\text{--}13~\mathrm{cm^{-1}}$ от Q-ветвей спектров линейного поглощения колебания ν_3 молекул UF_6 в газодинамически охлажденном молекулярном потоке. В то же время сумма частот первого и второго лазеров ($\nu_{L1}+\nu_{L2}$) равна частоте колебательного перехода $0\nu_3 \rightarrow 2\nu_3$ молекул UF_6 . При одновременном воздействии на молекулы обоими лазерными импульсами реализуется возможность селективного возбуждения молекул UF_6 из основного колебательного состояния $0\nu_3$ в возбужденные состояния $2\nu_3$. Изотопно-селективное возбуждение обертонных колебательных состояний $2\nu_3$ молекул UF_6 и $^{235}UF_6$ предложены состояния $2\nu_3$ молекул UF_6 . При одновременном воздействии на молекулы обоими лазерными импульсами реализуется возможность селективного возбуждения молекул UF_6 из основного колебательного состояния $0\nu_3$ в возбужденные состояния $2\nu_3$. Изотопно-селективное возбуждение обертонных колебательных состояний $2\nu_3$ молекул $^{238}UF_6$ и $^{235}UF_6$ предложенным способом может составить основу для процесса лазерного разделения изотопов урана с использованием низкоэнергетических методов.

DOI: 10.31857/S0044451021120038

1. ВВЕДЕНИЕ

Большинство существовавших в конце прошлого века проектов по лазерному разделению изотопов урана по ряду причин было закрыто [1,2]. Во многих случаях это объяснялось экономическими факторами. Считалось, что на том этапе развития лазерной технологии создание модулей промышленного типа для лазерного разделения изотопов урана нерентабельно [3]. В то же время в ряде проектов было показано [2, 4–7], что экономическая эффективность лазерных методов обогащения урана сопоставима с таковой наиболее продвинутых центрифужных методов. Основная причина закрытия проектов по лазерному разделению изотопов урана — политико-экономическая. Она была результатом заключенного в 1993 году между Россией и США межправительственного соглашения ВОУ–НОУ (высокообогащенный уран–низкообогащенный уран) (Программа «Meratonhub в мегаватты» — Megatons to Megawatts Program) [8, 9]. Это соглашение действовало 20 лет (до 2013 года). Согласно ему США покупали у России низкообогащенный уран, вырабатываемый из оружейного урана, для своих атомных электростанций. Последствием этого в США стало замедление развития технологий по разделению изотопов урана. Вместе с тем во многих странах (в США, Австралии, Японии, Южной Корее, Индии, Иране, ЮАР) исследования по лазерному разделению изотопов урана проводятся и сегодня [1,2,10–15].

В настоящее время эти исследования направлены в основном на разработку низкоэнергетических методов молекулярного лазерного разделения изотопов (МЛРИ) урана [1,2,16–22]. Проводится также исследование альтернативных методов [1,2,23–26]. Среди низкоэнергетических методов МЛРИ наиболее перспективными считаются [1, 2, 16–22] метод

 $^{^{\}ast}$ E-mail: gmakarov@isan.troitsk.ru

изотопно-селективного подавления кластеризации молекул и метод изотопно-селективной диссоциации небольших слабосвязанных ван-дер-ваальсовых кластеров (в частности, димеров). Вероятно, именно эти методы положены в основу разрабатываемой сегодня в США и Австралии лазерной технологии обогащения урана SILEX (separation of isotopes by laser exitation) [27–30] (см. также обзоры [1,2,22]).

В ранних исследованиях МЛРИ урана методом селективной инфракрасной многофотонной ИК-диссоциации молекул UF₆ использовались генерирующий в области 16 мкм оптически-накачиваемый излучением мощного CO₂-лазера молекулярный CF₄-лазер [31, 32] и основанный на смещении частоты CO₂-лазера в область 16 мкм за счет стимулированного комбинационного (рамановского) рассеяния в параводороде пара-H₂-лазер [33].

СҒ₄-лазер излучает в области частот 612–650 см $^{-1}~[34–37]$ и имеет более ста линий генерации [34, 35]. В основе работы пара-Н₂-лазера лежит процесс вынужденного комбинационного рассеяния излучения мощного СО₂-лазера на вращательных переходах молекулярного водорода. При таком неупругом рассеянии частота излучения СО2-лазера уменьшается на величину вращательного кванта молекулы H_2 (около 354.33 см⁻¹) и попадает в 16-мкм диапазон [33]. Перестройка частоты излучения СО₂-лазера автоматически ведет к перестройке частоты излучения пара-Н₂-лазера.

Существенными недостатками как CF₄-лазера, так и пара-Н2-лазера применительно к разделению изотопов урана являются дискретность перестройки частоты излучения указанных лазеров и отсутствие сильных и перестраиваемых линий генерации в области Q-ветви колебания ν_3 молекул $^{235}\mathrm{UF}_6$ (в области 628.32 см⁻¹ [38, 39]). Поэтому с помощью СF₄-лазера не удалось реализовать изотопно-селективную диссоциацию молекул UF₆, хотя в целом ряде работ он использовался в экспериментах по двухчастотному возбуждению и диссоциации UF₆ [2, 40]. Разделение изотопов урана со сравнительно высокой селективностью процесса ($\alpha \geq 4$) было осуществлено в работах [41, 42] методом многофотонной ИК-диссоциации молекул UF₆ с использованием пара-Н₂-лазеров.

В качестве другого подхода к МЛРИ урана рассматривается метод изотопно-селективного возбуждения состояния $3\nu_3$ молекул 235 UF₆ [43, 44], в котором изотопический сдвиг составляет около 1.81 см⁻¹ [38,39], излучением СО-лазера [15,45–48]. В этом подходе используется химическая реакция колебательно-возбужденных молекул UF₆ с молекулами HCl [15, 45, 46]. Разделение изотопов урана происходит за счет различия в скоростях реакции колебательно-возбужденных и невозбужденных молекул UF₆ с молекулами HCl. В работе [46] этим методом осуществлено разделение изотопов урана с селективностью $\alpha = 1.2$. Для этого подхода создаются мощные СО-лазеры [47, 48], генерирующие в области 5.3 мкм, которые планируется использовать для возбуждения молекул ²³⁵UF₆. Однако следует отметить, что эффективное возбуждение состояний 3_{ν3} молекул UF₆ ИК-излучением с длиной волны 5.33 мкм проблематично из-за слабого поглощения молекул UF₆ на колебательном переходе $0\nu_3 \rightarrow 3\nu_3$. Интегральное поглощение обертонной полосы $0\nu_3 \rightarrow 3\nu_3$ молекул UF₆ ($\Gamma_{0\rightarrow 3}$ = $= 3.8 \cdot 10^{-2}$ км/моль) более чем на четыре порядка (примерно в $1.8 \cdot 10^4$ раз) меньше интегрального поглощения основной полосы $0\nu_3 \rightarrow 1\nu_3$ UF₆ ($\Gamma_{0\rightarrow 1} \approx$ $\approx 6.7 \cdot 10^2$ км/моль) [43].

Поэтому поиск альтернативных схем изотопно-селективного возбуждения высоких колебательных состояний молекул ²³⁵UF₆ представляется важным и актуальным. Возбуждение молекул UF₆ в высокие колебательные состояния можно использовать для разделения изотопов урана с применением низкоэнергетических методов, в основе которых лежат процессы с энергией активации не более 0.1-0.2 эВ [1, 2, 22]. Такие энергии активации характерны для процессов адсорбции и десорбции молекул на поверхности, в том числе на поверхности кластеров, а также для процессов диссоциации и фрагментации слабосвязанных ван-дер-ваальсовых молекул (например, энергия диссоциации UF₆–Ar ≤ 0.1 эВ [1, 2, 22]). В работе [49] рассмотрена возможность резонансного трехфотонного возбуждения колебательных состояний 3_{ν3} молекул UF₆ бихроматическим излучением двух импульсных ИК-лазеров. В плане применения низкоэнергетических методов большой интерес представляет также возможность резонансного изотопно-селективного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул UF₆, поскольку двухфотонное возбуждение высоких колебательных состояний молекул более эффективно по сравнению с трехфотонным возбуждением [50].

В настоящей работе приведены результаты подробного рассмотрения и анализа метода резонансного двухфотонного изотопно-селективного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ с помощью двух CF₄-лазеров, а также двух пара-H₂-лазеров. Предложены конкретные схемы и приведены параметры возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул UF₆.

2. ОСНОВЫ МЕТОДА РЕЗОНАНСНОГО ДВУХФОТОННОГО БИХРОМАТИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ 2 ν_3 МОЛЕКУЛ UF₆

Многофотонное возбуждение высоких колебательных состояний молекул можно реализовать при когерентном воздействии нескольких полей, сумма частот которых удовлетворяет условию многофотонного резонанса [50]. Для резонансного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул UF₆ излучением двух импульсных ИК-лазеров необходимо, чтобы выполнялось следующее соотношение между частотами ν_{1L} и ν_{2L} излучения используемых лазеров и частотой колебания ν_3 возбуждаемого состояния молекулы UF₆:

$$\nu_{1L} + \nu_{2L} = 2\nu_3. \tag{1}$$

Эффективное возбуждение высоких колебательных состояний молекул за счет многофотонных процессов с использованием двух и трех СО₂-лазеров, генерирующих на разных частотах, было реализовано ранее в работах соответственно [51] и [52] на примере SF₆. В работе [51] возбуждалось состояние $2\nu_3 A1$ ($\nu \approx 1889.0$ см⁻¹ [53]) молекул SF₆ в импульсной газодинамической струе при одновременном воздействии на молекулы двух симметрично отстроенных от резонанса с переходом $0\nu_3 \rightarrow 1\nu_3$ SF₆ импульсов CO₂-лазера. Показано [51], что таким способом через состояние $2\nu_3$ A1 можно возбудить из основного состояния около 30 % молекул SF₆. В работе [52] было реализовано резонансное возбуждение состояния $3\nu_3$ F1 ($\nu \approx 2827.55$ см⁻¹ [53]) молекул SF₆, охлажденных в импульсной газодинамической струе, импульсами излучения трех дискретно перестраиваемых по частоте СО₂-лазеров. Установлено [52], что при совпадении во времени всех трех лазерных импульсов происходит эффективное возбуждение молекул SF₆ через колебательное состояние $3\nu_3 F1$. При этом молекулы возбуждались также в более высокие колебательные состояния.

3. СХЕМЫ И ПАРАМЕТРЫ РЕЗОНАНСНОГО ИЗОТОПНО-СЕЛЕКТИВНОГО ДВУХФОТОННОГО БИХРОМАТИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ СОСТОЯНИЙ 2ν₃ МОЛЕКУЛ UF₆

В ходе выполнения проектов по МЛРИ урана была получена обширная и ценная спектроскопическая информация как о самой молекуле UF₆, так и



Рис. 1. Схема резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения молекул $^{238} {\rm UF}_6$ в состояние $2\nu_3 \, E$ ($\nu \approx 1252.84 \ {\rm сm}^{-1}$) излучением двух ${\rm CF}_4$ -лазеров. Справа приведены линии ${\rm CO}_2$ -лазера и частоты генерации ${\rm CF}_4$ -лазера. Колебательные уровни моды ν_3 молекул $^{238} {\rm UF}_6$ взяты из работы [44]

о лазерах, используемых для возбуждения и диссоциации молекул UF₆ [34-38, 44, 54, 55] (см. также обзор [2] и приведенные там ссылки). Полученные результаты дают возможность предсказывать схемы резонансного многофотонного возбуждения высоких колебательных состояний молекул UF₆ излучением нескольких ИК-лазеров. В настоящей работе на основе анализа данных об уровнях энергии моды ν_3 молекул ²³⁸UF₆ [44] и о частотах излучения CF₄-лазера [34, 35] и пара-Н₂-лазера [33] нами предлагаются схемы и приводятся параметры изотопно-селективного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний 2 ν_3 молекул ²³⁸UF₆ и ²³⁵UF₆ излучением двух CF₄-лазеров, а также двух пара-Н₂-лазеров. При выборе схем для возбуждения молекул UF₆ и анализе данных о частотах лазеров нами учитывались величины изотопического сдвига в ИК-спектрах поглощения колебания ν_3 молекул UF₆: $\Delta_{is} \approx 0.604$ см⁻¹ [38,39] в состояни
и $1\nu_3$ для молекул $^{238}{\rm UF}_6$ и $^{235}{\rm UF}_6$ и $\Delta_{is} \approx 1.21 \text{ см}^{-1}$ в состоянии $2\nu_3$ молекул UF₆. При выборе оптимальных частот для возбуждения молекул нами рассматривались только наиболее интенсивные линии генерации как CF₄-лазеров [34, 35], так и СО₂-лазеров, которые применяются для накачки пара-H₂-лазеров. В предложенных схемах возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул UF₆ нет необходимости в дополнительной подстройке частоты лазеров для резонансного возбуждения молекул, поскольку отстройки суммарных частот излучений лазеров от частот возбуждаемых состояний незначительны (см. рис. 1 и табл. 1, 2).



Рис. 2. Частоты линий излучения двух CF_4 -лазеров (сплошные стрелки) и двух пара- H_2 -лазеров (штриховые стрелки), используемых для резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения молекул ²³⁸ UF₆ в состояние $2\nu_3 E$ ($\nu \approx 1252.84$ см⁻¹) (табл. 1, строка 1) и молекул ²³⁵ UF₆ в состояние $2\nu_3 E$ ($\nu \approx 1254.05$ см⁻¹) (табл. 2, строка 4), а также Q-ветвей колебания ν_3 молекул ²³⁸ UF₆ в газодинамически охлажденном молекулярном потоке при $T \leq 50$ К (Q-ветви показаны качественно [54])

С использованием двух ИК-лазеров можно осуществить эффективное изотопно-селективное возбуждение колебательных состояний 2 ν_3 молекул UF₆ ($\nu \approx 1253 \text{ см}^{-1}$ [44]). На рис. 1 представлена схема возбуждения колебательного состояния $2\nu_3 E$ молекул $^{238}\text{UF}_6~(\nu \approx 1252.84 \text{ см}^{-1}~[44])$ излучением двух CF₄-лазеров, работающих на частотах соответственно $\nu_{L1} \approx 612.2 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_{L2} \approx 640.9 \text{ см}^{-1}$. Двухфотонное бихроматическое возбуждение указанного уровня $2\nu_3 E$ реализуется с отстройкой в конечном состоянии $\Delta \nu_{fin} \approx -0.26 \text{ см}^{-1} (\nu_{L1} + \nu_{L2} =$ $= 1253.1 \text{ см}^{-1}$). На рис. 2 для данного примера приведены (сплошными стрелками) частоты линий генерации CF₄-лазеров и *Q*-ветви колебания ν_3 молекул ²³⁸UF₆ и ²³⁵UF₆ в газодинамически охлажденном молекулярном потоке. Ширины Р- и R-ветвей (не приведены на рис. 2) спектра ИК-поглощения колебания ν_3 молекул UF₆ при $T \leq 50$ K составляют величину не более 2 см^{-1} [38].

В табл. 1 приведены параметры предложенных нами возможных схем резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул ²³⁸UF₆ и ²³⁵UF₆ ИК-излучением двух CF₄-лазеров. Уровни энергии состояний $2\nu_3$ ²³⁵UF₆ определялись нами путем смещения уровней $2\nu_3$ ²³⁸UF₆ в высокочастотную сторону на величину изотопического сдвига для указанных молекул в состоянии $2\nu_3$, т. е. примерно на 1.21 см⁻¹.

В табл. 2 приведены параметры возможных схем резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ ИК-излучением двух

пара-H₂-лазеров. Частоты линий генерации пара-H₂-лазеров для возбуждения состояния $2\nu_3 E^{235}$ UF₆ ($\nu \approx 1254.05 \text{ см}^{-1}$) (см. табл. 2, строка 4) отмечены на рис. 2 штриховыми стрелками. Как видно из табл. 1 и 2, при применении обоих типов лазеров можно осуществить резонансное возбуждение состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ с небольшой частотной отстройкой в конечном состоянии, что способствует достижению высокой селективности процесса возбуждения молекул UF₆.

Отметим, что для некоторых схем возбуждения состояний $2\nu_3$ UF₆ реализуется возможность резонансного заселения теми же лазерными импульсами состояний 4_{ν3} UF₆. Так, в схеме, показанной в табл. 1, строка 1, реализуется резонансное возбуждение молекул ²³⁸UF₆ в состояние $4\nu_3 E$ ($\nu \approx$ $\approx 2506.60 \text{ см}^{-1}$) с частотной отстройкой в конечном состоянии +0.4 см⁻¹. В случае схемы, показанной в табл. 1, строка 5, реализуется возможность возбуждения молекул ²³⁵UF₆ в состояние $4\nu_3~A1~(\nu~pprox~2509.29~{
m cm}^{-1})$ и в состояние $4\nu_3 E$ $(\nu~\approx~2509.02~{\rm cm}^{-1})$ с частотными отстройками в конечном состоянии соответственно +0.09 см⁻¹ и -0.18 см⁻¹. Реализация такой возможности является положительным фактором, поскольку при этом происходит [56] значительно более эффективное возбуждение молекул в высокие колебательные состояния.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПРЕДЛОЖЕННЫХ СХЕМ ИЗОТОПНО-СЕЛЕКТИВНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ВЫСОКИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ UF₆

Отметим, что для оптимального изотопно-селективного заселения состояний $2\nu_3$ молекул ²³⁸UF₆ необходимо обеспечить либо как можно более точный резонанс при возбуждении, либо возбуждение с небольшой положительной отстройкой суммарной частоты генерации лазеров от частоты возбуждаемого состояния ($\Delta \nu_{fin} = 2\nu_3 - (\nu_{L1} + \nu_{L2}) > 0$); а для оптимального изотопно-селективного возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул ²³⁵UF₆ — либо как можно более точный резонанс при возбуждении, либо возбуждение с небольшой отрицательной отстройкой суммарной частоты лазеров от частоты возбуждаемого состояния ($\Delta \nu_{fin} < 0$). Это связано с тем, что даже в случае глубокого охлаждения UF₆ в газодинамических потоках сравнительно большая доля

Моле- кула	Возбуждаемое состояние и его частота, см ⁻¹	Частота СF ₄ -лазера-1 ν_{L1} , см ⁻¹	Линия и частота, см ⁻¹ СО ₂ -лазера-1 накачки	Частота СF ₄ -лазера-2 ν_{L2} , см ⁻¹	Линия и частота, см ⁻¹ СО ₂ -лазера-2 накачки	Частотная отстройка в конечном состоянии, $\Delta \nu_{fin} = 2\nu_3 - (\nu_{L1} + \nu_{L2}),$ см ⁻¹
	$2\nu_3 E (1252.84)$	612.2	9R(14), 1074.65	640.9	9R(16), 1075.99	-0.26
²³⁸ UF ₆	$2\nu_3 A1 (1253.09)$	612.2	9R(14), 1074.65	640.9	9R(16), 1075.99	-0.01
	$2\nu_3 F2 (1255.66)$	612.2	9R(14), 1074.65	643.1	9R(20), 1078.59	+0.36
²³⁵ UF ₆	$2\nu_3 E (1254.05)$	612.2	9R(14), 1074.65	641.9	9R(18), 1077.30	-0.05
	$2\nu_3 A1 (1254.30)$	612.2	9R(14), 1074.65	642.4	9P(4), 1060.57	-0.30
	$2\nu_3 F2 (1256.87)$	615.1	9R(12), 1073.28	641.9	9R(18), 1077.30	-0.13

Таблица 1. Параметры возможных схем резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ ИК-излучением двух CF₄-лазеров

молекул находится [2,54] на низколежащих колебательных уровнях [38]:

 $u_6(\nu \approx 143 \text{ cm}^{-1}), \quad \nu_4(\nu \approx 187.5 \text{ cm}^{-1}),$ $u_5(\nu \approx 201 \text{ cm}^{-1}), \quad 2\nu_6(\nu \approx 286 \text{ cm}^{-1}).$

Так, например, при уже довольно низкой температуре ($T \approx 70 \text{ K}$) населенность основного колебательного состояния UF_6 составляет не более 75%, в то время как остальные молекулы распределены между низколежащими колебательными уровнями. И лишь при температуре $T \leq 50$ К населенность основного колебательного состояния составляет не менее 92 % [2,54]. Частоты переходов молекул с низколежащих колебательных уровней незначительно смещены из-за межмодового ангармонизма в красную область относительно полосы поглощения молекул из основного колебательного состояния [57]. Поэтому для UF₆ при сравнительно высоких температурах наряду с резонансным возбуждением молекул из основного состояния возможно на тех же лазерных частотах возбуждение молекул из заселенных низколежащих колебательных состояний, что может привести к заметному уменьшению изотопической селективности процесса возбуждения верхних уровней.

При применении методов МЛРИ урана обычно проводится изотопно-селективная диссоциация или возбуждение (в случае низкоэнергетических методов) молекул ²³⁵UF₆. Мы рассмотрели схемы и параметры изотопно-селективного двухфотонного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ как для молекул ²³⁵UF₆, так и для молекул ²³⁸UF₆. Данные для молекул ²³⁸UF₆ полезны на стадии исследования эффективности и селективности предложенных схем возбуждения и диссоциации молекул UF₆.

Реализация в предложенных схемах резонансного многофотонного заселения состояний $4\nu_3$ молекул UF₆ теми же лазерными импульсами, которые используются для изотопно-селективного возбуждения состояний $2\nu_3$ UF₆, способствует увеличению эффективности и селективности процесса возбуждения молекул. Это было экспериментально продемонстрировано в работе [56] на примере исследования резонансных переходов при многофотонном возбуждении молекул SF₆.

Таблица 2. Параметры возможных схем резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ ИК-излучением двух пара-H₂-лазеров. При стимулированном комбинационном рассеянии на вращательных уровнях параводорода частота генерации CO₂-лазера уменьшается на 354.33 см^{-1} [33]

Моле- кула	Возбуждаемое состояние и его частота, см ⁻¹	Частота пара-H ₂ -лазера-1 $ u_{L1}, \ \mathrm{CM}^{-1}$	Линия и частота, см ⁻¹ CO ₂ -лазера-1 накачки	Частота пара-H ₂ -лазера-2 $ u_{L1}, \ \mathrm{CM}^{-1}$	Линия и частота, см ⁻¹ СО ₂ -лазера-2 накачки	Частотная отстройка в конечном состоянии, $\Delta \nu_{fin} = 2\nu_3 - (\nu_{L1} + \nu_{L2}),$ см ⁻¹
²³⁸ UF ₆	$2\nu_3 E (1252.84)$	621.63	10R(20), 975.93	631.19	10R(36), 985.49	+0.02
	$2\nu_3 A1 (1253.09)$	622.91	10R(22), 977.21	630.08	10R(34), 984.38	+0.10
	$2\nu_3 F2 \ (1255.66)$	620.32	10R(18), 974.62	635.35	10R(44), 989.65	-0.01
²³⁵ UF ₆	$2\nu_3 E (1254.05)$	621.63	10R(20), 975.93	632.27	10R(38), 986.57	+0.15
	$2\nu_3 E (1254.05)$	622.91	10R(22), 977.21	631.19	10R(36), 985.49	-0.05
	$2\nu_3 A1 \ (1254.30)$	618.96	10R(16), 973.29	635.35	10R(44), 989.65	-0.01
	$2\nu_3 A1 \ (1254.30)$	624.17	10R(24), 978.47	630.08	10R(34), 984.38	+0.05
	$2\nu_3 F2 (1256.87)$	621.63	10R(20), 975.93	635.35	10R(44), 989.65	-0.11

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе спектроскопических данных об обертонных состояниях колебания ν_3 молекул UF₆ и о частотах излучения CF₄- и пара-H₂-лазеров, излучающих в области 16 мкм, выполнен анализ возможности резонансного двухфотонного изотопно-селективного возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул UF₆ указанными лазерами.

Предложены схемы и приведены параметры резонансного бихроматического возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆, охлажденных до температуры $T \leq 50-70$ К в газодинамическом потоке, ИК-излучением двух CF₄-лазеров, а также двух пара-H₂-лазеров. Селективное возбуждение обертонных колебательных состояний $2\nu_3$ молекул 238 UF₆ и 235 UF₆ предложенным способом можно положить в основу процесса МЛРИ урана с использованием низкоэнергетических методов.

Предложенные в данной работе схемы резонансного изотопно-селективного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул UF₆ следует, по нашему мнению, иметь в виду при разработке технологий МЛРИ урана наряду с другими схемами и методами изотопно-селективного лазерного ИК-возбуждения и диссоциации молекул UF₆.

В случае применения для разделения изотопов урана метода многофотонной ИК-диссоциации молекул резонансное возбуждение колебательных состояний $3\nu_3$ UF₆ излучением двух лазеров и последующая их диссоциация теми же лазерными импульсами являются [49] более предпочтительными по сравнению с резонансным возбуждением состояний $2\nu_3$ UF₆. В первом случае можно реализовать более высокую селективность процесса возбуждения и диссоциации молекул.

При использовании на практике низкоэнергетических методов МЛРИ урана в молекулярных потоках более эффективными могут быть схемы резонансного изотопно-селективного возбуждения состояний $2\nu_3$ молекул UF₆ бихроматическим излучением двух ИК-лазеров.

Благодарности. Автор выражает глубокую благодарность А. Н. Петину за помощь в работе над рисунками.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Г. Н. Макаров, УФН 185, 717 (2015).
- Г. Н. Макаров, УФН (2021); DOI: 10.3367/UFNr. 2021.02.038942.
- В. Ю. Баранов, Е. И. Козлова, Ю. А. Колесников, А. А. Котов, в сб. Изотопы: свойства, получение, применение, т. 1, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, Москва (2005), с. 474.
- 4. W. D. Metz, Science 185, 602 (1974).
- 5. A. J. Glass, UCRL-50021-75, 1-55 (1975).
- N. Camarcat, A. Lafon, J.-P. Perves et al., Proc. SPIE 1859, Laser Isotope Separation (28 May 1993); doi: 10.1117/12.145494; https://doi.org/10.1117/12. 145494.
- W. Fuss, Report MPQ 346, February 2015 (Max-Planck-Institute fur Quantenoptik).
- 8. Атомная энергия 2.0; https://www.atomic-energy. ru/keywords/vou-nou.
- World Nuclear News, 11 December 2013; https:// www.world-nuclear-news.org/ENF-Megatons-to-Megawatts-program-concludes-1112134.html.
- J. Kim, J. W. Eerkens, and W. H. Miller, Nucl. Sci. Eng. 156, 219 (2007).
- J. W. Eerkens and J. Kim, AIChE J. 56(9), 2331 (2010).
- P. Mathi, V. Parthasarathy, A. K. Nayak et al., Proc. Nat. Acad. Sci. India, Sect. A, Phys. Sci. (2015), pp. 1-16; DOI: 10.1007/s40010-015-0249-6.
- E. Ronander, H. J. Strydom, and R. L. Botha, Pramana–J. Phys. 82(1), 49 (2014).
- C. D. Ferguson and J. Boureston, https://www. iranwatch.org/sites/default/files/perspex-fwi-Laser. pdf.

- Y. Li, Y. Zhang, Y. Kuang et al., Opt. Comm. 283, 2575 (2010).
- 16. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров и др., ЖЭТФ 152, 627 (2017).
- 17. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров и др., КЭ 48, 157 (2018).
- **18**. В. М. Апатин, Г. Н Макаров, Н.-Д. Д. Огурок и др., ЖЭТФ **154**, 287 (2018).
- 19. V. N. Lokhman, G. N. Makarov, A. L. Malinovskii, A. N. Petin, D. G. Poydashev, and E. A. Ryabov, Laser Phys. 28, 105703 (2018).
- 20. А. Н. Петин, Г. Н. Макаров, КЭ 49, 593 (2019).
- В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин и др., ЖЭТФ 155, 216 (2019).
- 22. Г. Н. Макаров, УФН 190, 264 (2020).
- **23**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **119**, 5 (2001).
- 24. G. N. Makarov and A. N. Petin, Chem. Phys. 266, 125 (2001).
- **25**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **111**, 361 (2020).
- **26**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **159**, 281 (2021).
- 27. http://www.silex.com.au.
- SILEX Process. www.chemeurope.com/en/encyclopedia/ Silex Process.html.
- **29.** SILEX Uranium Enrichment, SILEX Annual Report 2020, http://www.silex.com.au.
- J. L. Lyman, Report LA-UR-05-3786, Los Alamos National Laboratory (2005).
- 31. J. J. Tiee and C. Wittig, Appl. Phys. Lett. 30, 420 (1977).
- 32. J. J. Tiee, T. A. Fischer, and C. Wittig, Rev. Sci. Instr. 50, 958 (1979).
- 33. R. L. Byer, IEEE J. Quant. Electr. 12, 732 (1976).
- 34. R. S. McDowell, C. W. Patterson, C. R. Jones et al., Opt. Lett. 4, 274 (1979).
- 35. C. W. Patterson, R. S. McDowell, and N. G. Nereson, IEEE J. Quant. Electr. 16, 1164 (1980).
- 36. С. С. Алимпиев, Г. С Баронов, Н. В. Карлов и др., КЭ 6, 553 (1979).
- **37**. А. З. Грасюк, В. С. Летохов, В. В. Лобко, КЭ **7**, 2261 (1980).

- 38. J. P. Aldridge, E. G. Brock, H. Filip et al., J. Chem. Phys. 83, 34 (1985).
- 39. M. Takami, T. Oyama, T. Watanabe et al., Jpn. J. Appl. Phys. 23, L88 (1984).
- 40. С. С. Алимпиев, Н. В. Карлов, Ш. Ш. Набиев и др., КЭ 8, 623 (1981).
- 41. K. Takeuchi, H. Tashiro, S. Kato et al. J. Nucl. Sci. Technol. 26, 301 (1989).
- 42. Y. Okada, S. Kato, K. Sunouchi et al., Appl. Phys. B 62, 77 (1996).
- 43. G. A. Laguna, K. C. Kim, C. W. Patterson et al., Chem. Phys. Lett. 75, 357 (1980).
- 44. B. J. Krohn, R. S. McDowell, C. W. Patterson et al., J. Mol. Spectr. 132, 285 (1988).
- 45. J. W. Eerkens, R. P. Griot, J. H. Hardin, and R. G. Smith, in *Conference on Lasers and Elect*ro-Optics, OSA Technical Digest, Optical Society of America (1986); https://www.osapublishing.org/ abstract.cfm?URI=CLEO-1986-TUI4.
- 46. Xu Bao-yu, Liu Yong, Dong Wen-bo et al., INIS (International Nuclear Information System)
 21 (20), 1990; https://inis.iaea.org/search/search. aspx?orig q=RN:21077879.
- 47. O. V. Budilova, A. A. Ionin, I. O. Kinyaevskiy et al., Opt. Comm. 345, 163 (2015).

- 48. I. Y. Baranov and A. V. Koptev, Proc. SPIE 7915, 7915F (2011); DOI: 10.1117/12871578.
- **49**. Γ. Η. Μакаров, K**Э 51**, 643 (2021).
- 50. В. С. Летохов, В. П. Чеботаев, Принципы нелинейной лазерной спектроскопии, Наука, Москва (1975), с. 107.
- **51**. С. С. Алимпиев, С. М. Никифоров, Б. Г. Сартаков и др., КЭ **12**, 434 (1985).
- 52. V. M. Apatin, V. N. Lokhman, and G. N. Makarov, Laser Chem. 5, 231 (1985).
- 53. C. W. Patterson, B. J. Krohn, and A. S. Pine, Opt. Lett. 6, 39 (1981).
- 54. R. J. Jensen, O. P. Judd, and J. A. Sullivan, Los Alamos Sci. No. 4, 2 (1982).
- 55. R. J. Jensen, J. A. Sullivan, and F. T. Finch, Separat. Sci. Technol. 15, 509 (1980).
- 56. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Опт. и спектр. 63, 762 (1987).
- 57. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ., Chur (1985).

ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТОМОВ НЕОНА В кэВ-ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ

В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук 194021, Санкт-Петербург, Россия

> Поступила в редакцию 30 июня 2021 г., после переработки 30 июня 2021 г. Принята к публикации 15 июля 2021 г.

Проведены расчеты вероятностей оже-распада вакансии на $2p\pi$ -орбитали в квазимолекуле Ne⁺–Ne, короткоживущей системе, образующейся при столкновении иона и атома неона и распадающейся при их разлете в диапазоне энергий соударения 3-50 кэВ. Достигнуто согласие с имеющимися экспериментальными данными о спектрах эмитируемых электронов. Определены доминирующие каналы оже-распада в зависимости от энергии соударения. Показано, что с ростом энергии соударения происходит существенная ионизация и возбуждение квазимолекулы, что приводит к сильному возрастанию вероятности оже-переходов в квазимолекуле. Предложен скейлинг для оценки вероятности оже-перехода при изменении степени ионизации частиц. Предложена процедура восстановления терма квазимолекулы в условиях сильной зависимости вероятности оже-перехода от межъядерного расстояния. Установлена зависимость суммарной (по всем возможным каналам) вероятности распада $2p\pi$ -вакансии от условий соударения.

DOI: 10.31857/S004445102112004X

1. ВВЕДЕНИЕ

Оже-переходы в квазимолекуле были обнаружены в 1976 г. при изучении столкновений Kr⁺–Kr [1]. В спектре электронов наблюдалась широкая полоса, простирающаяся до сотен электронвольт, связанная с оже-переходами во время столкновения на вакантную орбиталь, формирующуюся из наружных уровней иона криптона и снижающуюся при уменьшении межъядерного расстояния.

Несмотря на короткое время акта соударения и соответственно время «жизни» квазимолекулы (10⁻¹⁵-10⁻¹⁶ с), возможен распад вакансий на снижающихся уровнях. Убедительным доказательством существования оже-переходов в квазимолекуле явились последовавшие вскоре эксперименты по совпадениям «электрон–рассеянный ион» [2], в которых экспериментально фиксировались энергия испущенного электрона и угол вылета рассеянного иона. Знание угла вылета иона позволяло из всего множества актов эмиссии выделить столкновения с заданным параметром удара (с заданной траекторией) и, соответственно, с фиксированным расстоянием наибольшего сближения. Выделение траектории столкновения позволило применить квантовомеханическую модель эмиссии из квазимолекулы [3].

Обнаружение оже-переходов в квазимолекуле открыло возможность оже-спектроскопии квазимолекулы, т.е. определения поведения молекулярных уровней E(R) в зависимости от межъядерного расстояния R из экспериментальных спектров электронов. Ход экспериментальной орбитали E(R) восстанавливался по положению максимума в спектрах оже-электронов, измеренных при различных расстояниях наибольшего сближения R_0 . Сравнение экспериментального уровня с расчетами для системы Kr–Kr [4–6] показали его близость к орбиталям $4p\pi$ и $4d\delta$ [6]. Результаты по оже-спектроскопии ряда других исследованных квазимолекул приведены в статьях [2,7,8].

Из абсолютных величин экспериментальных сечений были оценены ширины автоионизационных уровней Γ_A . Оказалось, что величины Γ_A достигают 10¹⁶ с⁻¹ в случае Kr⁺–Kr и 10¹⁵ с⁻¹ в случае Ar⁺–Kr, т. е. время жизни вакансий оказывается сравнимым со временем столкновения и, как следствие, вакансии с заметной вероятностью успева-

^{*} E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

ют распасться в квазимолекуле. Возможными причинами столь большой ширины автоионизационных уровней были названы возрастание в квазимолекуле за счет выдвижения заполненных орбиталей числа электронов на верхних уровнях, способных участвовать в оже-переходах, а также увеличение перекрывания волновых функций состояний, между которыми осуществляется переход (аналогично переходам Костера-Кронига). Эффект увеличения Г_А в квазимолекуле был продемонстрирован на модельных расчетах в работах [9, 10]. Сочетание высокой вероятности образования вакансий и большой ширины автоионизационного уровня приводит к значительным сечениям эмиссии электронов из квазимолекулы. Вероятность образования автоионизационных состояний в квазимолекуле оказывается близкой к единице как вследствие снижения вакантных молекулярных орбиталей (MO), так и за счет выдвижения заполненных МО под границу непрерывного спектра, что приводит к появлению над вакантными уровнями уровней, заселенных электронами. Согласно [2, 7] экспериментальные ширины $2p\pi$ -уровней Γ_A в расчете на одну вакансию составили для квазимолекулы О–О $10^{14}~{\rm c}^{-1}~(0.1~{\rm sB})$ и для Ne–Ne 10¹⁵ с⁻¹ (1 эВ). Обе величины близки к известным вероятностям оже-распада единственной 2*p*-вакансии в объединенных атомах: S (Z = 16) и Са (Z = 20) [11]). В случае $3p\pi$ -уровня значение $\Gamma_A=2$
э В значительно больше теоретического Г_А для иона Са с единственной 3*p*-вакансией, что может быть объяснено [2] возрастанием в квазимолекуле числа электронов, способных участвовать в оже-переходе.

Теоретические расчеты оже-ширин квазимолекулярных уровней $\Gamma_A(R)$ выполнены лишь для одной из самых простых квазимолекул He⁺–He. Для оже-переходов на 1*s* σ -уровень в этом случае экспериментальная ширина, определенная в работе [8], удовлетворительно согласуется с рассчитанной в работе [12] как по величине, так и по характеру зависимости от межъядерного расстояния.

В работе [9] была сделана попытка рассчитать вероятности оже-переходов для рассматриваемого случая заполнения вакансии на $2p\pi$ -орбитали при столкновениях Ne⁺–Ne. Однако поскольку в этой работе использовались весьма приближенные расчеты поведения молекулярных орбиталей от межъядерного расстояния, расчеты вероятностей перехода носят, скорее, лишь качественный характер. Сопоставления с экспериментальными данными не проводилось. Среди других исследований непрерывной составляющей спектров электронов при атомных столкновениях следует упомянуть работы [13–17].

Настоящая статья является развитием наших исследований оже-распада $2p\pi$ -вакансии в квазимолекуле, образующейся при столкновении атомов неона, опубликованных в [18]. В задачи настоящей работы входили изложение и обоснование процедуры расчета вероятностей оже-переходов, деталей расчета вероятностей оже-переходов, деталей расчета вероятностей оже-распада по разным каналам (с участием электронов различных наружных орбиталей), установление зависимости вероятности ожеперехода от степени ионизации частиц и сопоставление полученных данных с экспериментальными.

2. СПЕКТРЫ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДАХ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

На рис. 1 представлены спектры электронов, измеренные для случая Ne⁺–Ne. Как было показано в [18], часть спектра экспоненциальной формы связана с образованием автоионизационного состояния при выдвижении $4f\sigma$ -орбитали и последующим переходом высоковозбужденных электронов в континуум вследствие динамики соударения. Широкая полоса при больших энергиях электронов связана с оже-переходами в квазимолекуле на снижающуюся при сближении частиц $2p\pi$ -орбиталь. Как показано в [7], имеется согласие полученной из эксперимента зависимости энергии $2p\pi$ -орбитали от достигнутого межъядерного расстояния с результатами расчетов [8].

Однако вопрос о вероятности оже-переходов в квазимолекуле Ne⁺–Ne требует отдельного рассмотрения и дальнейшей проработки. Приведенные в работах [9, 18] оценки дают значения $W(R) \approx \approx 10^{-2}-10^{-3}$ ат. ед. и указывают на существенную зависимость вероятности распада вакансии от достигнутого межъядерного расстояния. В распад вакансии на $2p\pi$ -орбитали может вносить вклад значительное число каналов. Представляет несомненный теоретический интерес выяснить их относительный вклад при различных условиях. Цель настоящей работы — рассчитать вероятности оже-переходов для различных каналов и уточнить интерпретацию экспериментальных спектров.

Как видно из рис. 1, в спектре электронов присутствует широкая полоса при энергиях электронов (более 60 эВ). Если вычесть экспоненциальную компоненту, связанную с переходами в континуум вследствие динамической ионизации, то можно выделить часть спектра, связанную с оже-переходами



Рис. 1. Спектры электронов при столкновениях Ne⁺-Ne для различных энергий соударения. Числа у кривых указывают энергию соударения. Жирными кривыми показана часть спектра за вычетом экспоненциальной подложки (см. текст). Использованы данные из работы [18] с коррекцией на эффект Доплера

в квазимолекуле. В изучаемые сечения необходимо также внести поправку, связанную с эффектом Доплера. Экспериментальные спектры измерялись при угле наблюдения $\Theta = 128.5^{\circ}$ относительно направления пучка. Пусть \mathbf{V}_{ls} и \mathbf{V}_{cms} — векторы скоростей электронов соответственно в лабораторной системе координат и в системе центра масс, \mathbf{V} — вектор движения центра масс. В приближении прямолинейного пролета этот вектор направлен вдоль пучка, а скорость движения центра масс равна в нашем случае $v_0/2$, где v_0 — скорость соударения. Используя равенство $\mathbf{V}_{cms} = \mathbf{V}_{ls} - \mathbf{V}$, получаем

$$E_{cms} = E_{ls} - m_e \sqrt{2m_e E_{ls}} \frac{v_0}{2} \cos\Theta + \frac{m_e v_0^2}{8}.$$
 (1)

Это позволяет пересчитать шкалу энергий электронов в систему центра масс для сопоставления с теоретическим расчетом. Величины сечений пересчитываются по формуле

$$\frac{d\sigma}{dE_{cms}} = \frac{d\sigma}{dE_{ls}} \frac{dE_{ls}}{dE_{cms}}.$$
 (2)

При классическом рассмотрении сечение эмиссии электрона при распаде вакансии на квзимолекулярном уровне равно [18]

$$\frac{d\sigma}{dE} = 2 \int_{0}^{b(R)} 2\pi \ b \ db \ f \ W(R) \ \frac{dR}{dE} \ \frac{dt}{dR} =$$
$$= 4\pi \ f \ W(R) \ \frac{dR}{dE} \ R \ \frac{b(R)}{v_0}.$$
 (3)

Здесь f — число вакансий на уровне, W(R) — вероятность оже-распада вакансии, множитель 2 учитывает тот факт, что расстояние R проходится дважды при сближении и разлете частиц. Как видно из приведенной формулы, при достижении расстояния наибольшего сближения при рассматриваемой энергии соударения сечение обращается в нуль.

В работе [3] получено квантовомеханическое выражение для вероятности перехода для терма, квадратично зависящего от времени, $E_0 = \alpha t^2$, учитывающее интерференцию амплитуд перехода при сближении и разлете частиц:

$$P(b,E) = B \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} \left(E_e - E_0 \right) \right\}.$$
 (4)

Здесь E_e — энергия вылетевшего электрона, $E_0(R)$ — зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, $A_i(x)$ функция Эйри.

Параметр α равен

$$\alpha = \frac{1}{4} \frac{dE}{dR} v^2 \left(-\frac{dU(R)}{dR} \frac{1}{E_{CM}} + 2\frac{b^2}{R^3} \right), \quad (5)$$

т.е. значение α зависит от производной терма dE/dR, растет с ростом скорости соударения v и зависит от параметра удара b и производной от потенциала взаимодействия U(R).

При квантовомеханическом рассмотрении вблизи точки поворота траектории R_0 возникает интерференция амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. При достижении расстояния наибольшего сближения R_0 сечение остается конечным, это соответствует нулю аргумента в функции Эйри. При $E_e > E_0$ сечение убывает по экспоненциальному закону. Для получения сечения необходимо проинтегрировать выражение (4) по всем параметрам удара [18]:

$$\frac{d\sigma}{dE} = 2^{5/2} \pi^2 fW(R) \times \\
\times \int_{0}^{b(R)} \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} \left[E(R) - E_0(b) \right] \right\} b \, db. \quad (6)$$

В данном выражении использована нормировка сечения, предложенная в работе [18].

Как следует из классического выражения для сечения, величина

$$\frac{\frac{d\sigma}{dE} v}{f} = W(R) F$$

где фактор
$$F = \frac{dR}{dE} R b(R)$$

и зависит только от производной терма, достигнутого межъядерного расстояния и параметра удара. Понятие фактора F удобно ввести и для рассмотрения процессов при квантовом описании. В этом случае

$$F = 2^{5/2} \pi^2 v_0 \times \int_{0}^{b(R)} \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} \left[E(R) - E_0(b) \right] \right\} b \, db. \quad (7)$$

3. ЭНЕРГИИ И ВЕРОЯТНОСТИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Диаграммы МО для систем Ne–Ne, Ne²⁺–Ne и Ne⁴⁺–Ne были рассчитаны в работе [19]. Диаграмма МО для других случаев может быть получена масштабированием результатов работы [19].

Как следует из диаграммы МО (рис. 2), заполнение вакансии на $2p\pi$ -уровне может происходить с орбиталей $3p\sigma$ (на орбитали 2 электрона), $3d\sigma$ (2 электрона), $3d\pi$ (4 электрона). Мы предполагаем, что орбитали $3s\sigma$, $3p\pi$ и $3d\delta$ не содержат электронов, так как формируются из незаполненных при больших межъядерных расстояниях уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется, по крайней мере, шесть вариантов оже-переходов: $3p\sigma^2-2p\pi\varepsilon$ (ε обозначает улетающий электрон), $3d\sigma^2-2p\pi\varepsilon$, $3d\pi^2-2p\pi\varepsilon$,



Рис. 2. Диаграмма МО для систем Ne^{2+} -Ne (сплошные линии) и Ne^{4+} -Ne (штриховые линии) [19]. Стрелками показана схема оже-перехода

 $3p\sigma 3d\sigma - 2p\pi\varepsilon$, $3p\sigma 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$ и $3d\sigma 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$. В дальнейшем для обозначения канала мы будем использовать начальное состояние для оже-перехода.

Оценки [18] показывают, что в изучаемом случае оже-распад $2p\pi$ -вакансии происходит при расстояниях менее 0.7 ат. ед. При достижении межъядерного расстояния 1.3 ат. ед. происходит выдвижение $4f\sigma$ -орбитали с последующим переходом одногодвух электронов в континуум. При энергиях 3–4 кэВ среднее число удаленных электронов равно 1, т. е. при этих энергиях соударения нужно рассматривать энергии оже-переходов для системы Ne²⁺–Ne, а при больших энергиях следует перейти к диаграмме для Ne⁴⁺–Ne и Ne⁶⁺–Ne.

Вероятность оже-перехода в единицу времени определяется формулой

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \Psi_f^* \; \frac{e^2}{r_{1,2}} \; \Psi_i \; d\tau_1 d\tau_2 \; \right|^2, \qquad (8)$$

где Ψ_i — волновая функции системы из двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях, Ψ_f — волновая функция системы из электрона на $2p\pi$ -орбитали и оже-электрона, т. е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор $e^2/r_{1,2}$ описывает кулоновское взаимодействие двух электронов.

Волновую функцию системы из двух электронов можно выразить через одноэлектронные волновые функции. В таком случае волновая функция начального состояния системы представляет собой комбинацию двух волновых функций стационарных состояний электронов и имеет вид

$$\Psi_{i} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{i}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1})\psi_{i}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}) \pm \chi_{i}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2})\psi_{i}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1})). \quad (9)$$

Волновая функция конечного состояния системы, в свою очередь, может быть представлена комбинацией волновой функции стационарного состояния и волновой функцией свободного электрона:

$$\Psi_{f} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{f}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1})\psi_{f}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}) \pm \chi_{f}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2})\psi_{f}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1})). \quad (10)$$

Здесь множитель $1/\sqrt{2}$ выступает в качестве нормировочного коэффициента. Знак «±» определяется симметрией волновой функции. В случае однонаправленных спинов электронов произведения волновых функций вычитаются (знак «-»), в случае разнонаправленных спинов — складываются (знак «+»). В качестве волновых функций стационарных состояний электрона нами используются водородоподобные волновые функции:

$$\chi_{n,l,m} = \frac{2}{(n^{l+2} \ (2l+1)!)} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \times \sqrt{z^3}(2zr)^l \exp\left(-\frac{zr}{n}\right) \times H\left[-n+l+1, \ 2 \ l+2, \frac{2zr}{n}\right] Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right).$$
(11)

Здесь Y_{lm} — сферическая функция, H — вырожденная гипергеометрическая функция, n — главное квантовое число, l — орбитальный момент, m — проекция орбитального момента на ось. При этом эффективный заряд Z_i можно взять из выражения для энергии электрона в стационарном состоянии:

$$E_i = \frac{Z_i^2}{2n^2},\tag{12}$$

т. е. Z_i меняется при изменении межъядерного расстояния. Выбор водородоподобных волновых функций связан с тем, что рассматриваемые переходы происходят вблизи предела объединенного атома и электроны находятся в поле значительного эффективного заряда объединенного атома.

Волновая функция свободного электрона имеет вид [20]

$$\chi_{\varepsilon,l,m} = \sqrt{\frac{2k}{\pi}} \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} \exp\left(\frac{\pi z}{2k}\right) \times \\ \times \left|\Gamma\left(l+1-\frac{iz}{k}\right)\right| \exp\left(-ikr\right) \times \\ \times H\left[\frac{iz}{k}+l+1, \ 2l+2, \ 2ikr\right] Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right).$$
(13)

Здесь Γ — гамма-функция, ε — энергия свободного электрона, $k = \sqrt{2\varepsilon}$. Все величины представлены в атомной системе единиц. В случае свободного электрона невозможно определить z через главные квантовые числа, и используется некоторое значение *z_{eff}*. Таким образом, для волновой функции свободного электрона существует некоторая неопределенность, ведь z_{eff} можно брать в пределе от значения $Z_{2p\pi}$ (заряд конечного состояния электрона в уровне $2p\pi$) до значения $Z_{initial}$ (заряд одной из начальных волновых функций электронов). В обзоре [21] демонстрируется хорошее согласие результатов расчетов и экспериментов при выборе параметра z_{eff} как среднегеометрического от значений эффективного заряда начального состояния внутреннего (глубоко связанного) электрона и внешнего (для возбужденного состояния) электрона, т.е. $z_{eff} = \sqrt{Z_{2p\pi}} Z_{exp}$.

Таблица 1. Квантовые числа стационарных состоя-

ний

	$3d\pi$	$3p\sigma$	$2p\pi$
n	3	3	2
l	2	1	1
m	±1	0	±1

Волновые функции электронов можно разделить на угловую и радиальную составляющие. При расчете интегралов можно воспользоваться разложением оператора $1/|r_1 - r_2|$ по сферическим функциям:

$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \sum_{l, m} \frac{r_{min}^l}{r_{max}^{l+1}} Y_{lm}^* \left(\Omega'\right) Y_{lm}\left(\Omega\right) \frac{4\pi}{2l+1}, \quad (14)$$

где r_{min} и r_{max} обозначают меньшую и большую величину из r_1 и r_2 . Здесь суммирование идет по всем целым числам $l \ge 0$, а также по всем целым $-l \le m \le l$.

Интегрирование по угловым координатам приводит к тому, что в сумме по l остается небольшое число членов и вычисление сводится к расчету нескольких двукратных интегралов по координатам r_1 и r_2 для различных l. Эти интегралы легко вычислить путем разделения интеграла на два предела для корректного учета множителя r_{min}^l/r_{max}^{l+1} :

$$\int_{0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \left[\int_{0}^{r_{2}} \frac{r_{1}^{l}}{r_{2}^{l+1}} R_{f}(r_{1}) R_{i}(r_{1}) r_{1}^{2} dr_{1} + \int_{r_{2}}^{\infty} \frac{r_{2}^{l}}{r_{1}^{l+1}} R_{f}(r_{1}) R_{i}(r_{1}) r_{1}^{2} dr_{1} \right] \times R_{f}(r_{2}) R_{i}(r_{2}) r_{2}^{2} dr_{2}.$$
 (15)

Рассмотрим в качестве примера расчет перехода $3d\pi \ 3p\sigma \rightarrow 2p\pi \ \varepsilon$. Квантовые числа стационарных состояний приведены в табл. 1. Волновые функции для $3d\pi$, $3p\sigma$ и $2p\pi$ равны

$$\chi_{3d\pi} = \mp \frac{\exp\left(-\frac{rz}{3} \pm i\phi\right) r^2 z^2 \sqrt{z^3} \cos\theta \sin\theta}{81\sqrt{\pi}}, \quad (16)$$

$$\chi_{3p\sigma} = -\frac{1}{81} \exp\left(-\frac{rz}{3}\right) \times \sqrt{\frac{2}{\pi}} rz\sqrt{z^3} \left(-6 + rz\right) \cos\theta, \quad (17)$$

$$\chi_{2p\pi} = \mp \frac{\exp\left(-\frac{rz}{2} \pm i\phi\right) rz\sqrt{z^3}\sin\theta}{8\sqrt{\pi}}.$$
 (18)

Для определения возможных квантовых чисел свободной частицы проинтегрируем радиальные части волновых функций и оператора $1/|r_1 - r_2|$.

В таком случае

$$\Psi_{i} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{3d\pi}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1}) \psi_{3p\sigma}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}) \pm \\ \pm \chi_{3d\pi}(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}) \psi_{3p\sigma}(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1})), \quad (19)$$

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{2p\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{\varepsilon, l, m}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \pm \\ \pm \chi_{2p\pi}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_{\varepsilon, l, m}(r_1, \theta_1, \varphi_1)).$$
(20)

В случае триплетного состояния системы (полный спин равен единице, спины сонаправлены)

$$\Psi_{i}\Psi_{f} = \chi_{3d\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1}\right) \psi_{3p\sigma} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}\right) \times \\ \times \chi_{2p\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1}\right) \psi_{\varepsilon,l,m} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}\right) - \\ - \chi_{3d\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1}\right) \psi_{3p\sigma} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}\right) \times \\ \times \chi_{2p\pi} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2}\right) \psi_{\varepsilon,l,m} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1}\right).$$
(21)

В случае синглетного состояния (полный спин равен нулю) возможны два варианта. Первый случай, когда спины сонаправлены у $3d\pi$ и $2p\pi$, второй — у $3p\sigma$ и $2p\pi$:

$$\Psi_{i} \Psi_{f} = \chi_{3d\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1} \right) \psi_{3p\sigma} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2} \right) \times \\ \times \chi_{2p\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1} \right) \psi_{\varepsilon,l,m} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2} \right), \quad (22)$$

$$\Psi_{i} \Psi_{f} = \chi_{3d\pi} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1} \right) \psi_{3p\sigma} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2} \right) \times \\ \times \chi_{2p\pi} \left(r_{2}, \theta_{2}, \varphi_{2} \right) \psi_{\varepsilon,l,m} \left(r_{1}, \theta_{1}, \varphi_{1} \right).$$
(23)

В качестве примера разберем случай триплетного состояния.

Рассмотрим интеграл от угловой составляющей выражения

$$\Psi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \Psi_i$$

Сразу разобьем интеграл на переменные θ_1, φ_1 и θ_2, φ_2 :

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} (Y_{p\pi}^{*}(\theta_{1},\varphi_{1})Y_{lm}^{*}(\theta_{1},\varphi_{1})Y_{d\pi}(\theta_{1},\varphi_{1}) - Y_{l'm'}^{*}(\theta_{1},\varphi_{1})Y_{lm}^{*}(\theta_{1},\varphi_{1})Y_{d\pi}(\theta_{1},\varphi_{1})) \times \\
\times \sin\theta_{1} d\theta_{1} d\varphi_{1} \times \\
\times \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} (Y_{l'm'}^{*}(\theta_{2},\varphi_{2})Y_{lm}(\theta_{2},\varphi_{2})Y_{p\sigma}(\theta_{2},\varphi_{2}) - Y_{p\pi}^{*}(\theta_{2},\varphi_{2})Y_{lm}(\theta_{2},\varphi_{2})Y_{p\sigma}(\theta_{2},\varphi_{2})) \times \\
\times \sin\theta_{2} d\theta_{2} d\varphi_{2}. \quad (24)$$

Здесь $Y_{l'm'}^*$ обозначает угловую составляющую волновой функции свободной частицы.

Ненулевыми интегралы получаются при комбинациях квантовых чисел, которые представлены в табл. 2. Здесь мы зафиксировали ориентацию проекции момента импульса стационарного электрона в состоянии $2p\pi$ как +1.

Как видно из таблицы, в переходе $3d\pi 3p\sigma \rightarrow 2p\pi\varepsilon$ свободный электрон может оказаться в состоянии с числом l = 0, 2, 4. Также в некоторых случаях число *m* может принимать значения 0 и -2.

Рассмотрим случай со значением квантовых чисел из первой строки табл. 2. Для наглядности разделим переход на два случая, когда происходит «прямой» переход ($3d\pi$ переходит в $2p\pi$, а $3p\sigma$ переходит в свободное состояние) и «обратный» ($3p\sigma$ переходит в $2p\pi$, а $3d\pi$ переходит в свободное состояние).

Вычислим интеграл типа

$$\iint \chi^*_{2p\pi} (r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi^*_{\varepsilon, l, m} (r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ \times \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_{3d\pi} (r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma} (r_2, \theta_2, \varphi_2) d\tau_1 d\tau_2.$$
(25)

Возьмем значения Z, характерные для молекулярных орбиталей атома Ne⁴⁺:

$$Z_{3d\pi} = 7, \quad Z_{3p\sigma} = 10, \quad Z_{2p\pi} = 8.$$

Для случая свободного электрона возьмем Z_{ε} как среднее геометрическое между $Z_{3p\sigma}$ и $Z_{2p\pi}$:

$$Z_{\varepsilon} = \sqrt{Z_{3p\sigma} Z_{2p\pi}} \approx 9.$$
 (26)

Интеграл от угловых частей уже был рассчитан нами ранее, его значение равно $\sqrt{0.6}/4\pi$. Если воспользоваться формулой (15) и взять интеграл только по

3	$d\pi$	3	$p\sigma$	2	$p\pi$		ε	$\frac{e^2}{r_{1,2}}$	Значение
l	m	l	m	l	m	l	m	l	интеграла
3	1	2	0	2	1	0	0	1	$\sqrt{0.6}/4\pi$
3	1	2	0	2	1	0	0	2	$\sqrt{0.6}/4\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	1	$\sqrt{3}/10\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	2	$\sqrt{3}/28\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	3	$-9\sqrt{3}/140\pi$
3	-1	2	0	2	1	2	-2	2	$-3/14\sqrt{2}\pi$
3	-1	2	0	2	1	2	-2	3	$-3/14\sqrt{2}\pi$
3	1	2	0	2	1	4	0	2	$-\sqrt{0.6}/7\pi$
3	1	2	0	2	1	4	0	3	$-\sqrt{0.6}/7\pi$
3	-1	2	0	2	1	4	-2	2	$-\sqrt{1.5}/7\pi$
3	-1	2	0	2	1	4	-2	3	$-\sqrt{1.5}/7\pi$

Таблица 2. Комбинации квантовых чисел, при которых интегралы не равны нулю

Таблица 3. Квантовые состояния, для которых вычисляем общую вероятность перехода $3d\pi\,3p\sigma$ \to $\to 2p\pi\varepsilon$

$3d\pi$		$3p\sigma$		2	$p\pi$	ε		
l	m	l	m	l	m	l	m	
3	1	2	0	2	1	0	0	

 r_1 , то мы получим некоторое значение, зависящее только от r_2 :

$$I(r_2) = \frac{175616}{24134536953 r_2^2} \sqrt{\frac{14}{5}} \exp\left(-\frac{19r_2}{3}\right) \pi \times \\ \times \left(-58320 + 58320 \exp\left(\frac{19r_2}{3}\right) - 369360 r_2 - \\ -1169640 r_2^2 - 2345778 r_2^3 - 3127704 r_2^4 - \\ -2476099 r_2^5\right). \quad (27)$$

Интеграл по r_2 даст нам значение амплитуды вероятности перехода:

$$W = \int_{0}^{\infty} I(r_2) R_{\varepsilon}^* R_{2p} r_2^2 dr_2.$$
(28)

Данный интеграл вычислялся нами численно.

Следующим шагом необходимо также рассчитать обратный переход, после чего вычислить амплитуды вероятности для l = 2. Возведя в квадрат



Рис. 3. Зависимости вероятностей оже-переходов для различных каналов от энергии вылетевшего электрона для случаев $Ne^{2+}-Ne(a)$ и $Ne^{4+}-Ne(b)$

сумму амплитуд вероятностей и умножив полученное значение на коэффициент $2\pi/\hbar$, получим общую вероятность перехода $3d\pi \ 3p\sigma \rightarrow 2p\pi \varepsilon$ для квантовых состояний из табл. 3.

Амплитуды вероятностей с одинаковыми квантовыми числами системы интерферируют между собой. Вероятности переходов для различного набора квантовых чисел начальных и конечных электронов следует считать раздельно и затем суммировать.

Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Как видно из рис. 3, ионизация квазимолекулы приводит к заметному росту вероятности оже-пере-

ходов. Это можно объяснить тем, что с ростом степени ионизации происходит увеличение энергии связи как внутреннего электрона, так и внешнего, при этом параметры эффективного заряда с ростом степени ионизации сближаются, что приводит к увеличению перекрывания волновых функций наружного и внутреннего электронов и росту вероятности ожеперехода.

4. СКЕЙЛИНГ ДЛЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ

Анализ приведенных выше формул показывает, что если мы зафиксируем набор квантовых чисел для начального и конечного состояний, то конечный результат зависит только от значений эффективного заряда внутреннего и наружного электронов. Умножение обоих зарядов на константу не меняет значения интегралов, так как сводится к простой замене переменных. Следует ожидать, что вероятность оже-перехода будет зависеть только от отношения значений эффективного заряда для наружного и внутреннего электронов. Как известно, это отношение выражается через отношение энергий связи внутреннего Е1 и наружного Е2 электронов. Величина энергии вылетевшего электрона будет равна $E_1 - 2E_2 = E_2(E_1/E_2 - 2)$, т. е. тоже масштабируется.



Рис. 4. Зависимости вероятности оже-перехода $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$ от отношения энергий для рассматриваемых состояний. Пунктирная кривая соответствует минимальному значению эффективного заряда ($Z_{eff} = Z_{3d\pi}$), штриховая кривая — эффективному заряду внутреннего электрона ($Z_{eff} = Z_{2p\pi}$). Кривые для случаев Ne^{2+} -Ne (сплошная кривая) и Ne^{4+} -Ne (точки), полученные при использовании в качестве эффективного заряда

среднегеометрического значения, совпадают

Как известно, вылетевший электрон находится частично в области атома с эффективным зарядом, близким к заряду внутреннего электрона, а частично в области атома с эффективным зарядом, равным заряду наружного электрона. В обзоре [21] при расчетах вероятности оже-переходов рекомендуется использовать значение эффективного заряда как среднегеометрическое значение эффективных зарядов для обоих электронов. Это значение также выражается через отношение энергий связи наружного и внутреннего электронов. Для проверки высказывания, что вероятность оже-перехода зависит только от отношения энергий наружного и внутреннего электронов, на рис. 4 приведены зависимости вероятности оже-переходов для систем с различной степенью ионизации и разными предположениями о величине эффективного заряда для вылетающего электрона.

Как видно из рис. 4, верхняя кривая соответствует минимальному значению эффективного заряда, а нижняя кривая — максимальному значению. Различие этих кривых характеризует диапазон значений, получаемый при различных предположениях о величине эффективного заряда. Средняя кривая (сплошная линия) соответствует среднегеометрическому значению эффективного заряда, что учитывает тот факт, что убегающий электрон часть времени находится вблизи глубоко связанного электрона, а часть времени — вблизи слабосвязанного электрона. Как уже упоминалось, согласно обзору [21] использование среднегеометрического значения для эффективного заряда позволяет достичь наилучшего согласия с экспериментом.

Кривые для случаев Ne²⁺–Ne и Ne⁴⁺–Ne при использовании в качестве эффективного заряда среднегеометрического значения (средние кривые) совпадают. Таким образом, нет необходимости рассчитывать вероятности оже-переходов при росте степени ионизации — достаточно построить зависимости энергий рассматриваемых уровней от межъядерного расстояния и затем пересчитать вероятности оже-переходов, используя предложенный скейлинг.

5. СОПОСТАВЛЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ ЗНАЧЕНИЙ СЕЧЕНИЙ ЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Для сопоставления удобно выбрать произведение сечения и скорости соударения, так как устраняется зависимость от продолжительности соударения для разных энергий соударения. Начальная вероят-



Рис. 5. *а*) Сопоставление расчетного спектра с экспериментальными данными для энергий соударения 3, 4 и 6.25 кэВ. *б*) Сопоставление расчетного спектра с экспериментальными данными для энергий соударения 12.5, 25 и 50 кэВ. Для расчета вероятностей переходов при энергии 12.5 кэВ использовалась диаграмма МО для системы Ne⁵⁺–Ne, в остальных случая для системы Ne⁶⁺–Ne

ность f наличия вакансии на $2p\pi$ принималась равной 1/3, что соответствует статистическому характеру распределения одной первоначальной вакансии между молекулярными орбиталями, формирующимися из 2p-уровня Ne при больших межъядерных расстояниях. Для удобства сравнения с расчетом использовалась величина $\sigma v_0/f$ (см. рис. 5).

Для расчета вероятностей переходов использовалась диаграмма МО для системы Ne²⁺–Ne. При малых энергиях указана ошибка, связанная с вычитанием экспоненциальной подложки. Для случая 6.25 кэВ приведены также расчеты с использованием вероятностей оже-переходов для системы Ne⁴⁺–Ne и соответствующей диаграммы MO для расчета масштабного фактора.

Как видно из рис. 5a, для энергий 3 и 4 кэВ имеется практически полное совпадение результатов расчета и эксперимента при использовании диаграммы МО для системы Ne²⁺–Ne. Для случая 6.25 кэВ при малых энергиях вылетевшего электрона также имеется согласие для системы Ne²⁺–Ne, а затем расчетное сечение резко убывает, что связано с резким уменьшением вероятностей оже-процесса при уменьшении межъядерного расстояния, что соответствует увеличению энергии вылетевшего электрона. Учет дальнейшей ионизации системы и переход к использованию диаграммы МО для системы Ne⁴⁺–Ne позволяет достичь согласия с экспериментом.

Сопоставление с данными эксперимента позволяет заключить, что при малых межъядерных расстояниях заметно возрастает возбуждение и степень ионизации системы сталкивающихся частиц. При небольшой коррекции диаграммы МО (увеличении энергии оже-перехода на 15%) удается добиться полного согласия с экспериментом.

Как видно из рис. 5*б*, с ростом энергии соударения необходимо учитывать дальнейший рост степени ионизации сталкивающихся частиц, только в этом случае достигается согласие с экспериментом.

6. ВКЛАД РАЗЛИЧНЫХ КАНАЛОВ В ЗАПОЛНЕНИЕ 2*p*π-ВАКАНСИИ

При энергии соударения 3 кэВ основной вклад дает переход $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$. При энергии электронов 2.5 ат. ед. подключается канал $3d\pi - 3d\sigma$ (для сокращения записи в дальнейшем будем записывать только начальное состояние). С ростом энергии соударения пороги для всех каналов сдвигаются в сторону больших энергий электронов (см. рис. 6), однако вклад канала $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$ остается доминирующим (более 80%).

7. СРАВНЕНИЕ СУММАРНОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ЗАПОЛНЕНИЯ 2pπ-ВАКАНСИИ С ПОЛУЧЕННОЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО

Как было показано в предыдущем разделе, канал $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$ вносит доминирующий вклад в спектры электронов. Пользуясь формулами (6) и (7), мож-



Рис. 6. Относительный вклад различных каналов оже-распада $2p\pi$ -вакансии при различных энергиях соударения $(a-3 ext{ к>B}, \delta-6.25 ext{ к>B}, s-50 ext{ к>B})$. Отношение вероятности оже-распада для каждого канала W_{chan} к суммарной вероятности W_{sum} . Обозначения каналов: $1 - 3d\pi - 3d\pi$, $2 - 3d\pi - 3d\sigma$, $3 - 3d\sigma - 3d\sigma$, $4 - 3d\pi - 3p\sigma$, $5 - 3d\sigma - 3p\sigma$, $6 - 3p\sigma - 3p\sigma$

но получить суммарную вероятность оже-переходов непосредственно из эксперимента:

$$W\left(R\right) = \frac{\sigma v_0}{fF},\tag{29}$$

где *F* — масштабный фактор доминирующего оже-канала (формула (7)).

На рис. 7 приведены рассчитанные вероятности оже-распада для случаев Ne²⁺–Ne и Ne⁴⁺–Ne, а также оцененные с помощью скейлинга вероятности оже-распада для случаев Ne⁵⁺–Ne и Ne⁶⁺–Ne при использовании в качестве Z_{eff} среднегеометрического значения эффективных зарядов $2p\pi$ - и $3d\pi$ -электронов. Для случая Ne⁶⁺–Ne приведена также кривая минимального значения эффективного заряда для вылетевшего электрона (в этом случае вероятность перехода максимальна, так как достигается максимальное перекрывание волновых функций вы-



Рис. 7. (В цвете онлайн) Зависимости рассчитанной вероятности оже-перехода в квазимолекуле при столкновении $\mathrm{Ne^+-Ne}$ от энергии вылетевшего электрона и степени ионизации частиц при использовании среднегеометрического значения эффективного заряда для убегающего электрона. Для случая $\mathrm{Ne^{6+}-Ne}$ приведено также значение вероятности оже-перехода при использовании минимального значения эффективного заряда. Точки — экспериментальные данные для различных энергий соударения

летевшего электрона и $3d\pi$ -электрона). Экспериментальные значения определены из отношения измеренного сечения к рассчитанному геометрическому фактору.

При энергиях 3 и 4 кэВ наблюдается согласие с расчетом для Ne^{2+} , а при энергии 6.25 кэВ при увеличении энергии оже-электрона, что соответствует более глубокому сближению частиц, происходит переход к случаю Ne^{4+} . При энергии 12.5 кэВ кривая лежит между кривыми для случаев Ne^{4+} и Ne^{6+} . Кривые 25 кэВ и 50 кэВ неплохо согласуются между собой и явно ближе к расчетной кривой вероятности перехода для случая Ne^{6+} при использовании геометрического среднего для эффективного заряда, что находится в соответствии с рекомендацией, высказанной в обзоре [21].

На рис. 8 приведена зависимость среднего числа удаленных электронов $\delta = m + n - 1$ от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Величина δ отличается от рассматриваемой нами степени ионизации сталкивающихся частиц на 1. Используя данные, приведенные на рис. 7, сопоставим диапазоны межъядерных расстояний, где наблюдается эмиссия оже-электронов при определенной степени ионизации сталкивающихся частиц, с данными независимых измерений величины δ .



Рис. 8. Зависимость среднего числа удаленных электронов $\delta = m + n - 1$ от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Звездочками представлены измерения методом совпадений, когда фиксируются заряды обоих партнеров соударения [22]. В экспериментах [23, 24], где фиксировался только заряд налетающей частицы, величина δ вычислялась как $\delta = 2m - 1$, т. е. предполагалось равенство m = n. Сплошной тонкой черной кривой представлена вероятность образования автоионизационного состояния [25]. Числа у кривых указывают энергии в кэВ, при которых проводились измерения. Отрезками прямых показаны интервалы межъядерных расстояний, где наблюдалась эмиссия оже-электронов из квазимолекулы. Рядом с отрезками указана энергия соударения. При энергии 6.25 кэВ δ меняется с 2 до 4

Как видно из рис. 8, при энергиях 3 и 4 кэВ степень ионизации m + n = 2 хорошо согласуется с результатами измерений числа удаленных электронов б. При энергии 6.25 кэВ происходит увеличение степени ионизации с 2 до 4, что удивительно хорошо совпадает с зависимостью $\delta(R)$. При энергиях 12.5-50 кэВ также имеется явная корреляция с величиной δ , хотя полного совпадения нет. В анализируемых нами экспериментах под степенью ионизации мы понимаем влияние ионизованных и возбужденных электронов на экранировку волновых функций в пределе объединенного атома. Возрастание числа возбужденных электронов может завершиться автоионизацией, а может и нет. Измерение величины δ проводилось после разлета частиц, когда процессы релаксации возбуждения уже закончились. Таким образом, наблюдение эмиссии ожеэлектронов позволяет изучать процессы во время соударения (т.е. по аналогии в момент извержения вулкана, а не тогда, когда извержение закончилось, скажем, по потокам застывшей лавы).

8. СПЕКТРОСКОПИЯ КВАЗИМОЛЕКУЛЫ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ ОТ МЕЖЪЯДЕРНОГО РАССТОЯНИЯ

В нашей работе [18] для определения зависимости энергии эмитированного оже-электрона от достигнутого межъядерного расстояния было использовано два обстоятельства.

1. Для каждой энергии соударения, используя потенциал взаимодействия частиц (см., например, [26, 27]), можно рассчитать расстояние наибольшего сближения R_0 , соответствующее соударению при нулевом параметре удара. Точность расчета определяется точностью наших знаний о потенциалах взаимодействия и для случая Ne–Ne составляет 4 %.

2. Нормируя правое крыло расчетного спектра на экспериментальные данные, можно определить значение энергии электрона, соответствующее нулю функции Эйри при расчете спектра при нулевом параметре удара.

В условиях, когда вероятность оже-перехода сильно меняется при изменении межъядерного расстояния, в данную процедуру следует внести следующие коррективы.

1. Учесть, что вероятность перехода не меняется в туннельной области при $R < R_0$, что несколько меняет процедуру расчета интеграла по параметрам удара (6) при моделировании спектра электронов.

2. Сравнивать расчетный масштабный фактор *F* с экспериментальным:

$$F_{exp} = \frac{\sigma v_0}{fW(R)},\tag{30}$$

что позволяет учесть влияние зависимости W(R)на производную правого крыла спектра. Полученные таким образом значения $E_e(R)$ приведены на рис. 10. Существует также возможность получения информации о производной терма из анализа поведения правого крыла спектра в туннельной области. Описывая правое крыло с помощью функции Эйри (6) и варьируя параметр α , можно добиться совпадения наклона расчетного спектра с полученным экспериментально. Из значения параметра α можно определить производную терма, используя формулу (5) при b = 0:

$$\frac{dE_e}{dR} = \frac{4\alpha E_{cms}}{v_0^2 \frac{dU}{dR}}.$$
(31)

Как видно из рис. 9, значения производной терма, полученные разными методами, хорошо согласуются, что лишний раз подтверждает внутреннюю



Рис. 9. Зависимость производной dE_e/dR от межъядерного расстояния R. Темные точки (1) — математическая производная терма, полученного описанным в начале раздела способом, светлые точки (2) — значения производной, полученные из анализа спада правого крыла спектра (величин α)



Рис. 10. Полученная из эксперимента зависимость энергии перехода $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$ от межъядерного расстояния R — кривая 1. Кривая 2 получена интегрированием производной, определенной из значений параметра α . Для сопоставления представлены энергии для данного перехода, полученные из корреляционных диаграмм МО [19] для системы Ne^{q+} -Ne для q = 0, 2, 4

согласованность развиваемого в данном исследовании подхода.

Как видно из рис. 10, полученные из эксперимента энергии перехода $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$ при больших R, что соответствует малым энергиям соударения, хорошо согласуются с теоретическим расчетом для q = 2, а затем имеется тенденция к увеличению степени ионизации.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В целом, несмотря на приближенный характер использованных волновых функций, удается добиться хорошего согласия рассчитанных вероятностей оже-переходов с полученными экспериментально. Это неудивительно, так как основной вклад дают оже-переходы при межъядерных расстояниях вблизи предела объединенного атома.

Имеется отчетливая корреляция наблюдаемой степени ионизации частиц с данными независимых измерений числа удаленных электронов.

Установлена относительная роль различных каналов оже-распада.

Предложен скейлинг для оценки вероятности оже-перехода при различных степенях ионизации.

Сравнение полученных из эксперимента данных о вероятностях оже-переходов при энергиях 25 и 50 кэВ подтверждают правильность гипотезы, что выбор эффективного заряда для эмитированного электрона как среднегеометрического значения эффективных зарядов для внутреннего и внешнего электронов позволяет добиться наилучшего согласия с экспериментом.

Уточнена процедура спектроскопии терма квазимолекулы в условиях сильной зависимости вероятности оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Полученные значения терма хорошо согласуются с теоретическими расчетами.

Сопоставление вероятностей оже-переходов для многоэлектронной системы Ne–Ne с полученными экспериментально проведено впервые. Ранее анализ проводился только для относительно простой квазимолекулы He⁺–He.

Из сравнения рассчитанных и экспериментальных данных однозначно следует вывод о значительном увеличении степени ионизации и возбуждения квазимолекулы в момент наибольшего сближения сталкивающихся атомов с ростом энергии соударения. Вывод, что система из двух сталкивающихся атомов в момент их наибольшего сближения оказывается в высоко возбужденном (сильно «перегретом») состоянии, является довольно естественным. Другое дело, что информацию об этом мы можем получить только, изучая спектр электронов, испущенных в короткий момент существования квазимолекулы, поскольку какие-то возбужденные состояния, возникающие при тесном сближении сталкивающихся атомов за счет их кинетической энергии, при разлете атомов могут адиабатически вернуться в исходное состояние (распасться), не оставив следа. Наши оценки показывают, что вероятность автоионизационному состоянию распасться за время столкновения сильно меняется в зависимости от скорости сближения и разлета частиц от нескольких процентов в столкновениях в диапазоне 10-50 кэВ до весьма значительной величины около $25\,\%$ для столкновений при 3 кэВ. Все же в большинстве своем вакансии доживают до разлета сталкивающихся атомов. Очевидно, что только тогда, когда распад состояния сопровождается эмиссией электрона (или кванта), который уносит энергию из системы, столкновение необратимо становится неупругим. Таким образом, исследования оже-электронов из квазимолекулы позволяют получать информацию о процессах возбуждения и ионизации непосредственно во время соударения.

ЛИТЕРАТУРА

- В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., Письма в ЖЭТФ 24, 33 (1976).
- В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, ЖЭТФ 84, 454 (1983).
- А. З. Девдариани, В. Н. Островский, Ю. Н. Себякин, ЖЭТФ 73, 412 (1977).
- J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup et al., Phys. Rev. A 14, 707 (1976).
- V. K. Nikulin and N. A. Guschina, J. Phys. B 11, 3553 (1978).
- 6. B. Fricke and W.-D. Sepp, J. Phys. B 14, L549 (1981).
- В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **31**, 729 (1980).
- В. Р. Асатрян, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ 44, 454 (1986).

- Л. М. Кишиневский, Е. С. Парилис, ЖЭТФ 55, 1932 (1968).
- 10. L. M. Kishinevsky, B. G. Krakov, and E. S. Parilis, Phys. Lett. A 85, 141 (1981).
- 11. E. J. McGuire, Phys. Rev. A 3, 587 (1971).
- 12. V. Sidis, J. Phys. B 6, 1188 (1973).
- **13**. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, Москва (2019).
- 14. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. A 74, 042720 (2006).
- S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A 84, 032706 (2011).
- J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. 104, 033201 (2010).
- L. Ph. H. Schmidt, C. Goil, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. 112, 083201 (2014).
- А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, ЖЭТФ 159, 56 (2021).
- 19. J. Eichler and U. Wille, Phys. Rev. A 11, 1973 (1975).
- **20**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механи*ка, Наука, Москва (1989).
- W. Bambynek, B. Crasemann, and R. W. Fink, Rev. Mod. Phys. 44, 716 (1972).
- 22. Q. C. Kessel, M. P. McCaughey, and E. Everhart, Phys. Rev. 153, 57 (1967).
- 23. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba et al., Phys. Rev. 107, 704 (1957).
- 24. P. R. Jones, P. Costigan, and G. Van Dyk, Phys. Rev. 129, 211 (1963).
- 25. D. J. Bierman and W. C. Turkenburg, Physica 67, 533 (1973).
- 26. А. Н. Зиновьев, ЖТФ 78, 15 (2008).
- 27. A. N. Zinoviev and K. Nordlund, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 406, 511 (2017).

ЗАКОН КИРХГОФА В ИЗЛУЧЕНИИ СМЕСИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ

Д. А. Жиляев, Б. М. Смирнов*

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 июля 2021 г., после переработки 2 июля 2021 г. Принята к публикации 7 июля 2021 г.

Рассмотрено взаимодействие между молекулами разного сорта через создаваемое ими тепловое излучение за счет перекрытия спектральных линий. Это излучение является результатом переходов между колебательными и вращательными состояниями молекул. Показано, что рассматриваемое взаимодействие управляется законом Кирхгофа, согласно которому каждая молекула является одновременно излучателем и поглотителем. Закон Кирхгофа лежит в основе анализа парникового эффекта в атмосфере вместе с данными банка HITRAN, который содержит информацию о параметрах излучательных переходов для многих молекул. В компьютерной программе, лежащей в основе данного анализа, используются излучательные параметры примерно двух тысяч спектральных линий, взятые из банка данных HITRAN. Рассмотренный аспект парникового эффекта в атмосфере Земли связан с изменением потока излучения на поверхность Земли в результате изменения концентрации одной из парниковых компонент. При анализе этой проблемы в рамках универсальных климатологических моделей, которые представляют собой сложные компьютерные программы с учетом основных и второстепенных атмосферных факторов, взаимодействием между парниковыми компонентами через создаваемое ими излучение пренебрегается, т.е. закон Кирхгофа игнорируется. Показано, что в случае, если изменяемой компонентой является углекислый газ, это приводит к ошибке примерно в 5 раз. Если этой компонентой являются молекулы атмосферной воды, это ведет к ошибке в 3 раза. В случае изменения концентрации двуокиси азота это дает завышение потока излучения в 2 раза, а в случае озона изменение потока излучения, создаваемого молекулами озона, а также изменение суммарного потока излучения совпадают. Как следует из проведенного анализа, рассматриваемый эффект связан с положением спектров молекул и скоростью излучательных переходов между состояниями молекул. Это подчеркивает важную роль банка данных HITRAN для решения рассматриваемых проблем.

DOI: 10.31857/S0044451021120051

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно закону Кирхгофа [1], каждая частица-излучатель одновременно является и поглотителем. По сути дела этот закон отражает принцип детального равновесия для процессов излучения и поглощения [2,3], который устанавливает связь между скоростями излучения и поглощения. Далее в качестве поглощающей среды мы рассматриваем смесь молекулярных газов, т. е. газ, состоящий из молекул разного сорта. Характер поглощения этой среды в заданной точке описывается коэффициентом поглощения k_{ω} для излучения на данной частоте ω , согласно определению которого величина $1/k_{\omega}$ является длиной свободного пробега для фотонов данной частоты в рассматриваемой среде. Опираясь на закон Кирхгофа или принцип детального равновесия, при анализе процессов эмиссии мы используем в качестве параметра, описывающего эмиссию газа молекул, коэффициент поглощения k_{ω} .

При анализе процессов излучения и поглощения в смеси разных атомов или молекул, т.е. частиц, имеющих разные спектры поглощения, закон Кирхгофа ответственен также за взаимодействие разных компонент в излучательных процессах. Для рассматриваемой газовой системы, содержащей молекулы разного сорта, можно определить потоки теплового излучения, выходящего за пределы этого га-

^{*} E-mail: bmsmirnov@gmail.com

за, на данной частоте за счет каждой компоненты. Теперь давайте изменим концентрацию молекул определенного сорта. Это приведет к изменению потока излучения, создаваемого молекулами данного сорта. Имеется соблазн принять его за изменение полного потока излучения. Однако это справедливо только для оптически-разреженного газа, т.е. если длина пробега фотонов на данной частоте за счет поглощения другими компонентами велика по сравнению с размером газовой системы. Если же это условие не выполняется, следует учесть закон Кирхгофа, согласно которому другие компоненты становятся в данном случае поглотителями. Это означает, что при описываемых условиях наряду с увеличением потока излучения на данной частоте за счет рассматриваемой компоненты имеет место уменьшение потока излучения, создаваемого другими компонентами, поскольку оно частично поглощается введенными в систему новыми молекулами.

К сожалению, законом Кирхгофа в рассматриваемой форме пренебрегается в климатологических моделях при анализе парникового эффекта в атмосфере Земли и его изменений [4-10]. Климатологические модели представляют собой сложные компьютерные программы, целью которых является описать поведение всех параметров атмосферы в каждой точке пространства. Один из блоков такой программы — расчет излучательных параметров атмосферы. В силу сложности системы в этом блоке закон Кирхгофа проигнорирован, т.е. пренебрегается взаимодействием между отдельными сортами молекул через поле излучения. Это приводит к неправильным выводам об эволюции теплового состояния нашей планеты. Эти выводы положены в основу парижского соглашения по климату, что формирует ошибочное представление об изменении климата и факторах, влияющих на это изменение. Впрочем, такая же ситуация возникает и в других случаях, когда пренебрегается физическими принципами. Далее мы не будем касаться этой стороны проблемы и поставим своей задачей выяснить, к какой ошибке может привести игнорирование закона Кирхгофа при анализе эмиссии газа, состоящего из молекул разного сорта.

Сосредоточим внимание на алгоритме вычисления потока излучения из плоского слоя слабонеоднородного газа, содержащего молекулы разного сорта. Нашей задачей является определение потока излучения, создаваемого в газе, содержащем излучающие и поглощающие молекулы разного сорта. Для определенности будем ориентироваться на атмосферу Земли, моделируя ее плоским слабонеоднородным слоем газа. Поскольку давление воздуха в этом случае порядка атмосферного, имеем, что ширина отдельной спектральной линии, которая создается в результате определенного колебательно-вращательного или вращательного перехода молекул, мала по сравнению с разностью частот для соседних спектральных линий. Это означает, что спектр излучения слоя рассматриваемого молекулярного газа в инфракрасной области спектра состоит из большого числа пиков, и для анализа потока излучения за пределы молекулярного газа необходимо использовать модель «линия за линией» [11, 12], которая требует анализа параметров излучения на каждой частоте отдельно.

Рассматриваемое взаимодействие молекул разного сорта, которое основано на законе Кирхгофа, использует тот факт, что излучение молекул одного сорта может поглощаться молекулами другого сорта и наоборот. Это означает, что рассматриваемое взаимодействие определяется перекрытием спектров разных молекул, и для его анализа требуется подробная информация как о поведении спектров молекул, так и о параметрах излучательных переходов для этих молекул. Поэтому важное значение для рассматриваемых процессов является банк данных HITRAN [13,14], благодаря которому такая информация доступна. Отметим, что существование банка данных HITRAN отражает уровень современной квантовой теории излучения и позволяет решать задачи, не возможные до его создания.

2. ПОТОК ИЗЛУЧЕНИЯ ИЗ ПЛОСКОГО СЛОЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ГАЗА

Нашей задачей является нахождение потоков излучения со стороны слоя молекулярного газа, моделирующего атмосферу, и выяснить роль закона Кирхгофа для этой задачи. Прежде чем анализировать параметры излучения слоя газа, представим примеры, где реализуется данная физическая ситуация. Рассмотрим сначала пожар на складе или горение леса, которое происходит на относительно больших площадях. В этом случае существенную роль в тепловом балансе воздуха, находящегося над горячей поверхностью, играет излучение, создаваемое горячим воздухом при участии оптически-активных компонент воздуха и продуктов сгорания. Другой пример относится к парниковому эффекту в атмосфере Земли, тепловое излучение которой создают примеси, включающие, главным образом, молекулы воды и микрокапли воды, из которых состоят облака, а также молекулы углекислого газа, тогда как основная часть воздуха в виде молекул азота и кислорода является буферной средой. На последнем примере будет демонстрироваться роль закона Кирхгофа в процессе эмиссии слоя газа, содержащего разные молекулы.

Далее мы представим выражение для потока излучения плоского слоя, содержащего смесь молекулярных газов [15]. Характер эмиссии из плоского слоя молекулярного газа определяется оптической толщиной u_{ω} слоя для данной частоты излучения ω :

$$u_{\omega} = \int_{0}^{h} k_{\omega} dz, \qquad (2.1)$$

где h — высота, отсчитанная от границы, и интеграл берется по всей высоте слоя. Будем считать сначала, что температура T слоя не меняется с высотой. Тогда поток излучения J_{ω} из рассматриваемого слоя газа для данной частоты излучения ω составляет [16,17]

$$J_{\omega} = I_{\omega}(T)g(u_{\omega}), \qquad (2.2)$$

где $I_{\omega}(T)$ — равновесный поток излучения из плоского слоя, который определяется формулой Планка [18, 19]

$$I_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2 \left[\exp\left(\hbar\omega/T\right) - 1\right]}.$$
 (2.3)

Входящий в формулу (2.2) фактор непрозрачности слоя $g(u_{\omega})$ дается выражением [16,17]

$$g(u_{\omega}) = 2 \int_{0}^{1} \cos\theta \, d\cos\theta \left[1 - \exp\left(-\frac{u_{\omega}}{\cos\theta}\right)\right] \quad (2.4)$$

и представляет собой вероятность того, что фотон данной частоты ω , возникающий на одной из границ и направленный к другой границе, не достигнет ее, поглотившись по дороге. При этом сам акт рождения фотона молекулой является изотропным.

Теперь рассмотрим излучение атмосферы Земли, моделируя ее слабонеоднородным слоем газа. Слабая неоднородность слоя означает, что относительное изменение температуры в слое невелико, т.е. имеется малый параметр, и выражение для потока излучения J_{ω} , создаваемого атмосферой Земли, может быть представлено в виде разложения по этому малому параметру. В результате выражение для потока излучения описывается модифицированной формулой (2.2), представленной в виде [20, 21]

$$J_{\omega} = I_{\omega}(T_{\omega})g(u_{\omega}), \qquad (2.5)$$

где T_{ω} — эффективная температура излучения слоя для данной частоты, и величина потока излучения может быть найдена в результате разложения по малому параметру. Эта операция представлена в работах [20, 21].

При анализе излучения, создаваемого атмосферой Земли, воспользуемся моделью стандартной атмосферы [22], в рамках которой параметры атмосферы усреднены как по поверхности Земли, так и по времени. При этом основными парниковыми компонентами атмосферы являются молекулы воды и углекислого газа, а также микрокапли воды, которые образуют облака. Распределение плотности молекул воды и углекислого газа по высотам следует из модели стандартной атмосферы [22], а также на основе последующих измерений. Излучательные параметры молекул, включающие скорости перехода между колебательными или вращательными состояниями молекул, а также параметры уширения спектральных линий берутся из банка данных HITRAN [13,14], который суммирует результаты измерений и вычислений.

Следует отметить важное значение этого банка для спектроскопических вычислений. Квантовая теория излучения, которая могла бы быть использована для анализа рассматриваемых процессов излучения молекул, относится только к симметричным молекулам и позволяет представить результаты в аналитическом виде (например, регулярная модель или модель Эльзассера [23]). Появление банка HITRAN изменило наши возможности при выполнении спектроскопических расчетов. Короче, опираясь на данные банка HITRAN [13, 14], можно определить сечение поглощения фотона на данной частоте, а на основе пространственного распределения молекул можно определить поток излучения, выходящий из плоского слоя газа, содержащего эти молекулы, в соответствии с формулой (2.2). Тем самым банк HITRAN, содержащий данные по излучательным параметрам молекул, включая уширение спектральных линий, является важным инструментом современной молекулярной спектроскопии, который позволил сделать существенный шаг при анализе излучательных параметров газа молекул. Конечно, это потребовало создания специального математического аппарата, в формате которого представлены данные банка HITRAN [24,25].

3. ОБЛАКА В ЭМИССИИ АТМОСФЕРЫ

Нашей задачей является определить ошибку, к которой приводит игнорирование закона Кирхгофа, как это делается в климатологических моделях. Для этого необходимо сформулировать модель излучающей атмосферы. Эта модель была представлена в монографии [26], где на ее основе были выполнены расчеты излучательных параметров атмосферы в области спектра до 1200 см⁻¹. Это позволило проанализировать характер излучения атмосферы, связанный с изменениями концентрации молекул углекислого газа. В данной работе мы расширили рассматриваемый спектр до 2600 см⁻¹. За пределами этого спектра остается примерно 0.1% потока излучения, создаваемого абсолютно черным телом с температурой поверхности Земли. Включение в рассмотрение более 2000 спектральных линий из банка данных HITRAN дает возможность проанализировать изменения излучения, связанные не только с парниковыми компонентами, но и с участием так называемых следовых компонент, суммарный вклад которых в поток излучения атмосферы составляет примерно 1%.

Отметим, что три основные парниковые компоненты атмосферы, именно, молекулы воды и углекислого газа, а также микрокапли воды, образующие облака, в сумме определяют более 99% потока излучения атмосферы. Что касается молекулярных парниковых компонент, то, как было сказано выше, при заданном профиле температуры и плотностей молекул на основании данных из банка HITRAN можно определить потоки инфракрасного излучения атмосферы для каждой компоненты и при каждой частоте. При этом слой излучающего газа считается плоским, что соответствует предположению, что характерные размеры в горизонтальном направлении, на которых заметно меняются параметры пространственного распределения плотностей молекул и температуры, заметно превышают размер вертикальной области, ответственной за формирование излучения. Реально это условие выполняется.

Однако в случае излучения облаков мы не обладаем необходимой информацией, позволяющей определить связанные с ними потоки излучения атмосферы с той же точностью, которая относится к молекулярным компонентам. Конденсация воды в атмосфере происходит при смешивании потока теплого влажного воздуха из нижних слоев атмосферы с холодным воздухом верхнего слоя под действием вертикального ветра, т. е. в результате неравновесного процесса. Это редкий процесс, и поэтому атмосферная вода состоит в основном из молекул воды, а конденсированная фаза воды в атмосфере составляет малую часть атмосферной воды. Более того, модель стандартной атмосферы [22] исключает конденсированную фазу воды в атмосфере.

Тем не менее облака вносят определенный вклад в излучение атмосферы, так что полный поток излучения из атмосферы на поверхность Земли, который следует из энергетического баланса Земли, включает излучение облаков. Облака разделяют тропосферу на верхнюю и нижнюю части, так что нижняя часть отвечает за излучение атмосферы на поверхность Земли, а в верхней части тропосферы создается инфракрасное излучение, уходящее за пределы атмосферы. При этом оптическая толщина облаков достаточна, чтобы верхняя и нижняя части тропосферы не влияли друг на друга. В рамках модели атмосферы [26], описывающей излучение атмосферы на поверхность Земли, облака находятся на некоторой высоте h_{cl} , и их излучение соответствует абсолютно черному телу, температура которого T_{cl} совпадает с температурой воздуха на этой высоте. При этом поток излучения, создаваемого облаками, является разностью между полным потоком излучения атмосферы, который следует из энергетического баланса Земли, и потоком излучения за счет молекул воды и углекислого газа, который может быть вычислен на основе данных банка HITRAN. Ранее [26] в качестве энергетического баланса Земли были использованы данные по программе NASA, выполненные полвека назад [27]. Теперь для этой цели привлечены другие версии энергетического баланса Земли и ее атмосферы.

Среди дополнительных источников для энергетического баланса Земли и ее атмосферы мы используем вариант, приведенный в книге Сэлби [28]. Эта версия наряду с данными, полученными NASA, использует результаты дополнительных измерений эмиссии атмосферы. Кроме того, используются данные работ [29–32], выполненные в рамках международного метеорологического общества, а также энергетический баланс Земли, построенный в работах [33,34]. Ниже мы используем параметры энергетического баланса Земли и ее атмосферы на основе статистического усреднения параметров для каждого из указанных вариантов энергетического баланса Земли.

Используемая модель эмиссии атмосферы в рамках модели «линия за линией» ведет к следующему выражению для потока излучения атмосферы J_{ω} на данной частоте излучения ω :

$$J_{\omega} = I_{\omega}(T_{\omega})g(u_{\omega}) + I_{\omega}(T_{cl})[1 - g(u_{\omega})].$$
(3.1)

Первое слагаемое правой части уравнения дается формулой (2.5) и описывает излучение молекул атмосферы. Второе слагаемое относится к эмиссии облаков, которые в рамках данной модели излучают

Источник	$J_{\downarrow},\mathrm{Bt}/\mathrm{m}^2$	$J_m,{ m Bt}/{ m m}^2$	$J_{cl},{ m Bt}/{ m m}^2$	$h_{cl},$ км	$T_{cl},{ m K}$
[26]	327	233	94	4.3	266
Эта работа	335 ± 7	272 ± 7	63 ± 7	4.6 ± 0.7	258 ± 6

Таблица 1. Параметры энергетического баланса Земли и атмосферы, а также средние параметры облаков для глобальной атмосферы

как абсолютно черное тело с температурой воздуха T_{cl} в области атмосферы, где находятся облака. Это излучение достигает поверхности Земли с вероятностью $1 - g(u_{\omega})$. Отсюда получим интегральное соотношение для суммарного потока излучения J_{\downarrow} из атмосферы на поверхность Земли:

$$J_{\downarrow} = \int J_{\omega} d\omega =$$

=
$$\int [I_{\omega}(T_{\omega})g(u_{\omega}) + I_{\omega}(T_{cl})][1 - g(u_{\omega})] d\omega. \quad (3.2)$$

Этот поток можно разделить на две части:

$$J_{\downarrow} = J_m + J_{cl}, \qquad (3.3)$$

где

$$J_m = \int I_{\omega}(T_{\omega})g(u_{\omega}) \, d\omega,$$

$$J_{cl} = \int I_{\omega}(T_{cl})[1 - g(u_{\omega})] \, d\omega$$

При этом поток излучения J_m на поверхность Земли создается оптически-активными молекулами атмосферы, т. е. определяется главным образом атмосферными молекулами воды и углекислого газа, а поток излучения J_{cl} является результатом излучения микрокапель воды, из которых состоят облака. Как и в случае атмосферных молекул, излучение микрокапель воды происходит при условии термодинамического равновесия между полем излучения и молекулами воздуха.

На самом деле соотношение (3.3) является уравнением для определения высоты h_{cl} нахождения облаков, а также температуры T_{cl} области атмосферы, где находится граница облаков. Параметры этих формул представлены в табл. 1 и получены на основе указанных выше данных.

4. ЗАКОН КИРХГОФА ДЛЯ СТАНДАРТНОЙ АТМОСФЕРЫ

Далее мы продемонстрируем роль закона Кирхгофа для парникового эффекта, т.е. для излучения атмосферы Земли. Для этой цели разработана компьютерная программа на основе представленного выше алгоритма, которая использует данные по излучательным переходам из банка HITRAN для парниковых молекул H_2O и CO_2 , а также для молекул следовых компонент N_2O , CH_4 и O_3 . В общей сложности учтено более двух тысяч спектральных линий. Разработанная компьютерная программа в рамках модели стандартной атмосферы позволяет рассчитать как потоки излучения, падающего на поверхность Земли, так и их зависимости от частоты излучения. Отсюда можно определить также изменения парциальных и интегральных потоков излучения атмосферы на поверхность Земли при изменении состава атмосферы.

Влияние закона Кирхгофа на изменение потока излучения из атмосферы на поверхность Земли в результате изменения состава атмосферы, которое связано с перекрытием спектров этих компонент, удобнее продемонстрировать на следовых компонентах, поскольку они действуют в ограниченной области спектра. Рассмотрим далее характер взаимодействия излучения с молекулами метана, центр полосы поглощения которых находится на частоте 1306 см⁻¹, а также с молекулами двуокиси азота, для которых две полосы поглощения находятся при частотах 1285 см⁻¹ и 2224 см⁻¹.

На рис. 1–3 приведены значения оптической толщины атмосферы для отдельных оптически-активных компонент в области полос поглощения для рассматриваемых следовых компонент атмосферы. Современная концентрация следовых компонент в атмосфере составляет 1.9 ppm [35] для молекул метана в атмосфере, а также 0.29 ppm [36, 37] для молекул двуокиси азота. Как следует из этих рисунков, в рассматриваемых областях спектра перекрываются спектральные линии поглощения, относящиеся к разным компонентам.

Как следует из рис. 1 и 2, в области спектра, где поглощают молекулы метана и двуокиси азота, имеет место перекрытие спектров разных оптически-активных молекул. Это и определяет влияние разных молекул на изменение потока излучения из атмо-



Рис. 1. (В цвете онлайн) Оптическая толщина u_{ω} для слоя атмосферы, находящегося между поверхностью Земли и облаками, для молекул CH_4 , N_2O и H_2O в области спектра поглощения молекул метана. Высота облаков берется равной $h_{cl} = 4.6$ км, прямая линия $u_{\omega} = 2/3$ разделяет области низкой и высокой оптических толщин атмосферы для данной компоненты



Рис. 2. (В цвете онлайн) Оптическая толщина u_{ω} для слоя атмосферы, находящегося между поверхностью Земли и облаками, для оптически-активных молекул в области второй полосы поглощения молекул двуокиси азота. Высота облаков берется равной $h_{cl} = 4.6$ км, прямая линия $u_{\omega} = 2/3$ разделяет области низкой и высокой оптических толщин атмосферы для данной компоненты

сферы в этих областях спектра. В частности, пренебрежение поглощением молекул воды на крыле спектра эмиссии атмосферы в работе [26] привело к завышенному вкладу в поток излучения со стороны молекул N_2O , хотя и в этом случае он не превышал одного процента от полного потока излучения из атмосферы на поверхность Земли. Отметим, что спектроскопической единицей частоты, как и энергии фотона, является см⁻¹, так что обратной величиной является длина волны.

Таким образом, имеются две полосы поглощения для молекул N_2O в области спектра теплового излучения атмосферы Земли. Нижняя полоса, связанная с деформационными колебаниями молекулы, перекрывается со спектром поглощения молекул метана и воды, а вторая полоса поглощения, кото-



Рис. 3. (В цвете онлайн) Оптическая толщина u_{ω} слоя атмосферы, находящегося между поверхностью Земли и облаками, для оптически-активных молекул в области полосы поглощения молекул озона. Вклад атмосферной воды в оптическую толщину атмосферы отмечен черным, углекислого газа — красным, озона — синим и коричневым соответственно для его современного и удвоенного содержания в атмосфере. Высота облаков равна $h_{cl} = 4.6$ км, прямая линия $u_{\omega} = 2/3$ разделяет области низкой и высокой оптических толщин атмосферы для данной компоненты

рая отвечает антисимметричным колебаниям молекулы, перекрывается со спектрами поглощения молекул воды и углекислого газа. Удвоение концентрации молекул двуокиси азота приводит к меньшему увеличению суммарного потока излучения атмосферы в сторону поверхности Земли по сравнению с ростом потока излучения, создаваемого молекулами двуокиси азота в области полосы поглощения этих молекул.

Данные табл. 2 демонстрируют общие принципы характера изменения потоков излучения благодаря эмиссии молекул каждого сорта в случае изменения концентрации молекул определенного сорта. Именно, увеличение концентрации молекул данного сорта приводит к относительно меньшему росту потока излучения за счет молекул этого сорта и еще меньшему относительному увеличению суммарного потока излучения атмосферы на поверхность Земли. Это изменение приводит к уменьшению вклада других компонент в суммарный поток излучения атмосферы.

При этом отметим, что представленный выше пример является демонстрацией оптического взаимодействия разных компонент, но не играет роли в излучении атмосферы. Действительно, взяв глобальную температуру, т. е. среднюю температуру поверхности Земли, равной $T_E = 288$ К и считая, что Земля излучает как абсолютно черное тело, полу**Таблица 2.** Потоки излучения, создаваемые указанной молекулярной компонентой и облаками из атмосферы на поверхность Земли, в области полосы поглощения молекулы N₂O при частотах между 2170 и 2280 см⁻¹ при разных условиях для атмосферы (потоки выражены в единицах BT/м²)

Состояние	N_2O	$\rm H_2O$	CO_2	Облака	Суммарный поток
Стандартная атмосфера Сухая атмосфера	$0.24 \\ 0.26$	$\begin{array}{c} 0.056 \\ 0 \end{array}$	$0.053 \\ 0.054$	$0.053 \\ 0.061$	$\begin{array}{c} 0.41 \\ 0.38 \end{array}$
Удвоение концентрации молекул CO ₂	0.24	0.055	0.068	0.049	0.42
Удвоение концентрации молекул N_2O	0.32	0.048	0.051	0.035	0.46

Таблица 3. Вклад отдельных оптически-активных компонент атмосферы в суммарный поток излучения из атмосферы на поверхность Земли в области полосы поглощения молекул озона при частотах между 990 и 1070 см⁻¹ и при указанном составе атмосферы (потоки выражены в единицах Вт/м²)

Состояние	O_3	H_2O	$\rm CO_2$	Облака	Суммарный поток
Стандартная атмосфера	0.84	1.4	0.48	9.1	11.8
Сухая атмосфера	3.4	0	0.62	9.8	13.8
Удвоение концентрации молекул О ₃	1.9	1.4	0.52	8.7	12.5

чим, что поток излучения в данном интервале частот равен 0.68 BT/m^2 по сравнению с полным потоком излучения с поверхности Земли, равным примерно 390 BT/m^2 . Это показывает также, что полный поток излучения атмосферы на поверхность Земли, создаваемый следовыми молекулами, относительно мал и не превышает 1%. Излучательная температура стандартной атмосферы в этой области частот составляет 272 К.

Имеется еще одна следовая компонента — озон, которая дает вклад в суммарный поток излучения атмосферы на поверхность Земли, сравнимый со вкладом других следовых компонент. Концентрация тропосферного озона в атмосфере на порядок ниже, чем для двуокиси азота и составляет 20–30 ppb [38]. Однако полоса поглощения молекулы озона с центром около 1042 см⁻¹ попадает как в область максимальной эмиссии для теплового излучения, так и в область прозрачности атмосферы. Хотя плотность стратосферного озона существенно выше, чем тропосферного, излучение стратосферы не достигает поверхности Земли, поглощаясь по пути облаками.

Таблица 3 для оптических свойств атмосферы в области полосы поглощения молекул озона является аналогом табл. 2 для полосы поглощения молекул двуокиси азота. Данные этой таблицы, как и рис. 3, относятся к концентрации молекул озона, равной 25 ppb для стандартной атмосферы и 50 ppb для атмосферы с удвоенной концентрацией молекул озона. Поскольку оптическая толщина атмосферы за счет молекул озона значительно меньше единицы, вклад молекул озона в суммарный поток излучения атмосферы меняется пропорционально изменению плотности молекул озона, если в этой области спектра основную роль играют молекулы озона.

Далее, несмотря на относительно низкую концентрацию молекул озона в атмосфере, вклад озона в эмиссию атмосферы сравним со вкладом за счет других следовых оптически-активных молекулярных компонент атмосферы. В этом случае низкая концентрация молекул озона в тропосфере компенсируется выгодной для эмиссии областью спектра, а также прозрачностью атмосферы в этой области спектра.

Очевидно, основные изменения парникового эффекта связаны с основными молекулярными компонентами, именно, с молекулами углекислого газа и молекулами воды. В случае молекул углекислого газа обычно сравниваются глобальные температуры при современной и удвоенной концентрациях этих молекул. Поэтому далее мы будем использовать это изменение концентрации молекул углекислого газа как меру его влияния на глобальную температуру. Изменение концентрации молекул углекислого газа прежде всего отражается на излучательной температуре атмосферы. При этом изменение глобальной температуры за счет изменения концентрации молекул углекислого газа мало вблизи центров полос поглощения, связанных с соответствующими колебательными переходами. В частности, это имеет место для наиболее сильного колебательного перехода молекулы углекислого газа при нормальных условиях, который происходит между основным и нижним деформационным колебательными состояниями молекулы углекислого газа с центром при частоте 667 см $^{-1}$. Такая же ситуация наблюдается в области частот, отвечающих центрам наиболее сильных колебательных переходов, — излучательная температура близка к температуре поверхности Земли.

Поэтому основной вклад в изменение излучательной температуры атмосферы и, соответственно, в изменение потока излучения атмосферы на поверхность Земли вносят области частот, где оптическая толщина атмосферы порядка единицы. Кроме того, определенный вклад в изменение излучательной температуры и, соответственно, в изменение потока излучения, испускаемого находящимися в атмосфере молекулами углекислого газа, дают области лазерных переходов вблизи длин волн 9.4 мкм и 10.6 мкм, поскольку лазерные переходы находятся в области прозрачности атмосферы. В то же время вклад лазерных переходов для молекул углекислого газа в поток излучения, создаваемого молекулами углекислого газа, составляет примерно 2 %.

На рис. 4 представлена частотная зависимость потока излучения, который создается молекулами углекислого газа при частотах ниже указанной, а также разность потоков излучения, создаваемых этими молекулами, для удвоенной и современной концентраций молекул углекислого газа в атмосфере. Как видно, рост потока излучения происходит более или менее монотонно по мере роста частоты, тогда как разность потоков для разных концентраций атмосферного углекислого газа увеличивается скачками вблизи границ для соответствующих полос поглощения. На рис. 5 сравниваются изменения потока излучения атмосферы на поверхность Земли, создаваемого молекулами углекислого газа, и суммарного потока излучения атмосферы.

Теперь проанализируем характер изменения потоков излучения, создаваемых разными парниковыми компонентами, с точки зрения закона Кирхгофа. Введем в рассмотрение три основные парниковые компоненты, именно, молекулы воды, молекулы углекислого газа и микрокапли воды, которые



Рис. 4. Поток излучения $J_{\downarrow}(\text{CO}_2)$ из атмосферы на поверхность Земли, создаваемый находящимися в атмосфере молекулами CO_2 , при современной концентрации молекул CO_2 в атмосфере (темные значки) и его изменение при удвоении концентрации молекул углекислого газа в атмосфере, Δ_c (светлые значки), в соответствии с его определением согласно формуле (4.1). Кружки отвечают работе

[26], квадраты относятся к данной работе



Рис. 5. Изменения потоков излучения из атмосферы на поверхность Земли, определенные в соответствии с формулой (4.1), при удвоении концентрации молекул углекислого газа в атмосфере от его текущего значения. Здесь Δ_c — изменение потока излучения, создаваемого молекулами углекислого газа (светлые значки), Δ — изменение суммарного потока инфракрасного излучения из атмосферы на поверхность Земли (темные значки). Кружки связаны с расчетами работы [26], а квадраты соответствует расчетам, проведенным в данной работе

образуют облака. Обозначим посредством Δ_c , Δ_w и Δ_d изменения потоков излучения, создаваемых соответственно молекулами углекислого газа, воды и микрокаплями воды при изменении концентрации молекул углекислого газа в атмосфере. Тем самым мы вводим их согласно соотношениям

$$\Delta_{c} = \int [J'_{\omega}(\mathrm{CO}_{2}) - J_{\omega}(\mathrm{CO}_{2})] d\omega,$$

$$\Delta_{w} = \int [J'_{\omega}(\mathrm{H}_{2}\mathrm{O}) - J_{\omega}(\mathrm{H}_{2}\mathrm{O})] d\omega, \qquad (4.1)$$

$$\Delta_{d} = \int [J'_{\omega}(\mathrm{drop}) - J_{\omega}(\mathrm{drop})] d\omega,$$

где $J_{\omega}(CO_2)$, $J_{\omega}(H_2O)$ и $J_{\omega}(drop)$ — потоки излучения из атмосферы на поверхность Земли, которые создаются указанными компонентами при текущей концентрации молекул углекислого газа, а потоки излучения $J'_{\omega}(CO_2)$, $J'_{\omega}(H_2O)$ и $J'_{\omega}(drop)$ отвечают повышенной концентрации углекислого газа. Изменение суммарного потока излучения Δ из атмосферы на поверхность Земли составляет

$$\Delta = \Delta_c + \Delta_w + \Delta_d. \tag{4.2}$$

Отметим, что компьютерная программа, используемая в работе [26], относится к области частот от 0 до 1200 см⁻¹. Хотя этот диапазон частот включает лишь часть интервала частот, ответственного за тепловое излучение атмосферы, он достаточен для анализа излучения, связанного с молекулами углекислого газа, поскольку спектр теплового излучения молекул углекислого газа сосредоточен внутри этого диапазона. Поэтому результаты данной работы с более широкой областью исследованных частот от 0 до 2600 см $^{-1}$ должны быть близки к результатам расчетов работы [26]. Действительно, сравнение этих результатов, приведенное на рис. 4 и 5, показывает, что различие проинтегрированных по частотам потоков излучения не превышает 7 %. Интересующие нас интегральные потоки излучения из атмосферы на поверхность Земли, средние по двум группам расчетов, равны

$$\Delta = 1.4 \; {
m Bt/m}^2, \quad \Delta_c = 7.2 \; {
m Bt/m}^2.$$
 (4.3)

Проведенные расчеты позволяют определить ошибку, которая следует из пренебрежения законом Кирхгофа. Эта ошибка сопровождает, в частности, климатологические модели. Действительно, если пренебречь перекрытием спектра молекул углекислого газа со спектрами молекул воды и микрокапель воды, то изменение потока излучения Δ_c , создаваемого молекулами углекислого газа, совпадает с изменением суммарного потока излучения Δ . При реальных спектрах и излучательных параметрах парниковых компонент для отношения изменений излучательных потоков имеем

$$\Delta_c / \Delta = 5.2 \pm 0.2. \tag{4.4}$$

Кроме того, используя линейную зависимость суммарного потока излучения J_{\downarrow} из атмосферы на поверхность Земли от концентрации молекул углекислого газа в атмосфере $c(CO_2)$, которая следует из расчетов, удобно представить формулу (4.3) в виде

$$\frac{\partial J_{\downarrow}}{\partial \ln c(\mathrm{CO}_2)} = \frac{\Delta}{\ln[c'(\mathrm{CO}_2)/c(\mathrm{CO}_2)]} = 2 \frac{\mathrm{Br}}{\mathrm{M}^2}, \quad (4.5)$$

где $c(CO_2)$ — текущая концентрация молекул углекислого газа в атмосфере, $c'(CO_2)$ — измененная концентрация атмосферных молекул углекислого газа, Δ — изменение суммарного потока инфракрасного излучения из атмосферы на поверхность Земли при данном изменении концентрации атмосферных молекул углекислого газа.

На основе используемой компьютерной программы для спектра теплового излучения в области от 0 до 2600 см⁻¹ в данной работе мы также определили роль закона Кирхгофа при изменении концентрации молекул воды в атмосфере. При этом, как и ранее, мы считаем, что изменения концентрации молекул в атмосфере сохраняют температуру излучения облаков, т.е. температура границы облаков сохраняется при этом изменении. Поэтому изменение создаваемого облаками потока излучения на поверхность Земли связано только с экранировкой этого потока дополнительными молекулами, введенными в атмосферу. Применяя ранее проведенные операции для атмосферного углекислого газа к молекулам воды в атмосфере, в случае изменения концентрации молекул воды в атмосфере получим

$$\Delta_w / \Delta = 3.2 \pm 0.1, \tag{4.6}$$

где Δ_w — изменение потока излучения из атмосферы на поверхность Земли, создаваемого молекулами воды, Δ — изменение суммарного потока инфракрасного излучения. В дополнение к этому для изменения потока излучения в результате изменения концентрации атмосферной воды имеем

$$\frac{\partial J_{\downarrow}}{\partial \ln c(\mathrm{H}_{2}\mathrm{O})} = \frac{\Delta}{\ln[c'(\mathrm{H}_{2}\mathrm{O})/c(\mathrm{H}_{2}\mathrm{O})]} = 7 \frac{\mathrm{B}_{\mathrm{T}}}{\mathrm{M}^{2}}, \quad (4.7)$$

где $c(H_2O)$ — текущая концентрация атмосферных молекул воды, $c'(H_2O)$ — измененная концентрация молекул воды в атмосфере. Отсюда следует, что молекулы углекислого газа примерно на порядок эффективнее молекул воды с точки зрения формирования суммарного потока излучения на поверхность Земли, поскольку концентрация молекул углекислого газа в стандартной атмосфере почти в 40 раз ниже концентрации атмосферных молекул воды.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показывает важность закона Кирхгофа для процессов излучения смеси молекулярных газов. Его роль проявляется во влиянии не только углекислого газа на парниковый эффект [39, 40], но и разных компонент молекулярных смесей. При этом, поскольку закон Кирхгофа занимает важное место в физике излучения молекулярных газов, углекислый газ не был исключен из рассмотрения при физическом анализе. В частности, в работах [41, 42] указывалось, что согласно информации того времени (1956 г.) перекрытие спектров молекул углекислого газа и воды приводит к уменьшению потока излучения, создаваемого атмосферными молекулами углекислого газа, примерно на 20%. Впоследствии исследование парникового эффекта атмосферы Земли стало предметом изучения климатологии, где выбор главных факторов проводился интуитивно и закон Кирхгофа был проигнорирован.

При этом отметим принципиальную роль банка данных HITRAN в этом анализе. Действительно, без этих данных рассматриваемая проблема не могла быть решена, а требуемая для этого информация весьма обширна. В частности, в компьютерную программу, используемую для проведенного выше анализа, включены параметры примерно двух тысяч излучательных переходов в молекулах, а такая информация не может быть содержанием ограниченного числа статей, а также обзора или монографии. Поэтому выводы данной статьи демонстрируют также важность современного инструмента молекулярной физики — банка данных HITRAN.

В дополнение к сказанному отметим, что пренебрежение законом Кирхгофа возможно только в области спектра, где оптическая толщина слоя для каждой молекулярной компоненты мала, и тогда влияние на выход излучения за счет данной компоненты со стороны других компонент относительно невелико. Это имеет место в области спектра, где находится полоса поглощения молекул озона, а оптическая толщина атмосферы по отношению к молекулам озона и другим компонентам мала. Тогда поток излучения, создаваемый молекулами озона, изменяется пропорционально плотности озона в атмосфере, а изменения потоков излучения из атмосферы на поверхность Земли как создаваемого молекулами озона, так и суммарного совпадают.

ЛИТЕРАТУРА

 G. Kirchhoff and R. Bunsen, Ann. der Phys. und Chem. 109, 275 (1860).

- 2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механи*ка, Наука, Москва (1964).
- V. P. Krainov and B. M. Smirnov, Atomic and Molecular Radiative Processes, Springer Nature, Switzerland (2019).
- N. Andronova and M. Schlesinger, J. Geophys. Res. 106, D22605 (2001).
- M. A. Snyder, J. L. Bell, and L. C. Sloan, Geophys. Res. Lett. 29, 014431 (2002).
- J. D. Annan and J. C. Hargreaves, Geophys. Res. Lett. 33, L06704 (2006).
- A. Ganopolski and T. Schneider von Deimling, Geophys. Res. Lett. 35, L23703 (2008).
- 8. M. E. Walter, Not. Amer. Mat. Soc. 57, 1278 (2010).
- A. Schmittner, N. M. Urban, J. D. Shakun et al., Science 334, 1385 (2011).
- J. T. Fasullo and K. E. Trenberth, Science 338, 792 (2012).
- R. M. Goody, Atmospheric Radiation: Theoretical Basis, Oxford Univ. Press, London (1964).
- R. M. Goody and Y. L. Yung, *Principles of Atmospheric Physics and Chemistry*, Oxford Univ. Press, New York (1995).
- 13. https://www.cfa.harvard.edu/.
- 14. http://www.hitran.iao.ru/home.
- **15**. Б. М. Смирнов, ЖЭТФ **153**, 538 (2018).
- Ya. B. Zel'dovich and Yu. P. Raizer, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Acad. Press, New York (1966).
- **17**. Б. М. Смирнов, *Физика слабоионизованного газа*, Наука, Москва (1972).
- **18**. F. Reif, *Statistical and Thermal Physics*, McGrow Hill, Boston (1965).
- **19**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, т. 1, Наука, Москва (1976).
- B. M. Smirnov, *Physics of Weakly Ionized Gases*, Mir, Moscow (1980).
- **21**. B. M. Smirnov, *Physics of Ionized Gases*, Wiley, New York (2001).
- **22**. U. S. Standard Atmosphere, U.S. Government Printing Office, Washington (1976).
- 23. W. M. Elsasser, Phys. Rev. 54, 126 (1938).
- http://www.hitran.org/links/docs/definitions-andunits/.

- M. Simeckova, D. Jacquemart, L. S. Rothman et al., J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 98, 130 (2006).
- **26.** B. M. Smirnov, Transport of Infrared Atmospheric Radiation, de Gruyter, Berlin (2020).
- Understanding Climate Change, Nat. Acad. Science, Washington (1975).
- M. L. Salby, *Physics of the Atmosphere and Climate*, Cambr. Univ. Press, Cambridge (2012).
- 29. J. T. Kiehl and K. E. Trenberth, Bull. Amer. Meteorol. Soc. 78, 197 (1997).
- 30. K. E. Trenberth, J. T. Fasullo, and J. T. Kiehl, Bull. Amer. Meteorol. Soc. 90, 311 (2009).
- 31. K. E. Trenberth and J. T. Fasullo, Surf. Geophys. 33, 413 (2012).
- 32. J. T. Fasullo and K. E. Trenberth, Science 338, 792 (2012).
- 33. G. L. Stephens, J. Li, M. Wild et al., Nature Geosci.5, 691 (2012).

- 34. M. Wild, D. Folini, Ch. Schär et al., Clim. Dyn. 40, 3107 (2013).
- 35. https://en.wikipedia.org/wiki/Atmosphericmethane.
- 36. D. Pierotti and A. Rasmussen, J. Geophys. Res. 82, 5823 (1977).
- 37. B. D. Hall, G. S. Dutton, and J. W. Elkins, J. Geophys. Res. 112, D09305 (2007).
- 38. https://en.wikipedia.org/wiki/Tropospheric-ozone.
- 39. B. M. Smirnov, Int. Rev. At. Mol. Phys. 10, 39 (2019).
- 40. B. M. Smirnov, J. Atmos. Sci. Res. 2(4), 21 (2019).
- 41. G. N. Plass, Tellus VIII, 141 (1956).
- 42. G. N. Plass and D. I. Fivel, Quant. J. Roy. Met. Soc. 81, 48 (1956).

ФОРМА ЛИНИИ СУБДОПЛЕРОВСКИХ РЕЗОНАНСОВ В ГАЗЕ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЛЕ ВСТРЕЧНЫХ БИХРОМАТИЧЕСКИХ ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ

А. М. Михайлов^{а,b}, Р. Будо^{с*}, Д. В. Бражников^{а,b**}

^а Институт лазерной физики Сибирского отделения Российской академии наук 630090, Новосибирск, Россия

> ^b Новосибирский государственный университет 630090, Новосибирск, Россия

^c FEMTO-ST, CNRS, Université de Bourgogne Franche-Comté 25030, Besançon, France

> Поступила в редакцию 13 июля 2021 г., после переработки 13 июля 2021 г. Принята к публикации 1 августа 2021 г.

Высококонтрастные субдоплеровские резонансы, наблюдаемые в пара́х атомов щелочных металлов в поле встречных бихроматических лазерных пучков, имеют хорошие перспективы в квантовой метрологии для создания миниатюрного оптического стандарта частоты. До настоящего времени эти нелинейные резонансы были изучены только экспериментально или с использованием численных расчетов. Для дальнейшего развития теории наблюдаемых резонансов крайне важным представляется разработка упрощенной теоретической модели, позволяющей получить явные и компактные аналитические выражения для формы резонансной линии. В настоящей работе проведен такой теоретический анализ на основе трехуровневой Λ -схемы атома. При этом исследованы два режима: режим слабой стоячей волны с близкими интенсивность, заметно меньшую интенсивности встречного пучка ($I_2 \ll I_1$). Полученные аналитические выражения позволяют установить качественные различия между этими режимами, а также явным образом выделить вклады от различных нелинейных эффектов в поглощение светового поля, в том числе слагаемые, ответственные за образование высококонтрастного субдоплеровского пика. Полученные выражения находятся в качественном согласии с ранее полученными экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0044451021120063

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерная спектроскопия играет важнейшую роль в развитии физики, позволяя изучать строение атомов, молекул и их взаимодействия [1], выполнять прецизионные измерения эффектов квантовой теории поля [2,3], специальной и общей теории относительности [4–6]. Один из основных методов лазерной спектроскопии — метод насыщенного поглощения в газе атомов или молекул [1,7]. Резонансы насыщенного поглощения, свободные от

818

доплеровского уширения (субдоплеровские резонансы), активно используются в лабораториях для проведения различных экспериментов, в которых необходимо осуществлять стабилизацию частоты лазерного излучения. На основе резонансов насыщенного поглощения создаются некоторые транспортируемые квантовые стандарты частоты (КСЧ) оптического диапазона с использованием молекулярных [8–11] или атомарных газов [12, 13]. Некоторые из таких стандартов применяются в космических научных миссиях [14, 15].

До недавнего времени наиболее компактные (миниатюрные) образцы КСЧ разрабатывались лишь для микроволнового диапазона. В таких устройствах частота СВЧ-генератора порядка нескольких

^{*} Rodolphe Boudot.

^{**} E-mail: brazhnikov@laser.nsc.ru

гигагерц стабилизируется по резонансам когерентного пленения населенностей (КПН) [16] в пара́х щелочных металлов (Rb или Cs). Современные образцы таких КСЧ используют газовые ячейки объемом $V \ll 1$ см³, при этом общий объем устройства обычно составляет менее 70 см³ [17–19]. Относительная стабильность частоты (девиация Аллана) КСЧ-КПН лежит в диапазоне $\sigma_y \sim 10^{-11}$ – 10^{-10} за 1 с усреднения. Такие миниатюрные микроволновые стандарты чрезвычайно востребованы для развития многих современных технологий, в том числе связанных с использованием малых спутников: мониторинг ионосферы Земли [20], спутниковая навигация и связь, в том числе для дальнего космоса [21].

Создание миниатюрных КСЧ оптического диапазона представляет собой весьма сложную задачу. Поэтому долгое время не существовало соответствующих разработок, сравнимых по характеристикам с микроволновыми аналогами. Одна из причин заключается в том, что отношение сигнал/шум, определяющее кратковременную стабильность частоты, не достигало приемлемого уровня при использовании миниатюрных газовых ячеек. Действительно, наиболее компактные КСЧ оптического диапазона были основаны на резонансах насыщенного поглощения в ячейках объемом, равным нескольким кубическим сантиметрам или значительно большем. Например, в работах [11, 14, 15] длина ячеек с молекулярным йодом составляла от 10 до 30 см. Заметный прогресс в развитии миниатюрных КСЧ оптического диапазона произошел лишь в последние несколько лет с появлением серии работ группы ученых из NIST (г. Болдер) и других организаций США [22-24]. В них было предложено использовать микроячейку ($V \approx 10 \text{ мм}^3$), наполненную пара́ми атомов ⁸⁷Rb, и метод двухфотонной спектроскопии для получения реперного резонанса, необходимого для стабилизации оптической частоты. Полный объем КСЧ составил всего 35 см³ [24], что сравнимо с миниатюрными образцами микроволновых КСЧ. Важно отметить, что активные работы в этом направлении на протяжении нескольких лет приводили к постоянному улучшению стабильности частоты оптических КСЧ с $\sigma_u \approx 10^{-11}$ за 1 с в одной из первых работ [22] примерно до 2 · 10⁻¹³ в недавней работе [25].

В работе [26] был предложен альтернативный подход к созданию миниатюрных оптических КСЧ. В его основе лежит субдоплеровская спектроскопия атомов цезия в поле встречных бихроматических лазерных пучков с ортогональными линейными поляСигнал с фотодетектора, отн. ед.



Рис. 1. Резонансное поглощение светового поля пара́ми атомов Cs, наблюдаемое на фотодетекторе в обычном одночастотном (штриховая линия) и в двухчастотном (сплошная) режимах. В одночастотном режиме возбуждается переход $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$ в D_1 -линии, $T_{cell} \approx 60$ °C. В двухчастотном режиме одновременно возбуждаются переходы $F_g = 3, 4 \rightarrow F_e = 4$, $T_{cell} \approx 45$ °C. Суммарная оптическая мощность в ячейке $P_{tot} \approx 1.1$ мВт при диаметре пучков около 2 мм. Сигналы нормированы на постоянное значение, пропорциональное интенсивности света на входе в ячейку

ризациями. Этот метод весьма близок к стандартному методу насыщенного поглощения. Основное отличие состоит в том, что каждый из встречных пучков содержит две спектральные компоненты с частотами ω_1 и ω_2 , так что их разность совпадает с частотой сверхтонкого расщепления ω_{hfs} основного состояния в атоме ($2\pi \cdot 9.2$ ГГц для ¹³³Cs). В этих условиях, как было впервые обнаружено в экспериментальной работе [27], при сканировании частоты лазера наблюдается субдоплеровский резонанс с необычно большим контрастом, а значение отношения амплитуда/ширина более чем на порядок превосходит аналогичное значение для резонансов, наблюдаемых в стандартном одночастотном методе насыщенного поглощения. Примеры резонансов, полученные в наших недавних экспериментах с миниатюрной кубической стеклянной ячейкой (объемом $V \approx 125 \text{ мм}^3$) представлены на рис. 1 [28]. Из рисунка следует, что при использовании двухчастотного метода наблюдается более узкий субдоплеровский резонанс в виде провала в проходящей через ячейку интенсивности света по сравнению с аналогичным резонансом в стандартной одночастотной схеме, в которой наблюдается обычный резонанс насыщенного поглощения в виде пика пропускания. Кроме того, этот высококонтрастный провал имеет более высокую амплитуду, чем пик резонанса насыщенного поглощения. Эти особенности крайне важны для приложений новых нелинейных резонансов к решению задач квантовой метрологии, в частности, для создания миниатюрного КСЧ оптического диапазона. Так, в первых же экспериментах с использованием цезиевой микроячейки ($V \approx 5 \text{ мм}^3$) была достигнута стабильность оптической частоты, равная $2 \cdot 10^{-12}$ за 1 с [26]. Важно отметить, что кроме высокой стабильности частоты предложенная двухчастотная техника демонстрирует хорошие результаты при относительно малой температуре паров: около 60 °С для двухчастотной спектроскопии Cs против 80–100 °С для двухфотонной спектроскопии Rb [24, 25]. Это обстоятельство означает потенциально более низкое энергопотребление всего КСЧ.

Описанный новый метод двухчастотной спектроскопии уже успешно используется для стабилизации оптической частоты лазера в схеме высокостабильных микроволновых КСЧ на основе резонансов КПН [29, 30]. Кроме того, недавно этот метод был опробован и на атомах рубидия для создания КСЧ оптического диапазона [31]. Однако, несмотря на эти успехи и еще большие перспективы, теория наблюдаемых высококонтрастных нелинейных резонансов имеет свои пробелы. В частности, качественное описание наблюдаемых эффектов, а также численные расчеты в модели трехуровневой Л-схемы были представлены в работах [27, 32, 33]. Численные расчеты, учитывающие реальную структуру уровней энергии в атоме цезия, были проведены в работе [26]. В этих работах была показана ключевая роль явления КПН в наблюдении высококонтрастных субдоплеровских резонансов. Между тем до сих пор не было представлено никаких аналитических выражений для формы линии наблюдаемых резонансов в газе атомов, которые бы явно демонстрировали возможность наблюдения резонанса в виде субдоплеровского пика в поглощении среды.

В настоящей работе нами представлена упрощенная спектроскопическая модель на основе трехуровневой Λ -схемы атома, позволяющая получить явные аналитические выражения, адекватно описывающие экспериментально наблюдаемые резонансы. Модель демонстрирует взаимное влияние таких нелинейных эффектов, как самонасыщение среды от каждого из двух лазерных пучков, насыщенное поглощение от взаимного действия встречных пучков, а также два типа нелинейных эффектов, связанных с КПН: просветление среды вдали от центра резонансной кривой и взаимная «конкуренция» разных КПН-состояний в центре этой кривой, которая и отвечает за наблюдение высококонтрастных субдоплеровских резонансов.

2. ТЕОРИЯ

2.1. Модель на основе Λ -схемы

Для наблюдения высококонтрастных субдоплеровских резонансов методом двухчастотной спектроскопии атомы цезия облучались встречными лазерными пучками, каждый из которых состоит как минимум из двух спектральных компонент с частотами ω_1 , ω_2 и соответствующими волновыми числами k_1 , k_2 ($k_j = \omega_j/c$, где c — скорость света). Для упрощения теории рассмотрим случай, когда две спектральные компоненты излучения в каждом из пучков имеют равные амплитуды. Тогда световое поле может быть представлено в виде

$$E(z,t) = E_1 \{ \exp[-i(\omega_1 t - k_1 z)] + \\ + \exp[-i(\omega_2 t - k_2 z)] \} + \\ + E_2 \{ \exp[-i(\omega_1 t + k_1 z - \alpha + \phi_1)] + \\ + \exp[-i(\omega_2 t + k_2 z + \alpha + \phi_2)] \} + \text{c.c.} \quad (1)$$

Здесь E_1 — вещественная амплитуда волн, бегущих по оси z (оси квантования), а E_2 — волн, бегущих против этой оси. Для упрощения, интенсивность лазерного поля считаем однородной по поперечному сечению пучков (П-образный профиль), т.е. амплитуды волн не зависят от поперечных координат x и у. Учет гауссова распределения интенсивности, как правило, приводит лишь к незначительным изменениям субдоплеровского резонанса [34]. В выражении (1) введены фазы ϕ_1 и ϕ_2 , чтобы учесть возможную разность фаз между волнами, бегущими по оси г и против нее. Как мы увидим далее, наблюдаемые резонансы чувствительны не к этим фазам по отдельности, а к их разности $\phi_1 - \phi_2$. Эта разность может контролироваться в эксперименте, например, посредством перемещения зеркала, формирующего встречный световой пучок [26, 32, 33].

Как и в работе [32], всю совокупность уровней энергии в реальном атоме будем моделировать трехуровневой Λ -схемой, изображенной на рис. 2. Расстояние Δ_g между подуровнями энергии основного состояния, $|1\rangle$ и $|2\rangle$, соответствует величине сверхтонкого расщепления. При этом частотная компонента поля ω_1 вызывает дипольные переходы $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, тогда как компонента ω_2 — переходы $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$. Отметим, что Λ -схема уровней энергии часто используется в теории при рассмотрении пирокого круга задач из области лазерной спектроскопии атомов [35–37], динамики распространения импульсов света в резонансных средах [38–40] и иных задач, связанных с явлением КПН.



Рис. 2. Λ -схема уровней энергии в атоме. Сплошными стрелками обозначены переходы, индуцируемые двухчастотным пучком E_1 , распространяющимся вдоль оси z. Штриховые стрелки — переходы, индуцируемые встречным двухчастотным пучком E_2 . Волнистые стрелки обозначают каналы спонтанной релаксации. Пролетная релаксация не показана

Для наблюдения высококонтрастных субдоплеровских резонансов в работах [26,27] использовались встречные пучки с взаимно ортогональными линейными поляризациями. Несмотря на то, что поле (1) записано в скалярном виде, в нашей модели векторную природу света можно учесть введением в (1) фазы $\pm \alpha$, которая соответствует углу между линейными поляризациями встречных пучков (см. также работу [32]). При необходимости на основе Λ -схемы могут быть рассмотрены и эллиптически поляризованные волны [41].

Теоретический анализ будем проводить на основе стандартного квазиклассического формализма одноатомной матрицы плотности $\hat{\rho}$, когда внутренние степени свободы атома описываются квантовомеханическим образом, тогда как световое поле считается классическим (не квантуется) [1,42]. Соответствующее уравнение движения имеет линдбладовский вид:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \Big[\big(\widehat{H}_0 + \widehat{V} \big), \hat{\rho} \Big] + \widehat{\mathcal{R}} \big\{ \hat{\rho} \big\}.$$
⁽²⁾

Здесь $d/dt = \partial/\partial t + \upsilon \partial/\partial z$, где υ — проекция скорости атома на ось квантования z. Гамильтониан \hat{H}_0 описывает невозмущенное состояние атома (в отсутствие лазерного поля). В базисе собственных функций он имеет диагональный вид:

$$\widehat{H}_0 = \sum_{n=1}^{3} \mathcal{E}_n |n\rangle \langle n|, \qquad (3)$$

где \mathcal{E}_n — энергия уровня $|n\rangle$ в атоме (см. рис. 2), так что $\omega_{mn} = (\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n)/\hbar$ есть частоты соответствующих переходов в Λ -схеме. Оператор \hat{V} в уравнении (2) описывает взаимодействие атома с полем (1) в электродипольном приближении. Его можно представить в виде суммы операторов для каждого из встречных пучков, $\hat{V} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2$, где в резонансном приближении

$$\widehat{V}_1 = -\hbar R_1 \left\{ \exp\left[-i(\omega_1 t - k_1 z)\right] |3\rangle \langle 1| + \exp\left[-i(\omega_2 t - k_2 z)\right] |3\rangle \langle 2| \right\} + \text{H.c.}, \quad (4)$$

$$\widehat{V}_{2} = -\hbar R_{2} \left\{ \exp\left[-i(\omega_{1}t + k_{1}z + \phi_{1} - \alpha)\right] |3\rangle \langle 1| + \exp\left[-i(\omega_{2}t + k_{2}z + \phi_{2} + \alpha)\right] |3\rangle \langle 2| \right\} + \text{H.c.}$$
(5)

Здесь введены вещественные частоты Раби согласно определению $R_j = d_0 E_j / \hbar$, где d_0 — дипольные моменты оптических переходов в Λ -схеме, которые, для упрощения, мы считаем равными.

Оператор \mathcal{R} в уравнении (2) описывает релаксационные процессы в атоме. Как и дипольные моменты переходов, скорости спонтанной релаксации по каналам $|3\rangle \rightarrow |1\rangle$ и $|3\rangle \rightarrow |2\rangle$ также считаем одинаковыми и равными $\beta\gamma$, где β — коэффициент ветвления, принимающий значение в диапазоне $0 \le \beta \le 1$ (в частности, $\beta = 1$ соответствует закрытой системе уровней). В уравнение (2) для матрицы плотности не входят дифференциальные операторы $\partial/\partial x$ и $\partial/\partial y$ по поперечным координатам, что формально означает неограниченный размер лазерных пучков. В принятом случае П-образного профиля интенсивности учет ограниченности пучков и, следовательно, конечного времени взаимодействия атомов с полем можно учесть соответствующей константой пролетной релаксации, которую обозначим Г. Выпишем в явном виде оператор \mathcal{R} :

$$\widehat{\mathcal{R}} = \gamma \Big[\beta \rho_{33} \widehat{P}_{11} + \beta \rho_{33} \widehat{P}_{22} - 2\rho_{33} \widehat{P}_{33} - (\rho_{31} \widehat{P}_{31} + \rho_{32} \widehat{P}_{32} + \text{H.c.}) \Big] - \Gamma \sum_{n=1}^{3} \sum_{m=1}^{3} \rho_{nm} \widehat{P}_{nm} + \frac{\Gamma}{2} \Big[\widehat{P}_{11} + \widehat{P}_{22} \Big], \quad (6)$$

где введены проекционные операторы $\hat{P}_{nm} = |n\rangle \langle m|$. Из этого выражения следует, что в наших обозначениях спонтанная релаксация возбужденного уровня $|3\rangle$ равна 2γ . В свою очередь, релаксация оптических когерентностей — недиагональных элементов ρ_{31} , ρ_{32} матрицы плотности и комплексно-сопряженных им ρ_{13} , ρ_{23} — описывается константой $\gamma_{eg} = \gamma + \Gamma$. Релаксация населенностей подуровней основного состояния ρ_{11} , ρ_{22} и низкочастотных когерентностей ρ_{12} , $\rho_{21} = \rho_{12}^*$ происходит со скорос-

тью Г. Последнее слагаемое в выражении (6) описывает установление изотропного состояния в атоме, когда подуровни $|1\rangle$ и $|2\rangle$ имеют одинаковую населенность, равную 1/2. Отметим, что мы считаем газ атомов достаточно разреженным, чтобы пренебречь столкновениями и связанными с ними эффектами (в частности, столкновительной релаксацией). Все сделанные приближения достаточно типичны в теории субдоплеровской спектроскопии атомов щелочных металлов в ячейках без релаксационного покрытия стенок и без буферного газа.

Матрица плотности $\hat{\rho}$ является функцией как времени (t), так и координат (z). Будем рассматривать стационарный режим, в котором все переходные процессы (например, при влете атома в лазерный пучок) установились и населенности уровней энергии не зависят от времени. Между тем, как было предсказано теоретически [32] и подтверждено экспериментально [26, 33], величина резонансного поглощения поля в газовой ячейке медленно осциллирует в пространстве. Это является следствием «конкуренции» состояний КПН, инлушируемых в атоме каждым из встречных двухчастотных пучков (см. разд. 2.2): области конструктивной интерференции состояний КПН сменяются областями деструктивной интерференции. Для учета такого эффекта в населенностях уровней А-схемы необходимо учесть низкочастотные пространственные гармоники $\exp(\pm 2i k_{12}z)$, где $k_{12} = k_1 - k_2$. Таким образом, для диагональных элементов матрицы плотности будем использовать следующее фурье-разложение:

$$\rho_{nn}(z) \approx \rho_{nn}^{(0)} + \rho_{nn}^{(+)} \exp(2ik_{12}z) + \rho_{nn}^{(-)} \exp(-2ik_{12}z), \quad (7)$$

где n = 1, 2, 3. В силу эрмитовости матрицы плотности ($\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}$) имеем $\rho_{nn}^{(0)} = \rho_{nn}^{(0)*}$ и $\rho_{nn}^{(+)} = \rho_{nn}^{(-)*}$.

Состояние КПН в Λ -схеме есть особая суперпозиция подуровней $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (см. разд. 2.2). Она образуется под действием когерентного взаимодействия атома одновременно с обоими спектральными составляющими поля. В свою очередь, это состояние характеризуется недиагональными элементами ρ_{12} и ρ_{21} матрицы плотности. Поэтому для последних справедливо следующее представление:

$$\rho_{12}(z,t) \approx \exp(i\delta_{12}t) \times \\ \times \left[\rho_{12}^{(+)} \exp(ik_{12}z) + \rho_{12}^{(-)} \exp(-ik_{12}z)\right], \quad (8)$$

$$\rho_{21}(z,t) \approx \exp(-i\delta_{12}t) \times \\ \times \left[\rho_{21}^{(+)} \exp(ik_{12}z) + \rho_{21}^{(-)} \exp(-ik_{12}z)\right], \quad (9)$$

откуда видно, что эти элементы осциллируют во времени на низкой частоте $\delta_{12} = \omega_1 - \omega_2$. Свойство эрмитовости матрицы плотности дает следующую связь амплитуд гармоник: $\rho_{21}^{(+)} = \rho_{12}^{(-)*}$ и $\rho_{21}^{(-)} = \rho_{12}^{(+)*}$.

Разложения на гармоники (7)–(9) приводят к необходимости учета в оптических когерентностях не только гармоник вида $\exp(\pm i k_1 z)$ и $\exp(\pm i k_2 z)$, как в Λ -схеме, взаимодействующей с одним бихроматическим пучком, но и комбинированных гармоник вида $\exp[\pm i (2k_1 - k_2)z]$ и $\exp[\pm i (k_1 - 2k_2)z]$ (см. также [32]). Таким образом, для оптических когерентностей имеем следующие представления:

$$\rho_{31}(z,t) = \exp(-i\omega_1 t) \left[\rho_{31}^{(-1)} \exp(-ik_1 z - i\phi_1) + \rho_{31}^{(+1)} \exp(ik_1 z) + \rho_{31}^{(+21)} \exp[i(2k_2 - k_1)z] + \rho_{31}^{(-21)} \exp[-i(2k_2 - k_1)z - i\phi_1] \right], \quad (10)$$

$$\rho_{32}(z,t) = \exp(-i\omega_2 t) \left[\rho_{32}^{(-2)} \exp(-ik_2 z - i\phi_2) + \rho_{32}^{(+2)} \exp(ik_2 z) + \rho_{32}^{(+12)} \exp[i(2k_1 - k_2)z] + \rho_{32}^{(-12)} \exp[-i(2k_1 - k_2)z - i\phi_2] \right].$$
(11)

Аналогичные выражения можно записать для остальных оптических когерентностей, учитывая связь между ними: $\rho_{13} = \rho_{31}^*$, $\rho_{23} = \rho_{32}^*$.

Используя все выписанные выражения (3)–(11), из (2) можно получить систему уравнений (оптические уравнения Блоха) для всех элементов (гармоник) матрицы плотности. Эта система довольно громоздка, так как имеет ранг, равный 29. Однако из нее можно легко исключить все гармоники оптических когерентностей и понизить ранг системы до 13. Кроме того, мы будем рассматривать частный случай, который представляет наибольший интерес с точки зрения наблюдения наибольшего контраста субдоплеровских резонансов в рассматриваемом двухчастотном методе [26, 27, 32, 33]. А именно, будем считать рамановскую (двухфотонную) отстройку частоты равной нулю, т.е. $\omega_1 - \omega_2 = \Delta_q$ (см. рис. 2). Итак, запишем оптические уравнения Блоха в явном виде, которые будут являться основой для получения аналитических решений в следующих разделах. Для нулевой гармоники $\rho_{11}^{(0)}$ имеем

$$\rho_{11}^{(0)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(0)} + 2\gamma_{eg} \tau \left(S_1 + S_2\right) N_{13}^{(0)} + + 2R_1^2 \tau \operatorname{Re} \left\{L_1 \rho_{12}^{(-)}\right\} + + 2R_2^2 \tau \operatorname{Re} \left\{L_2 \rho_{12}^{(+)} e^{i\theta}\right\} = \frac{1}{2}.$$
 (12)

Здесь и далее $\tau = \Gamma^{-1}$ — среднее время пролета атома через лазерное поле, а $\theta = 2\alpha - \phi_{12}$. Также, для краткости, будем использовать обозначение $N_{nm}^{(0,\pm)} = \rho_{nn}^{(0,\pm)} - \rho_{mm}^{(0,\pm)}$ для гармоник разности населенностей подуровней.

Далее, для гармоники $\rho_{11}^{(+)}$ имеем

$$\left(1 + 2i \, k_{12} \upsilon \tau \right) \rho_{11}^{(+)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(+)} + + \left[R_1^2 L_1 + R_2^2 L_2^* \right] \tau N_{13}^{(+)} + + R_1^2 \tau L_1 \rho_{12}^{(+)} + R_2^2 \tau L_2^* \rho_{21}^{(+)} e^{-i\theta} = 0 , \quad (13)$$

для гармоники $\rho_{22}^{(0)}$ —

$$\rho_{22}^{(0)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(0)} + 2\gamma_{eg} \tau \left(S_1 + S_2\right) N_{23}^{(0)} + + 2R_1^2 \tau \operatorname{Re} \left\{L_1^* \rho_{12}^{(-)}\right\} + + 2R_2^2 \tau \operatorname{Re} \left\{L_2^* \rho_{12}^{(+)} e^{i\theta}\right\} = \frac{1}{2}, \quad (14)$$

для гармоники $\rho_{22}^{(+)}$ —

$$\left(1 + 2i \, k_{12} \upsilon \tau \right) \rho_{22}^{(+)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(+)} + + \left[R_1^2 L_1^* + R_2^2 L_2 \right] \tau N_{23}^{(+)} + + R_1^2 \tau L_1^* \rho_{12}^{(+)} + R_2^2 \tau L_2 \rho_{21}^{(+)} e^{-i\theta} = 0.$$
 (15)

Уравнения для гармоник $\rho_{11}^{(-)}$ и $\rho_{22}^{(-)}$ можно получить комплексным сопряжением уравнений соответственно (13) и (15). Аналогичные уравнения можно получить для гармоник возбужденного состояния $\rho_{33}^{(0)}$, $\rho_{33}^{(+)}$ и $\rho_{33}^{(-)}$. Однако их можно заменить гораздо более компактными уравнениями, которые можно получить сложением уравнений для разных гармоник. Например, сложение уравнений для $\rho_{11}^{(0)}$, $\rho_{22}^{(0)}$ и $\rho_{33}^{(0)}$ дает простое уравнение вида

$$\rho_{11}^{(0)} + \rho_{22}^{(0)} + \rho_{33}^{(0)} + 2\gamma\tau(1-\beta)\rho_{33}^{(0)} = 1.$$
 (16)

Аналогично, складывая уравнения для $\rho_{11}^{(+)}$, $\rho_{22}^{(+)}$ и $\rho_{33}^{(+)}$, приходим к следующему простому уравнению:

$$(1 + 2i\tau k_{12}\upsilon) \left[\rho_{11}^{(+)} + \rho_{22}^{(+)} + \rho_{33}^{(+)}\right] + 2\gamma\tau(1-\beta)\rho_{33}^{(+)} = 0.$$
(17)

Комплексным сопряжением последнего уравнения можно получить следующее:

$$(1 - 2i\tau k_{12}\upsilon) \left[\rho_{11}^{(-)} + \rho_{22}^{(-)} + \rho_{33}^{(-)}\right] + + 2\gamma\tau(1 - \beta)\rho_{33}^{(-)} = 0. \quad (18)$$

Отметим, что для закрытой системы ($\beta = 1$), как и должно быть, из выражений (16)–(18) и (7) следует сохранение полной населенности подуровней для всех z и t:

$$\operatorname{Tr}\{\hat{\rho}(z,t)\} = \rho_{11}(z,t) + \rho_{22}(z,t) + \rho_{33}(z,t) = 1.$$
(19)

Осталось выписать уравнения для гармоник низкочаст
отных когерентностей. В частности, для $\rho_{12}^{(+)}$ имеем

$$\left[1 + i k_{12} \upsilon \tau + 2\gamma_{eg} \tau \left(S_1 + S_2\right)\right] \rho_{12}^{(+)} + R_1^2 \tau \left[L_1 N_{13}^{(+)} + L_1^* N_{23}^{(+)}\right] + R_2^2 \tau e^{-i\theta} \left[L_2 N_{13}^{(0)} + L_2^* N_{23}^{(0)}\right] = 0, \quad (20)$$

для гармоники $ho_{12}^{(-)}$ —

$$\begin{bmatrix} 1 - i k_{12} \upsilon \tau + 2\gamma_{eg} \tau \left(S_1 + S_2 \right) \right] \rho_{12}^{(-)} + \\ + R_1^2 \tau \left[L_1 N_{13}^{(0)} + L_1^* N_{23}^{(0)} \right] + \\ + R_2^2 \tau e^{-i\theta} \left[L_2 N_{13}^{(-)} + L_2^* N_{23}^{(-)} \right] = 0. \quad (21)$$

Остальные два уравнения для гармоник $\rho_{21}^{(-)}$ и $\rho_{21}^{(+)}$ получаются комплексным сопряжением уравнений соответственно (20) и (21).

В выписанных уравнениях были использованы следующие обозначения для параметров насыщения:

$$S_{1,2} = \frac{R_{1,2}^2}{\gamma_{eg}^2 + (\delta \mp k\upsilon)^2},$$
 (22)

и комплексных лоренцианов:

$$L_{1,2} = \frac{1}{\gamma_{eg} + i\left(\delta \mp k\upsilon\right)}.$$
(23)

При этом было использовано приближение $|\mathbf{k}_1| \approx |\mathbf{k}_2| \equiv k$. Далее мы также будем полагать, что выполняется условие

$$vk_{12} \approx v\Delta_g/c \ll \Gamma, \gamma_{eg}S_{1,2}.$$

Это условие может быть выполнено для узких световых пучков, о которых речь пойдет далее, и не очень слабых световых полей. В частности, для пучков диаметром $d \sim 1$ мм, которые, например, использовались в работе [26], типовое значение Γ порядка $10^{-2}\gamma$. Тогда получаем, что для цезия, для которого $2\gamma \approx 2\pi \cdot 4.6$ МГц, приближение $vk_{12} \ll \Gamma$

выполняется с хорошим запасом для всех атомов, движущихся со скоростями менее 10^3 м/с, а это подавляющая часть атомов цезия при комнатной температуре (при $T \approx 300$ К средняя тепловая скорость атомов цезия в газе составляет примерно 230 м/с). Таким образом, в самих уравнениях для матрицы плотности мы будем полагать $k_{12} \approx 0$, что является типовым приближением, например, в теории явления КПН [35] (отказ от этого приближения приводит лишь к некоторому дополнительному уширению КПН-резонанса).

В выражениях (22), (23) была введена отстройка несущей частоты ω_0 лазерного излучения от средней частоты двух переходов в Λ -схеме:

$$\delta = \omega_0 - \frac{\omega_{31} + \omega_{32}}{2} \,. \tag{24}$$

Именно эта отстройка сканируется в экспериментах для наблюдения резонансной кривой, тогда как упомянутые выше две спектральные компоненты, ω_1 и ω_2 , получаются из несущей частоты ω_0 , например, с помощью СВЧ-модуляции излучения электрооптическим модулятором. Таким образом, по существу ω_1 и ω_2 — это боковые полосы порядков соответственно +1 и -1.

2.2. Когерентное пленение населенностей и образование пика в поглощении

Перед решением выписанных оптических уравнений Блоха продемонстрируем на качественном уровне причину наблюдения высококонтрастного субдоплеровского пика в поглощении лазерного поля средой резонансных атомов. Для этого запишем в явном виде состояния КПН, которые могут быть индуцированы в атоме каждым из двух встречных пучков по отдельности. Эти состояния, которые мы будем обозначать |NC> (noncoupled), подчиняются уравнениям [43]

$$\langle 3|\hat{V}_j|\mathrm{NC}_j\rangle = 0, \quad j = 1, 2.$$

Используя выражения (4) и (5), получаем явный вид нормированных на единицу волновых функций:

$$|\mathrm{NC}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |1\rangle - \exp[-i\left(\delta_{12}t - k_{12}z\right)]|2\rangle \right\}, \quad (26)$$

$$|\mathrm{NC}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |1\rangle - \exp[-i\left(\delta_{12}t + k_{12}z - \theta\right)]|2\rangle \right\}.$$
(27)

Как видно из (25), находясь в состоянии КПН, атом не взаимодействует с лазерным полем и, следовательно, не флюоресцирует. Поэтому КПН-состояние также называют «темным».

При $\delta \gg \Delta_{res}$, где Δ_{res} — полная ширина субдоплеровского резонанса на полувысоте (FWHM), в силу эффекта Доплера атомы газа могут находиться в резонансе одновременно только с одним из двух встречных световых пучков. Тогда, при достаточно малой константе релаксации Г основного состояния, бо́льшая часть атомов оказывается в одном из двух состояний, (26) или (27). Этим объясняется слабое поглощение поля на крыльях доплеровского контура (см. рис. 1, сплошная кривая). В центре же резонансной кривой, где $\delta < \Delta_{res}$, атомы одновременно взаимодействуют с двумя встречными лазерными пучками. В этом смысле можно говорить о «конкуренции» лазерных пучков в приготовлении квантового состояния в атоме, результат которой сильно зависит от «степени» эквивалентности двух состояний, (26) и (27). Действительно, рассмотрим скалярное произведение

$$|\langle NC_1 | NC_2 \rangle| = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \exp[i(\theta - 2k_{12}z)] \right\},$$
 (28)

откуда видно, что при

$$\theta - 2k_{12}z = (2n-1)\pi$$
 $(n = 1, 2, ...)$ (29)

состояния $|NC_1\rangle$ и $|NC_2\rangle$ ортогональны, т.е. они не могут существовать одновременно в атоме. Это можно назвать деструктивной интерференцией темных состояний, которая приводит к заметному поглощению света атомом по сравнению с уровнем поглощению света атомом по сравнению с уровнем поглощения при $\delta \gg \Delta_{res}$. Описанные особенности формирования состояний КПН в рассматриваемой конфигурации лазерного поля позволяют качественно объяснить возможность наблюдения высококонтрастного субдоплеровского пика поглощения в экспериментах (см. рис. 1).

Если атом находится в чистом состоянии КПН, например $|NC_1\rangle$, то его матрица плотности может быть представлена в виде

$$\hat{\rho}(\mathrm{NC}_{1}) = |\mathrm{NC}_{1}\rangle\langle\mathrm{NC}_{1}| = = \frac{1}{2} \Big\{ |1\rangle\langle1| + \exp(2i\,k_{12}z)|2\rangle\langle2| - - \exp[i(\delta_{12}t - k_{12}z)]|1\rangle\langle2| - - \exp[-i(\delta_{12}t - k_{12}z)]|2\rangle\langle1| \Big\}.$$
(30)

Если атом находится в состоянии $|\text{NC}_2\rangle$, то помимо появления фазы θ в этих гармониках у k_{12} сменится знак. Из этого простого анализа следует, что населенности подуровней (матричные элементы вида $\langle n|\hat{\rho}|n\rangle$) должны содержать гармоники $\exp(\pm 2k_{12}z)$, в то время как низкочастотные когерентности осциллируют во времени и пространстве, как $\exp[\pm i(\delta_{12}t \pm k_{12}z)]$. С этим и связано появление соответствующих гармоник в выражениях (7), (8) и (9). Отметим, что если среда облучается только одним из двух встречных пучков, то квантовое состояние в движущемся атоме газа адиабатически следует за полем и ненулевые пространственные гармоники в населенностях (7) не возникают [35]. Также можно показать, что в таком однопучковом режиме гармоники $\rho_{12}^{(+)} = \rho_{21}^{(-)} = 0$. При этом если атом находится в чистом состоянии $|\text{NC}_1\rangle$, то для оставшихся ненулевых гармоник элементов матрицы плотности получаем простые и очевидные решения:

$$\rho_{11}^{(0)}=\rho_{22}^{(0)}=\frac{1}{2},\quad \rho_{33}^{(0)}=0,\quad \rho_{12}^{(-)}=\rho_{21}^{(+)}=-\frac{1}{2}.$$

В экспериментах условие (29) может быть выполнено различными способами: перемещением ячейки вдоль оси z, перемещением зеркала в схеме, где встречный пучок формируется простым отражением исходного пучка обратно в ячейку (при этом изменяется фаза ϕ_{12} , а, следовательно, и θ), изменением угла α между линейными поляризациями встречных пучков. Все эти особенности наблюдались в экспериментах [26, 32, 33]. Из условия (29), в частности, следует, что с точки зрения максимизации амплитуды субдоплеровского пика преимуществом обладают короткие ячейки, в которых это условие с достаточной точностью выполняется на всей длине. Период осцилляций амплитуды резонанса при перемещении отражающего зеркала может быть найден из выражения (29): $\Delta_z = \pi/2|k_{12}|$ (здесь коэффициент 2 связан с тем, что при перемещении зеркала на Δz отраженные от него волны приобретают удвоенный фазовый сдвиг $2k_{1,2}\Delta z$). В частности, для цезия период осцилляций амплитуды резонанса составляет $\Delta_z(Cs) \approx 8$ мм, что также подтверждается экспериментами с микроячейкой ($L \approx 1.4$ мм), изготовленной по технологии MEMS [26], и с компактной стеклянной ячейкой ($L \approx 5$ мм) [33].

Рассматриваемая Λ -схема уровней является лишь приближением реальной структуры уровней энергии в атомах щелочных металлов. Поэтому на ее основе можно делать лишь грубые оценки параметров субдоплеровского резонанса, наблюдаемого в экспериментах. Реальная схема уровней энергии была рассмотрена в работе [26] на основе численных расчетов оптических уравнений Блоха. Между тем Λ -схема может быть использована для получения явных аналитических выражений для формы резонансной линии и объяснения причин появления субдоплеровского пика в поглощении среды. Этому и посвящены следующие два раздела.

2.3. Режим пробной волны

Рассмотрим сначала режим, в котором один из двухчастотных пучков (пробный пучок) значительно слабее другого. Пусть это будет поле E_2 (см. рис. 2). Причем интенсивность этого пучка также полагаем гораздо меньше интенсивности насыщения I_{sat} , которая для атомов щелочных металлов составляет единицы милливатт на квадратный сантиметр. Другой пучок, поле накачки E_1 , мы не будем пока существенно ограничивать по интенсивности, т.е. она может быть сравнима с I_{sat}. В таком случае задачу можно решить в линейном режиме по пробному полю, когда это поле никак не отражается на оптических характеристиках среды, а лишь «пробует» то состояние атомов, которое подготовлено волной накачки. Поэтому в уравнениях для матрицы плотности следует учесть только влияние поля E_1 и положить $R_2 = 0$. Кроме того, из системы уравнений исчезнут некоторые гармоники, например, $\rho_{nn}^{(\pm)}$ (n = 1, 2, 3), которые являются следствием действия двух полей одновременно. В итоге ранг этой системы понижается до 5, и она примет простой вид:

$$\rho_{11}^{(0)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(0)} + 2\gamma_{eg} \tau S_1 N_{13}^{(0)} + 2R_1^2 \tau \operatorname{Re}\left\{L_1 \rho_{12}^{(-)}\right\} = \frac{1}{2}, \quad (31)$$

$$\rho_{22}^{(0)} - \beta \gamma \tau \rho_{33}^{(0)} + 2\gamma_{eg} \tau S_1 N_{23}^{(0)} + 2R_1^2 \tau \operatorname{Re}\left\{L_1^* \rho_{12}^{(-)}\right\} = \frac{1}{2}, \quad (32)$$

$$\left(1 + 2\gamma_{eg}\tau S_1\right)\rho_{12}^{(-)} + R_1^2\tau \left[L_1 N_{13}^{(0)} + L_1^* N_{23}^{(0)}\right] = 0.$$
 (33)

Уравнение для $\rho_{33}^{(0)}$ остается в неизменном виде (16), а уравнение для $\rho_{21}^{(+)}$ может быть получено комплексным сопряжением уравнения (33).

Легко показать, что в выписанных уравнениях присутствует симметрия относительно замены $\rho_{11}^{(0)} \leftrightarrow \rho_{22}^{(0)}$. Это же следует из качественного анализа рис. 2 в рассматриваемых условиях. Следовательно, не решая систему, мы получаем $\rho_{11}^{(0)} = \rho_{22}^{(0)}$ и $N_{13}^{(0)} = N_{23}^{(0)}$. Тогда из (33) для $\rho_{12}^{(-)}$ находим

$$\rho_{12}^{(-)} = -\frac{\xi_1}{1+\xi_1} N_{13}^{(0)} , \qquad (34)$$

где введен пролетный параметр насыщения согласно определению [44]

$$\xi_j \equiv 2\gamma_{eg}\tau S_j \,. \tag{35}$$

Из (34), в частности, следует, что гармоника $\rho_{12}^{(-)}$ вещественная, как и гармоника $\rho_{21}^{(+)} = \rho_{12}^{(-)*}$. Как уже было отмечено в разд. 2.2, этими элементами матрицы плотности описывается состояние КПН как суперпозиция уровней $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Их вещественность является следствием того, что мы изначально положили рамановскую отстройку равной нулю.

Выпишем окончательное решение уравнений Блоха в линейном приближении по пробному полю:

$$\rho_{11}^{(0)} = \rho_{22}^{(0)} = \frac{1}{2} - \frac{(1+2(1-\beta)\gamma\tau)/2}{1+2\gamma\tau + \left[4+2(2-\beta)\gamma\tau\right]\xi_1} \xi_1, \quad (36)$$

$$\rho_{33}^{(0)} = \frac{\xi_1}{1 + 2\gamma\tau + \left[4 + 2\left(2 - \beta\right)\gamma\tau\right]\xi_1},\qquad(37)$$

$$\rho_{12}^{(-)} = \rho_{21}^{(+)} = -\frac{\xi_1/2}{1+\xi_1} \times \left[1 - \frac{3+2(1-\beta)\gamma\tau}{1+2\gamma\tau + \left[4+2(2-\beta)\gamma\tau\right]\xi_1}\xi_1\right].$$
 (38)

Из этого решения, в частности, следует, что в закрытой системе ($\beta = 1$) в пределе достаточно большого времени взаимодействия ($\tau \rightarrow \infty$) все атомы накачиваются в состояние КПН, для которого

$$\rho_{11}^{(0)} = \rho_{22}^{(0)} = \frac{1}{2}, \quad \rho_{33}^{(0)} = 0, \quad \rho_{12}^{(-)} = \rho_{21}^{(+)} = -\frac{1}{2}.$$

Этот же результат мы получали в разд. 2.2 без решения системы для матрицы плотности, что является проверкой полученных решений.

В рассматриваемом режиме $(I_2 \ll I_1)$ исследуемым сигналом является поглощение пробного пучка с интенсивностью I_2 , включающего две спектральные составляющие, $E_2(\omega_1)$ и $E_2(\omega_2)$, которые взаимодействуют с отдельными переходами в Λ -схеме. Укороченное волновое уравнение для медленной амплитуды каждой из этих составляющих имеет известный вид (j = 1, 2):

$$\frac{dE_2(\omega_j)}{dz} = 2\pi i k P(\omega_j), \qquad (39)$$

где $P(\omega_j)$ — поляризация среды на частоте ω_j , изменяющаяся медленно в пространстве (по сравнению с осцилляциями $\exp(ikz)$). Здесь, как и раныше, мы положили $k_1 \approx k_2 = k$. Учитывая, что $I = cE^2/2\pi$ и $P = n_a \text{Tr}[\hat{d}_0\hat{\rho}]$, где \hat{d}_0 — оператор дипольного момента, n_a — концентрация атомов, можно прийти к следующему дифференциальному уравнению, описывающему изменение интенсивности двухчастотного пробного пучка в среде:

$$\frac{dI_2}{dz} = -2\gamma_{eg}\hbar kcn_a S_2 \times \\ \times \left[N_{13}^{(0)} + \rho_{12}^{(-)} \left(\cos\eta + \frac{\delta + kv}{\gamma_{eg}} \sin\eta \right) \right]. \quad (40)$$

При выводе этого выражения было учтено, что $\rho_{12}^{(-)}$ — вещественная функция и $N_{13}(0) = N_{23}(0)$. Также была введена фаза $\eta(z) = \theta - 2k_{12}z$. Формула (40) имеет простой физический смысл. Действительно, $\hbar kc = pc = E_{ph}$ — это энергия одного фотона пробного пучка, которая в линейном режиме по полю рассеивается со скоростью порядка $\gamma_{ea}S_2$. Количество этой энергии, рассеиваемой в единице объема среды, должно быть пропорционально количеству рассеивающих частиц, т.е. n_a . Все нелинейные процессы, которые влияют на скорость рассеяния энергии из пробного пучка, описываются слагаемыми в квадратных скобках. Так, в линейном режиме (по обоим пучкам) населенности подуровней в А-схеме совпадают с изотропным начальным состоянием: $\rho_{11} = \rho_{22} = 1/2, \ \rho_{33} = 0, \ \rho_{12}^{(-)} = 0, \ \text{поэтому}$ $N_{13}^{(0)} = \rho_{11} = 1/2$. Отклонение от этих значений суть проявление нелинейных эффектов. В частности, первое слагаемое в скобках $(N_{13}^{(0)})$ связано с выравниванием населенностей подуровней основного и возбужденного состояний, происходящее под влиянием пучка накачки и описывающее явление насыщенного поглощения. Это явление при перестройке частоты лазера (т.е. при сканировании δ) приводит к наблюдению резонанса насыщенного поглощения в проходящей через ячейку интенсивности пробного пучка. Второе слагаемое в скобках, пропорциональное $\rho_{12}^{(-)}$, связано с образованием когерентного состояния как суперпозиции подуровней $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Причем, как видно из (40), это состояние либо уменьшает поглощение пробной волны, либо увеличивает его в зависимости от фазы $\eta(z)$, что находится в качественном согласии с анализом, проведенным в разд. 2.2.

Учитывая связь параметра насыщения S_2 с интенсивностью волны I_2 и дипольным моментом перехода d_0 , а также известную формулу $d_0^2 = 3\beta\gamma\hbar/4k^3$, перепишем уравнение (40) в виде

$$\frac{dI_2}{dz} = -\frac{3\lambda^2 n_a}{2\pi} \varkappa(I_1, z) I_2 , \qquad (41)$$

где был введен безразмерный показатель поглощения пробной волны

$$\varkappa(I_1, z) = \beta \gamma \gamma_{eg} \left| L_2 \right|^2 \times \left[N_{13}^{(0)} + \rho_{12}^{(-)} \left(\cos \eta + \frac{\delta + k\upsilon}{\gamma_{eg}} \sin \eta \right) \right]. \quad (42)$$

Здесь лоренциан L_2 определяется формулой (23).

Как уже отмечалось выше в разд. 2.2, короткие газовые ячейки предпочтительны для использования в методе двухчастотной спектроскопии (см. также работы [26, 33]). В таких ячейках можно пренебречь зависимостью показателя поглощения \varkappa от переменной z, происходящей из-за присутствия медленных гармоник $\exp(\pm 2ik_{12}z)$. Иными словами, в выражении (42) переменную z, для упрощения, можно считать еще одним заданным параметром. Тогда уравнение (41) имеет весьма простое решение в виде известного закона Бугера:

$$I_2(z = L_{cell}) = I_{20} \exp[-\varkappa(I_1)L_{cell}].$$
 (43)

Здесь I_{20} — интенсивность пробного пучка на входе в ячейку, а $I_2(z = L_{cell})$ — на выходе из нее.

Таким образом, резонансное поглощение пробного поля E_2 описывается функцией $\varkappa(\delta)$. Между тем эта функция также зависит от скорости v атома. Поэтому в случае газа атомов необходимо провести ее усреднение по скоростям теплового движения с учетом распределения Максвелла:

$$\Upsilon(\delta) \equiv \left\langle \varkappa(\delta, \upsilon) \right\rangle_{\upsilon} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\upsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \varkappa(\delta, \upsilon) \exp\left(-\frac{\upsilon^2}{\upsilon_0^2}\right) d\upsilon \,, \quad (44)$$

где $v_0 = \sqrt{2k_BT/m_0}$ — наиболее вероятная скорость теплового движения атома в газе (k_B — постоянная Больцмана, m_0 — масса атома).

Для дальнейшего упрощения задачи и получения компактного аналитического выражения для $\Upsilon(\delta)$ воспользуемся приближением первого порядка по теории возмущений для пучка накачки, полагая $\xi_1 \ll 1$. Тогда, учитывая явный вид решений (36)–(38), приближенное выражение для показателя поглощения пробной волны примет вид

$$\varkappa \approx \frac{\beta \gamma \gamma_{eg}}{2} \left| L_2 \right|^2 \left[1 - \frac{3 + 2(1 - \beta)\gamma\tau}{1 + 2\gamma\tau} \xi_1 - \xi_1 \left(\cos \eta + \frac{\delta + kv}{\gamma_{eg}} \sin \eta \right) \right]. \quad (45)$$

Форма линии субдоплеровских резонансов в газе...

Как мы покажем далее, слагаемое в скобках, пропорциональное $\sin \eta$, после усреднения по скоростям приведет к важной особенности показателя поглощения — к появлению асимметрии нелинейного резонанса. С учетом приближения (45) усреднение по скоростям атомов становится тривиальным и приводит к выражению вида

$$\Upsilon_{total}(\delta) = \Upsilon_{lin}(\delta) + \Upsilon_{SAR}(\delta) + \Upsilon_{interCPT}(\delta), \quad (46)$$

где линейное поглощение пробного поля, не зависящее от интенсивности пучка накачки, описывается слагаемым

$$\Upsilon_{lin}(\delta) = \frac{\sqrt{\pi}\beta\gamma}{2\Delta_D} \Phi_r\left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D}\right),\tag{47}$$

которое приводит к формированию широкого контура Фойгта (см. рис. 1). В своей центральной части этот контур близок к доплеровскому контуру с полушириной по уровню e^{-1} , равной $\Delta_D = kv_0$. Поэтому в спектроскопии его часто также называют доплеровским. В последнем выражении была введена функция

$$\Phi_r(x) = \operatorname{Re}\left\{\exp(x^2)\left[1 - \operatorname{erf}(x)\right]\right\},\qquad(48)$$

где $\operatorname{erf}(x) - \phi$ ункция ошибок.

Второе и третье слагаемые в (46) описывают нелинейные эффекты. В частности, слагаемое Υ_{SAR} ответственно за резонанс насыщенного поглощения:

$$\Upsilon_{SAR}(\delta) = -\frac{3 + 2(1 - \beta)\gamma\tau}{1 + 2\gamma\tau} \frac{\sqrt{\pi}\beta^2 \gamma^3 \gamma_{eg}\tau}{8\Delta_D(\gamma_{eg}^2 + \delta^2)} \times \left[\Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D}\right) - \frac{\gamma_{eg}}{\delta} \Phi_i \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D}\right) \right] \frac{I_1}{I_{sat}}, \quad (49)$$

где

$$\Phi_i(x) = \operatorname{Im}\left\{\exp(x^2)\left[1 - \operatorname{erf}(x)\right]\right\},\tag{50}$$

а интенсивность насыщения введена стандартной формулой: $I_{sat} = 4\pi^2 \hbar c \gamma / \lambda^3$.

Слагаемое $\Upsilon_{interCPT}$ связано с образованием состояния КПН в атоме под действием волны накачки, которое взаимодействует с пробной волной:

$$\Upsilon_{interCPT}(\delta) = -\frac{\sqrt{\pi}\beta^2 \gamma^3 \gamma_{eg} \tau}{8\Delta_D \left(\gamma_{eg}^2 + \delta^2\right)} \times \left[\Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D}\right) - \frac{\gamma_{eg}}{\delta} \Phi_i \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D}\right) \right] \times \left(\cos \eta + \frac{\delta}{\gamma_{eg}} \sin \eta\right) \frac{I_1}{I_{sat}}.$$
 (51)

Выражениям (49) и (51) можно придать более простой вид, учитывая, что эти функции сконцентрированы по большей части в области $\delta \sim \gamma_{eg} \ll \ll \Delta_D$, поэтому

$$\Phi_r \approx 1 - 2\left(\frac{2\gamma_{eg}\delta}{\Delta_D^2}\right)^2 \approx 1, \quad \Phi_i \approx \frac{4\gamma_{eg}\delta}{\Delta_D^2} \ll 1.$$

Тогда для нелинейных вкладов в Υ имеем выражения

$$\Upsilon_{SAR}(\delta) \approx -\frac{3 + 2(1 - \beta)\gamma\tau}{1 + 2\gamma\tau} \times \frac{\sqrt{\pi}\beta^2 \gamma^3 \gamma_{eg}\tau}{8\Delta_D \left(\gamma_{eg}^2 + \delta^2\right)} \frac{I_1}{I_{sat}}, \quad (52)$$

$$\Upsilon_{interCPT}(\delta) \approx -\frac{\sqrt{\pi}\beta^2 \gamma^3 \tau}{8\Delta_D \left(\gamma_{eg}^2 + \delta^2\right)} \times \left(\gamma_{eg} \cos \eta\right) + \delta \sin \eta \left(\frac{I_1}{I_{sat}}\right).$$
(53)

Как видно из этих выражений, функция (52) является четной по δ и описывается простым доренцевским контуром. В то же время функция (53) содержит слагаемое $\delta \sin \eta$, что приводит к появлению асимметрии субдоплеровского резонанса при $\eta \neq \pi n$, где n = 0, 1, 2, ... Также из этих выражений следует, что функция Υ_{SAR} всегда будет иметь отрицательный знак, тогда как знаком функции $\Upsilon_{interCPT}$ можно управлять, меняя фазу η . В частности, особый интерес представляет случай, когда фаза $\eta = (2n-1)\pi$, при которой, как было показано в разд. 2.2, можно ожидать появления резонансного провала в проходящей через ячейку интенсивности пробного пучка. Для явной демонстрации такой возможности, исходя из полученных выражений, сравним относительные веса слагаемых Υ_{SAR} и $\Upsilon_{interCPT}$ при выбранной фазе η :

$$\frac{\Upsilon_{interCPT}}{\Upsilon_{SAR}} \approx -\frac{1+2\gamma\tau}{3+2(1-\beta)\gamma\tau}.$$
(54)

Отсюда следует, что в закрытой системе ($\beta = 1$) вклад от $\Upsilon_{interCPT}$ будет преобладать по модулю над вкладом от Υ_{SAR} при выполнении условия $\gamma \tau > 1$, которое обычно выполняется с хорошим запасом в экспериментах с атомами щелочных металлов. Таким образом, при $\eta = (2n - 1)\pi$ в закрытой системе выполняется условие $\Upsilon_{interCPT} \gg \Upsilon_{SAR}$, а с учетом того, что знаки у этих вкладов различаются, это обосновывает возможность наблюдения контрастного субдоплеровского резонанса в виде провала в проходящей через среду интенсивности света (рис. 1, сплошная кривая) вместо обычного резонанса насыщенного поглощения в виде пика пропускания (рис. 1, штриховая кривая). С другой стороны, в существенно открытой системе ($\beta \ll 1$), как легко видеть из выражения (54), вклад от Υ_{SAR} всегда будет хоть и незначительно, но преобладать над вкладом от $\Upsilon_{interCPT}$, и субдоплеровский резонанс будет иметь вид пика (провала) в пропускании (поглощении) ячейки. Эти выводы согласуются с численными решениями оптических уравнений Блоха, проведенными в работе [32].

Продемонстрируем сказанное выше графически. На рис. 3 изображены по отдельности линейный и нелинейные вклады в показатель поглощения $\Upsilon(\delta)$ при $\beta = 1$, $\eta = \pi$, $I_1 = 50$ мкВт/см², $\Delta_D =$ = $2\pi \cdot 230$ МГц, $\Gamma = 5 \cdot 10^{-2}\gamma$, $2\gamma = 2\pi \cdot 4.56$ МГц, $\lambda =$ = 894.6 нм — это соответствует *D*₁-линии цезия при температуре атомов около 50 °C и диаметре пучка около 0.5 мм, как в экспериментах с микроячейками. Интенсивность насыщения при этих параметрах равна примерно 2.5 мBт/см². На рис. 36 видно, что вклад от $\Upsilon_{interCPT}$ существенно превосходит вклад от Υ_{SAR} , что в результате и приводит к наблюдению однородно уширенного резонанса в виде высококонтрастного провала (пика) в прохождении (поглощении) света резонансной средой (см. рис. 1, сплошная кривая). Суммарное действие всех вкладов отражено на рис. Зв.

Выше мы отмечали важную особенность функции $\Upsilon(\delta)$, связанную с появлением асимметрии при $\eta \neq \pi n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$ На рис. 4a хорошо видна эта асимметрия при $\eta = \pi/2$, когда в выражении (53) $\sin \eta = 1$. Такого рода асимметрия обычно является нежелательной при использовании резонанса в качестве репера для стабилизации частоты в КСЧ, поскольку она приводит к появлению дополнительного сдвига сигнала ошибки, не связанного с динамическим штарковским сдвигом уровней энергии перехода. Поэтому фаза η должна хорошо контролироваться в экспериментах при стабилизации частоты излучения в рассматриваемой схеме с пробным пучком. Другая особенность полученных решений демонстрируется на рис. 4б и связана с исчезновением пика поглощения в существенно открытой системе. На рисунке субдоплеровский резонанс неразличим на фоне широкого доплеровского контура, поскольку $\Upsilon_{interCPT} \approx -\Upsilon_{SAR}$ при $\beta \ll 1$ и $\gamma \tau \gg 1.$



Рис. 3. Различные вклады в показатель поглощения пробного пучка: a — линейное поглощение (доплеровский контур); δ — нелинейные слагаемые Υ_{SAR} и $\Upsilon_{interCPT}$; e общий вид резонансной кривой с учетом всех вкладов. Параметры расчета приведены в тексте

2.4. Режим слабой стоячей волны

В этом разделе рассмотрим другой, часто используемый на практике, режим — поле стоячей световой волны. В этом режиме интенсивности встречных пучков близки ($I_1 \approx I_2$). В этом режиме будем интересоваться поглощением обоих встречных световых пучков в резонансной среде. Это связано с



Рис. 4. Общий вид резонансной кривой в следующих случаях: a — асимметрия субдоплеровского резонанса при $\beta = 1, \ \eta = \pi/2; \ \delta$ — отсутствие нелинейного резонанса в открытой системе при $\beta = 0.1, \ \eta = \pi$. Остальные параметры расчета такие же, как для рис. 3

тем, что в экспериментах режим стоячей световой волны чаще всего формируется простым отражением пучка E_1 , после его прохождения ячейки, обратно в ячейку с помощью зеркала (так формируется пучок E_2). Тогда на фотоприемнике наблюдается сигнал, пропорциональный поглощению обоих пучков.

Для получения аналитических выражений мы будем использовать теорию возмущений по пролетному параметру насыщения ξ , полагая $\xi_1 \sim \xi_2 \ll 1$ и $\gamma \tau > 1$. Эти условия соответствуют приближению узких световых пучков [44]. Отметим, что слагаемые в оптических уравнениях Блоха, пропорциональные $R_j^2 \tau \operatorname{Re} \{L_j\}$ (j = 1, 2) имеют порядок малости ξ_j или меньше. Также для упрощения задачи полагаем систему уровней закрытой ($\beta = 1$). Очевидно, что в нулевом порядке малости по $\xi_{1,2}$, т.е. в отсутствие поля, отличными от нуля являются только нулевые гармоники населенностей подуровней основного состояния: $\rho_{11,0}^{(0)} = \rho_{22,0}^{(0)} = 1/2$. Здесь и далее нижний индекс после запятой означает порядок по теории возмущений. С учетом этих значений, из уравнений, представленных в разд. 2.1, легко получить решение для следующих ненулевых элементов матрицы плотности в первом порядке теории возмущений:

$$\rho_{11,1}^{(0)} = \rho_{22,1}^{(0)} = -\frac{(\xi_1 + \xi_2)/2}{1 + 2\gamma\tau}, \qquad (55)$$

$$\rho_{33,1}^{(0)} = -2\rho_{11,1}^{(0)} = \frac{\xi_1 + \xi_2}{1 + 2\gamma\tau}, \qquad (56)$$

$$\rho_{12,1}^{(+)} = \rho_{21,1}^{(-)*} = -\frac{\xi_2}{2} e^{-i\theta} \,, \tag{57}$$

$$\rho_{12,1}^{(-)} = \rho_{21,1}^{(+)*} = -\xi_1/2.$$
(58)

При $\xi_2 = 0$ эти выражения совпадают с (36)–(38) в рассматриваемом приближении ($\xi_1 \ll 1$ и $\beta = 1$).

Из уравнений Максвелла – Блоха можно показать, что поглощение суммарного поля $E_1(z,t)$ + $+ E_2(z,t)$ пропорционально полной населенности возбужденного уровня ρ_{33} , т. е.

$$\frac{dI_t}{dz} \propto \rho_{33}(I_1, I_2, z) \,, \tag{59}$$

где $I_t = I_1 + I_2$. Исходя из выражения (7), величина ρ_{33} может быть представлена в виде

$$\rho_{33}(z) = \rho_{33}^{(0)} + 2 \operatorname{Re}\left\{\exp(2ik_{12}z)\rho_{33}^{(+)}\right\}, \qquad (60)$$

где, как и раныше, мы полагаем зависимость от координаты достаточно медленной, чтобы переменная z считалась параметром, постоянным на длине ячейки, — это избавляет от необходимости интегрирования по координате в (59). Далее, для краткости, мы приведем решения только для гармоник ρ_{33} , входящих в анализируемый сигнал (60). Так, во втором порядке теории возмущений имеем

$$\rho_{33,2}^{(0)} = -3\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{(1+2\gamma\tau)^2} - 6\frac{\xi_1\xi_2}{1+2\gamma\tau} - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{1+2\gamma\tau}.$$
 (61)

Первое слагаемое здесь описывает эффект самонасыщения среды под действием каждого из встречных пучков. Этот эффект отсутствовал при анализе поглощения только пробного пучка в линейном режиме (см. разд. 2.3). Далее следует слагаемое, пропорциональное произведению интенсивностей встречных пучков и описывающее, после усреднения по скоростям, резонанс насыщенного поглощения. Последнее слагаемое связано с образованием темных состояний в атомах под действием каждого из пучков по отдельности. Эти состояния начинают «конкурировать» в центре резонансной кривой, что описывается гармоникой $\rho_{33,2}^{(+)}$ и приводит, согласно выражению (60), к зависимости населенности возбужденного состояния от z. Выражение для этой гармоники имеет вид

$$\rho_{33,2}^{(+)} = -\frac{\xi_1 \xi_2}{1+2\gamma \tau} \left(1+i\frac{kv}{\gamma_{eg}}\right) e^{-i\theta}.$$
 (62)

Далее, по аналогии с (44), необходимо усреднить выражения (56), (61) и (62) по скоростям атомов. Для удобства мы введем краткое обозначение для усредненной населенности возбужденного уровня и запишем ее в следующем виде:

$$W(\delta) \equiv \langle \rho_{33}(\delta, v) \rangle_v =$$

= $W_{lin} + W_{SS} + W_{CPT} + W_{SAR} + W_{interCPT}$. (63)

Здесь первое слагаемое описывает линейное поглощение суммарного поля в ячейке, т.е. W_{lin}/I_t не зависит от интенсивности I_t :

$$W_{lin}(\delta) = \frac{\sqrt{\pi}\gamma^2 \tau}{2\Delta_D(1+2\gamma\tau)} \Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right) \frac{I_t}{I_{sat}}.$$
 (64)

Остальные слагаемые в (63) описывают различные нелинейные эффекты. Так, эффект самонасыщения среды от каждого из пучков по отдельности описывается вкладом

$$W_{SS}(\delta) = -\frac{3\gamma^4 \tau^2}{8\Delta_D \gamma_{eg} (1+2\gamma\tau)^2} \left[\frac{2\gamma_{eg}}{\Delta_D} + \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{2\gamma_{eg}^2}{\Delta_D^2} \right) \Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D} \right) + \frac{2\sqrt{\pi} \gamma_{eg} \delta}{\Delta_D^2} \Phi_i \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D} \right) \right] \frac{I_1^2 + I_2^2}{I_s^2} .$$
 (65)

Помимо самонасыщения каждый из пучков вдали от центра резонанса просветляет среду за счет накачки атомов в состояние КПН, что описывается очень похожим слагаемым:

$$W_{CPT}(\delta) = -\frac{\gamma^4 \tau^2}{8\Delta_D \gamma_{eg} (1+2\gamma\tau)} \left[\frac{2\gamma_{eg}}{\Delta_D} + \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{2\gamma_{eg}^2}{\Delta_D^2} \right) \Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D} \right) + \frac{2\sqrt{\pi} \gamma_{eg} \delta}{\Delta_D^2} \Phi_i \left(\frac{\gamma_{eg} + i\delta}{\Delta_D} \right) \right] \frac{I_1^2 + I_2^2}{I_s^2} .$$
 (66)

Последние две формулы можно записать в приближенном виде, поскольку выполняется соотношение $\gamma_{eq} \ll \Delta_D$:

$$W_{SS}(\delta) \approx -\frac{3\sqrt{\pi}\gamma^4 \tau^2}{8\Delta_D \gamma_{eg}(1+2\gamma\tau)^2} \times \\ \times \Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right) \frac{I_1^2 + I_2^2}{I_s^2}, \quad (67)$$

$$W_{CPT}(\delta) \approx -\frac{\sqrt{\pi}\gamma^4 \tau^2}{8\Delta_D \gamma_{eg}(1+2\gamma\tau)} \times \\ \times \Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right) \frac{I_1^2 + I_2^2}{I_s^2} \,. \tag{68}$$

Отметим, что эффекты, описываемые этими двумя слагаемыми, отсутствуют в показателе поглощения $\Upsilon(\delta)$, исследованном в предыдущем разделе. Это связано с тем, что этот показатель был рассчитан в линейном режиме по пробному полю, тогда как в настоящем разделе населенность $W(\delta)$ содержит в себе нелинейные эффекты от обоих пучков. Далее, как можно видеть из сравнения выражений (67) и (68), при формальном условии $\gamma \tau \gg 1$ эффект от накачки атомов в состояние КПН (W_{CPT}) преобладает над эффектом самонасыщения (W_{SS}) оптических переходов в Л-схеме. Это неудивительно, поскольку при увеличении времени взаимодействия с лазерным полем ($\tau \gg \gamma^{-1}$) атомы больше накапливаются в состоянии КПН, переставая взаимодействовать с излучением, чем испытывают эффект самонасыщения от выравнивания населенностей возбужденного и основных подуровней.

Нелинейный эффект, приводящий к резонансу насыщенного поглощения, описывается слагаемым

$$W_{SAR}(\delta) = -\frac{3\sqrt{\pi}\gamma^4 \gamma_{eg}\tau^2}{4\Delta_D (1+2\gamma\tau)^2 (\gamma_{eg}^2+\delta^2)} \times \left[\Phi_r \left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right) - \frac{\gamma_{eg}}{\delta}\Phi_i \left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right)\right] \frac{I_1 I_2}{I_s^2}.$$
 (69)

В отличие от слагаемых (65) и (66), последнее выражение описывает функцию, локализованную вблизи $\delta \sim \gamma_{eg}$. Поэтому, по аналогии с (49) и (52), эту функцию можно приближенно записать в виде простого лоренцевского контура:

$$W_{SAR}(\delta) \approx -\frac{3\sqrt{\pi}\gamma^4 \gamma_{eg}\tau^2}{4\Delta_D (1+2\gamma\tau)^2 (\gamma_{eg}^2+\delta^2)} \frac{I_1 I_2}{I_s^2} \,. \tag{70}$$

Последнее слагаемое в (63) связано с конкуренцией различных состояний КПН в центре резонанса, как это качественно описано в разд. 2.2. Это слагаемое имеет вид

$$W_{interCPT}(\delta) = -\frac{\sqrt{\pi}\gamma^4 \gamma_{eg}\tau^2 \cos\eta}{4\Delta_D (1+2\gamma\tau)(\gamma_{eg}^2+\delta^2)} \times \left[\Phi_r\left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right) - \frac{\gamma_{eg}}{\delta}\Phi_i\left(\frac{\gamma_{eg}+i\delta}{\Delta_D}\right)\right] \frac{I_1 I_2}{I_s^2}.$$
 (71)

Как и предыдущее слагаемое, выражение для $W_{interCPT}$ можно приближенно записать в более простой форме, описываемой функцией Лоренца:

$$W_{interCPT}(\delta) \approx \\ \approx -\frac{\sqrt{\pi}\gamma^4 \gamma_{eg} \tau^2 \cos \eta}{4\Delta_D (1+2\gamma\tau)(\gamma_{eg}^2+\delta^2)} \frac{I_1 I_2}{I_s^2} \,. \tag{72}$$

Из этого выражения вытекает важное следствие. А именно, как мы видели в разд. 2.3, в линейном режиме по пробному полю нелинейный резонанс может приобретать асимметрию при $\eta \neq \pi n$. В данном случае функция (72) не содержит нечетных по δ слагаемых, в отличие от функции Υ_{CPT} из (53). Это связано с тем, что в режиме стоячей волны мы рассматриваем полное поглощение поля в резонансной среде, а не поглощение какого-либо одного пучка.

Так же, как и в случае с $\Upsilon_{interCPT}$ и Υ_{SAR} в разд. 2.3, можно легко показать, что вклад от $W_{interCPT}$ преобладает над вкладом от W_{SAR} , что при $\cos \eta < 0$ может приводить к образованию контрастного пика в поглощении среды. Действительно, по аналогии с (54) при $\eta = \pi$ имеем

$$\frac{W_{interCPT}}{W_{SAR}} \approx -\frac{1+2\gamma\tau}{3} \,. \tag{73}$$

Это выражение совпадает с (54) при $\beta = 1$. Отсюда следует, что при $\gamma \tau \gg 1$ выполняется соотношение $|W_{interCPT}| \gg |W_{SAR}|$ между вкладами от двух нелинейных эффектов.

Далее, как и в разд. 2.3, проиллюстрируем графически различные вклады в общий сигнал (63). На рис. 5 представлены парциальные вклады от линейного поглощения и от различных нелинейных эффектов в населенность W возбужденного уровня при таких же параметрах, как для рис. 3. В рассматриваемом режиме стоячей волны эти параметры следует дополнить интенсивностью второго пучка: $I_2 = I_1 = 50$ мкВт/см². Как видно на рис. 5*a*, доплеровский контур линейного поглощения светового поля (штриховая кривая) имеет амплитуду больше, чем соответствующая амплитуда суммарного резонанса (сплошная). Это является следствием проявления двух нелинейных эффектов: самонасыщения (рис. 56, штриховая кривая) и накачки в состояние КПН (рис. 56, сплошная). Причем последний



Рис. 5. Различные вклады в показатель поглощения пробного пучка: a — линейное поглощение Υ_{lin} (доплеровский контур); δ — нелинейные слагаемые Υ_{SAR} и $\Upsilon_{interCPT}$; e — общий вид резонансной кривой с учетом всех вкладов. Параметры расчета приведены в тексте

эффект влияет на величину доплеровского поглощения гораздо сильнее. Центральный (субдоплеровский) резонанс на рис. 5*a* (сплошная кривая) формируется в результате конкуренции двух субдоплеровских спектральных структур, изображенных на 5*e*. Из этого рисунка следует, что амплитуда резонанса, возникающего вследствие конкуренции раз-



Рис. 6. а) Резонансная кривая при различных значениях фазы η . б) Осцилляции амплитуды субдоплеровского резонанса при изменении фазы η . Параметры расчета такие же, как для рис. 5

личных состояний КПН (сплошная кривая) существенно больше амплитуды резонанса насыщенного поглощения, что и приводит к появлению субдоплеровского резонанса в виде пика поглощения или провала в прозрачности среды, как на рис. 1 или 5*a* (сплошные кривые).

Рисунок 6*a* демонстрирует симметричность резонанса при фазе $\eta \neq \pi n$ в отличие от режима пробного пучка (ср. с рис. 4*a*). Рисунок 6*б* отражает эффект пространственных осцилляций амплитуды субдоплеровского резонанса при вариации фазы η , который был предсказан в работе [32] на основе численных расчетов и подтвержден экспериментально в работах [26, 33].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе построена теория и получены аналитические выражения для формы линии
субдоплеровских резонансов, наблюдаемых в поле встречных бихроматических лазерных пучков. При этом в явном виде выделены слагаемые, отвечающие за различные линейные и нелинейные эффекты в поглощении поля резонансной средой. На основе полученных формул дано теоретическое объяснение эффекта возникновения высококонтрастного пика поглощения, который может быть использован для создания миниатюрных оптических стандартов частоты нового поколения. Выполнено сравнение двух режимов наблюдения субдоплеровских резонансов: режима стоячей волны и режима пробного поля. Показано, что в первом случае не наблюдается асимметрия нелинейного резонанса, что может явиться ключевым фактором при выборе конкретной схемы реализации оптического КСЧ. Действительно, подобного рода асимметрия резонанса может приводить к нежелательным сдвигам частоты КСЧ при ее стабилизации по субдоплеровскому резонансу методом синхронного детектирования и формирования сигнала ошибки. В таком случае асимметрия приводит к сдвигу сигнала ошибки, что может сказаться на долговременной стабильности КСЧ. В целом, полученные результаты существенно дополняют теорию высококонтрастных субдоплеровских резонансов в бихроматическом лазерном поле, ранее построенную лишь на основе численных расчетов.

Финансирование. Работа А. М. Михайлова и Д. В. Бражникова была поддержана грантами Российского научного фонда (17-72-20089) и Российского фонда фундаментальных исследований (20-02-00075). Р. Будо благодарит за поддержку Национальное агентство научных исследований (Agence Nationale de la Recherche) в рамках проекта "LabeX FIRST-TF" (грант ANR 10-LABX-0048).

ЛИТЕРАТУРА

- V. S. Letokhov and V. P. Chebotayev, Nonlinear Laser Spectroscopy, Springer, Berlin (1977).
- T. W. Hänsch, S. A. Lee, R. Wallenstein, and C. Wieman, Phys. Rev. Lett. 34, 307 (1975).
- J. L. Hall, C. J. Borde, and K. Uehara, Phys. Rev. Lett. 37, 1339 (1976).
- С. Н. Багаев и В. П. Чеботаев, Письма в ЖЭТФ 16, 614 (1972) [S. N. Bagaev and V. P. Chebotaev, JETP Lett. 16, 433 (1972)].
- M. Takamoto, I. Ushijima, N. Ohmae et al., Nature Photon. 14, 411 (2020).

- R. M. Godun, P. B. R. Nisbet-Jones, J. M. Jones et al., Phys. Rev. Lett. 113, 210801 (2014).
- S. Haroche and F. Hartmann, Phys. Rev. A 6, 1280 (1972).
- M. A. Gubin, D. A. Tyurikov, A. S. Shelkovnikov et al., IEEE J. Quant. Elect. 31, 2177 (1995).
- S. N. Bagayev, A. K. Dmitriyev, and P. V. Pokasov, Laser Phys. 7, 989 (1997).
- G. Galzerano, C. Svelto, A. Onae, and E. Bava, SPIE Proc. 4269, 224 (2001)
- S. M. Ignatovich, M. N. Skvortsov, V. I. Vishnyakov et al., J. Phys. Conf. Ser. **793**, 012010 (2017).
- C. Affolderbach and G. Mileti, Rev. Sci. Instrum. 76, 073108 (2005).
- N. Almat, W. Moreno, M. Pellaton et al., IEEE Trans. Ultrason. Ferr. 65, 919 (2018).
- 14. T. Schuldt, K. Döringshoff, E. V. Kovalchuk et al., Appl. Opt. 56, 1101 (2017).
- V. Schkolnik, K. Döringshoff, F. B. Gutsch et al., Eur. Phys. J. Quant. Techn. 4, 9 (2017).
- G. Alzetta, A. Gozzini, L. Moi, and G. Orriols, Nuovo Cim. B 36, 5 (1976).
- H. Zhang, K. Okada, H. Herdian et al., IEEE J. Sol. St. Circ. 54, 3135 (2019).
- R. Vicarini, M. Abdel Hafiz, V. Maurice et al., IEEE Trans. Ultrason. Ferr. 66, 1962 (2019).
- М. Н. Скворцов, С. М. Игнатович, В. И. Вишняков и др., КЭ 50, 576 (2020) [М. N. Skvortsov, S. M. Ignatovich, V. I. Vishnyakov et al., Quant. Electron. 50, 576 (2020)].
- 20. C. L. Chow, M. Cho, K. Aheieva et al., Overview of Project SPATIUM - Space Precision Atomic-Clock Timing Utility Mission, in Proc. 33rd Annual AIAA/USU Conf. on Small Satellites, Logan, Utah, USA 3-8 August (2019), paper No. SSC19-WKVII-07.
- J. W. Conklin, S. Nydam, T. Ritz et al., Preliminary Results from the CHOMPTT Laser Time-Transfer Mission, in [20], paper No. SSC19-VI-03.
- 22. M. T. Hummon, S. Kang, D. G. Bopp et al., Optica 5, 443 (2018).
- 23. Z. L. Newman, V. Maurice, T. E. Drake et al., Optica6, 680 (2019).
- 24. V. Maurice, Z. Newman, S. Dickerson et al., Opt. Express 28, 24708 (2020).

- Z.L. Newman, V. Maurice, C. Fredrick et al., arXiv:2105.00610v1 [physics.atom-ph].
- 26. D. Brazhnikov, M. Petersen, G. Coget et al., Phys. Rev. A 99, 062508 (2019).
- M. Abdel Hafiz, G. Coget, E. De Clercq, and R. Boudot, Opt. Lett. 41, 2982 (2016).
- 28. D. V. Brazhnikov, S. M. Ignatovich, I. S. Mesenzova et al., J. Phys. Conf. Ser. 1859, 012019 (2021).
- 29. P. Yun, F.Tricot, C. E. Calosso et al., Phys. Rev. Appl. 7, 014018 (2017).
- 30. M. Abdel Hafiz, G. Coget, M. Petersen et al., J. Appl. Phys. 121, 104903 (2017).
- 31. M. Zhao, X. Jiang, R. Fang et al., Appl. Opt. 60, 5203 (2021).
- 32. M. Abdel Hafiz, D. V. Brazhnikov, G. Coget et al., New J. Phys. 19, 073028 (2017).
- Д. В. Бражников, С. М. Игнатович, И. С. Месензова и др., КЭ 50, 1015 (2020) [D. V. Brazhnikov, S. M. Ignatovich, I. S. Mesenzova et al., Quant. Electron. 50, 1015 (2020)].
- 34. S. N. Bagayev, V. P. Chebotayev, and E. A. Titov, Laser Phys. 4, 224 (1994).

- 35. E. Arimondo and G. Orriols, Lett. Nuovo Cim. 17, 333 (1976).
- 36. H. R. Gray, R. M. Whitley, and C. R. Stroud, Jr., Opt. Lett. 3, 218 (1978).
- 37. K.-J. Boller, A. Imamoglu, and S. E. Harris, Phys. Rev. Lett. 66, 2593 (1991).
- 38. L. V. Hau, S. E. Harris, Z. Dutton, and C. H. Behroozi, Nature 397, 594 (1999).
- 39. V. G. Arkhipkin and I. V. Timofeev, Phys. Rev. A 64, 053811 (2001).
- 40. V. I. Yudin, M. Yu. Basalaev, D. V. Brazhnikov, and A. V. Taichenachev, Phys. Rev. A 88, 023862 (2013).
- 41. D. V. Brazhnikov, A. V. Taichenachev, and V. I. Yudin, Eur. Phys. J. D 63, 315 (2011).
- 42. S. G. Rautian and A. M. Shalagin, *Kinetic Problems of Nonlinear Spectroscopy*, North-Holland, Amsterdam (1991).
- 43. E. Arimondo, Progr. Opt. 35, 257 (1996).
- 44. Д. Б. Лазебный, Д. В. Бражников, А. В. Тайченачев и др., ЖЭТФ 148, 1068 (2015) [D. B. Lazebnyi, D. V. Brazhnikov, A. V. Taichenachev et al., JETP 121, 934 (2015)].

ОСОБЕННОСТИ ДВИЖЕНИЯ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ АТОМОВ В КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

И. А. Дынников^а, А. Я. Мальцев^{b*}

^а Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук 119991, Москва, Россия

^b Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> Поступила в редакцию 28 июля 2021 г., после переработки 8 августа 2021 г. Принята к публикации 12 августа 2021 г.

Мы рассматриваем квазипериодические потенциалы на плоскости, которые могут служить «переходным звеном» между упорядоченными (периодическими) и хаотическими (случайными) потенциалами. Практически в любом семействе квазипериодических потенциалов, зависящих от некоторого набора параметров, можно выделить множество (в пространстве параметров), где, согласно определенному критерию, возникают потенциалы, обладающие признаками упорядоченных потенциалов, и множество, где возникают потенциалы, обладающие признаками случайных потенциалов. Эти множества дополняют друг друга в полном пространстве параметров, при этом каждое из них имеет свою специфическую структуру. Различие между «упорядоченными» и «хаотическими» потенциалами будет проявляться, в частности, в транспортных свойствах при различных значениях энергии, которые мы будем рассматривать здесь применительно к системам ультрахолодных атомов. Отметим здесь также, что транспортные свойства частиц в рассматриваемых потенциалах могут сопровождаться явлениями «частичной интегрируемости», свойственными двумерным гамильтоновым системам.

DOI: 10.31857/S0044451021120075

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе мы рассмотрим приложения полученных сравнительно недавно результатов в теории квазипериодических функций на плоскости к динамике ультрахолодных атомов в квазипериодических потенциалах. Общая теория квазипериодических функций представляет в настоящее время классическую область математики и математической физики, истоки которой восходят к исследованиям Бора и Безиковича [1,2]. В разных источниках можно встретить несколько различающиеся определения квазипериодической функции. Здесь будем называть квазипериодической функцией на плоскости функцию f(x, y), полученную ограничением гладкой *d*-периодической функции $F(z^1, \ldots, z^d)$ при афинном вложении $\mathbb{R}^2 \subset \mathbb{R}^d$ общего положения. Размерность *d* мы при этом будем называть числом квазипериодов соответствующей квазипериодической функции на плоскости.

$$f(x,y) \le \epsilon_0 \tag{1.1}$$

для различных значений энергии ϵ_0 . Функция f(x, y) будет играть при этом роль потенциала, в котором рассматривается двумерная динамика частицы. Легко видеть, что если динамика является чисто классической, то такие области играют роль «областей доступности», в которых может оказаться частица с энергией ϵ_0 . Как мы увидим ниже, сложность движения частицы, свойственная в общем случае любой гамильтоновой динамике, может складываться со сложностью геометрии соответствующих «областей доступности», способных обладать определенными «хаотическими свойствами».

Кроме геометрии «областей доступности» для частицы с заданной энергией нам будет также интересно описание изменений этой геометрии при изменении параметров, задающих функцию f(x, y) в

Вопросы, рассматриваемые нами здесь, будут главным образом связаны с геометрией областей, задаваемых соотношением

^{*} E-mail: maltsev@itp.ac.ru

реальных системах. В частности, может представлять интерес управление динамикой газа частиц в квазипериодических потенциалах путем изменения таких параметров.

Нетрудно видеть, что геометрия областей (1.1) тесно связана в действительности с геометрией линий уровня

$$f(x,y) = \epsilon_0 \tag{1.2}$$

функции f(x, y), ограничивающих эти области при соответствующих значениях ϵ_0 . Можно также сказать, что каждая из областей (1.1) является объединением линий уровня (1.2) для всех $\epsilon'_0 \leq \epsilon_0$.

Общая задача описания геометрии линий уровня квазипериодических функций на плоскости была поставлена Новиковым в начале 1980-х годов [3] и затем активно исследовалась в его топологической школе [4–11]. В своей первоначальной постановке она предполагала исследование геометрии линий уровня функций с тремя квазипериодами, что совпадает в действительности с задачей описания геометрии линий пересечения произвольной 3периодической двумерной поверхности в \mathbb{R}^3 плоскостями заданного направления. В такой постановке задача Новикова имеет самое непосредственное отношение к задаче описания динамики электронов в металлах со сложными поверхностями Ферми, которая, в свою очередь, играет важнейшую роль при описании гальваномагнитных явлений в металлах [12–18]. Отметим здесь, что результаты, полученные при исследовании задачи Новикова в этом случае, оказались весьма важны для описания гальваномагнитных явлений в металлах в наиболее общей ситуации. В частности, оказалось возможным определить нетривиальные топологические числа, наблюдаемые в проводимости нормальных металлов со сложными поверхностями Ферми в достаточно сильных магнитных полях [19]. Кроме того, полная классификация возможных типов динамики (траекторий) электронов на поверхности Ферми позволила дать также полное описание различных асимптотических режимов поведения проводимости в металлах с произвольными поверхностями Ферми в пределе сильных магнитных полей [20-22].

В целом, задача Новикова для произвольного числа квазипериодов тесно связана с теорией слоений и теорией динамических систем на многообразиях. В частности, эта связь также играет важнейшую роль при исследованиях задачи Новикова для четырех квазипериодов (см. [23,24]), позволивших получить ряд основополагающих результатов для этого случая.

В данной работе мы постараемся использовать наиболее полным образом результаты, полученные к настоящему времени при исследовании задачи Новикова, для описания главных особенностей динамики частиц в потенциалах, связанных с этой задачей. Кроме того, анализ результатов, полученных для задачи Новикова, позволяет, в действительности, предложить критерий, разделяющий все квазипериодические потенциалы (с тремя и более квазипериодами) на два типа, а именно, потенциалы с топологически регулярными линиями уровня и потенциалы с хаотическими линиями уровня. Если рассматривать квазипериодические потенциалы как модель перехода между периодическими и случайными потенциалами, то потенциалы первого типа можно отнести к потенциалам, динамика в которых сохраняет некоторую топологическую интегрируемость, а потенциалы второго типа — к потенциалам, динамика в которых близка к динамике в случайных потенциалах. В этом смысле, только потенциалы второго типа могут представлять собой модели случайных потенциалов.

В действительности, довольно часто квазипериодические потенциалы возникают некоторыми семействами (и так будет в данной работе), т. е. мы имеем, как правило, целое семейство функций $V(x, y, \mathbf{U})$, зависящих гладким образом от ряда дополнительных параметров $\mathbf{U} = (U^1, \dots, U^N)$. В этой ситуации важным является то, что потенциалы разных типов возникают, как правило, на множествах, обладающих весьма специфической структурой. Так, потенциалы первого типа, будучи устойчивы по отношению к малым вариациям параметров, возникают на открытых множествах в полном пространстве параметров. Более того, это множество является объединением (конечного или счетного) числа областей (зон устойчивости), каждая из которых определяется своим значением некоторого топологического инварианта (набором целых чисел). Напротив, потенциалы второго типа возникают на множествах фрактального типа, образованных дополнениями к описанным выше множествам.

Можно видеть, таким образом, что для создания квазипериодических потенциалов, наиболее близких к истинно случайным потенциалам, необходимо нахождение довольно сложного множества в пространстве параметров, задающих квазипериодические потенциалы рассматриваемого семейства. Можно отметить здесь также, что с ростом числа квазипериодов такое множество становится все более и более богатым. Наиболее удобными системами для экспериментального изучения динамики в квазипериодических потенциалах нам представляются системы ультрахолодных атомов в оптических ловушках, где такие потенциалы могут быть легко реализованы путем наложения нескольких стоячих волн. Надо сказать, что, несмотря на специальную методику создания таких потенциалов, они, в действительности, обладают всеми особенностями задачи Новикова в общей постановке, так что такие системы позволяют изучать все существенные аспекты рассматриваемой нами задачи.

Мы будем, как уже сказано выше, заниматься изучением динамики частиц в таких потенциалах при различных энергиях частицы. Приведенные результаты, таким образом, будут иметь прямое отношение к описанию транспортных явлений в пределе почти не взаимодействующих атомов в ловушках с рассматриваемыми потенциалами. Этот предел, в действительности, возникает довольно часто в случае малой концентрации (нейтральных) атомов, захваченных в ловушку, а также малого радиуса их взаимодействия. В нашем случае мы должны потребовать, чтобы средняя длина свободного пробега атомов была больше типичной длины, на которой проявляются глобальные геометрические особенности их траекторий в рассматриваемом потенциале. При этом двумерные гамильтоновы системы обладают, как правило, весьма специальной динамикой [25,26], будучи интегрируемыми на достаточно низких уровнях энергии и переходя к хаотическим режимам при повышении энергии. В нашем случае, мы будем иметь возможность наблюдать, как данное обстоятельство коррелирует с геометрией линий уровня наших потенциалов.

2. ОБЩИЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ. РЕГУЛЯРНЫЕ И СЛУЧАЙНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Как хорошо известно, наиболее распространенным методом создания внешних потенциалов для атомов в оптических ловушках является интерференция стоячих волн от дополнительных лазерных источников [27–31]. В главном приближении такие потенциалы имеют обычно конечное число гармоник, т. е. представимы в виде суммы конечного числа синусоидальных потенциалов. Несмотря на это обстоятельство, как мы увидим ниже, в рассматриваемых нами ситуациях такие потенциалы обладают уже достаточной сложностью, и для описания атомной динамики в них необходимо представить полную картину, возникающую при исследовании общей задачи Новикова.

Нетрудно видеть, что рассматриваемая нами задача быстро усложняется с ростом числа квазипериодов. Как мы уже сказали, строгие аналитические результаты существуют на данный момент лишь для случая трех и четырех квазипериодов. Здесь удобно для сравнения кратко рассмотреть также ситуациии «одного» и «двух» квазипериодов, отвечающие периодическим потенциалам, зависящим лишь от одной координаты, и двояко-периодическим потенциалам на плоскости соответственно.

В нашей ситуации случай «одного» квазипериода будет соответствовать в действительности наличию весьма простого потенциала, который часто можно приближенно записать в виде

$$V(x,y) = V_0 \sin kx, \qquad (2.1)$$

где $T = 2\pi/k$ представляет собой обычный период потенциала вдоль оси x. Создание потенциалов такого типа является наиболее простым с технической точки зрения и, конечно, такие потенциалы широко используются в системах холодных атомов.

Линии уровня потенциала (2.1), очевидно, представляют собой вертикальные прямые, а движение атомов в таком потенциале происходит в прямых вертикальных полосах при $E < V_0$. В действительности, легко видеть, что в данной ситуации движение атома ограничено вертикальной полосой при условии

$$E - p_y^2 / 2m < V_0,$$

при этом атом совершает периодические осцилляции по оси x и движется равномерно вдоль оси y. При нарушении приведенного выше условия, очевидно, атом движется вдоль периодической траектории, имеющей ненулевой средний наклон по отношению к оси y. Нетрудно видеть, что аналогичные условия могут быть выписаны также в движущейся равномерно системе отчета, что позволяет также дать аналогичное описание движения атомов в потенциалах вида

$$V(x, y, t) = V_0 \sin k(x - ut).$$

Здесь можно видеть, что при достаточно низких энергиях атомов и значении скорости u движущийся потенциал осуществляет полную «транспортировку» атомного газа вдоль оси x. В общем случае, при значительном разбросе энергий движущийся потенциал позволяет осуществлять лишь частичную «транспортировку» атомного газа. Геометрия линий уровня дважды периодического потенциала на плоскости (с двумя независимыми периодами \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2) также имеет сравнительно простое описание. Как и в случае «одного» квазипериода, значения потенциала V(x, y) лежат здесь в некотором замкнутом отрезке $[V_{min}, V_{max}]$. Нетрудно видеть при этом, что для потенциалов общего положения линии уровня потенциала являются замкнутыми при значениях E, достаточно близких к V_{min} или V_{max} . В первом случае, однако, замкнутые линии уровня ограничивают области меньших значений потенциала, в то время как во втором случае они ограничивают области больших значений. В случае общего положения при этом имеются два различных значения V_1, V_2 :

$$V_{min} < V_1 < V_2 < V_{max},$$

таких что при всех фиксированных значениях V(x, y), лежащих в интервале (V_1, V_2) , соответствующие уровни содержат открытые (незамкнутые) компоненты. Все открытые компоненты (линии) уровня потенциала V(x, y) являются в этом случае периодическими кривыми, имеющими одно и то же среднее направление в плоскости (для всех уровней в интервале (V_1, V_2)). Среднее направление открытых линий уровня может быть при этом любым целочисленным направлением, т. е. направлением, задаваемым вектором

$$\mathbf{l} = n_1 \, \mathbf{e}_1 + n_2 \, \mathbf{e}_2$$

с некоторыми целыми (n_1, n_2) . Отметим, что наиболее естественным является при этом определить числа (n_1, n_2) как несократимую пару целых чисел, заданную с точностью до общего знака.

Все открытые линии уровня при заданном значении потенциала можно разделить на конечное число семейств, таких что все линии одного семейства переходят друг в друга при сдвиге на некоторый период V(x, y). Число таких различных семейств всегда является четным (хотя может меняться внутри интервала (V_1, V_2) для достаточно сложных потенциалов).

Можно видеть, таким образом, что движение атомов в периодических потенциалах общего положения происходит в ограниченных областях при $V_{min} < \epsilon_0 < V_1$, в периодических полосах (а также, возможно, и изолированных ограниченных областях) при $V_1 < \epsilon_0 < V_2$, в плоскости с исключенными ограниченными областями (и, возможно, изолированных ограниченных областях) при $V_2 < \epsilon_0 < V_{max}$ и во всей плоскости при $\epsilon_0 > V_{max}$. При адиабатиче-





Рис. 1. Периодическая сеть сингулярных линий уровня, отделяющая области меньших значений от областей больших значений периодического потенциала

ских сдвигах потенциала в плоскости атомы, находящиеся в ограниченных областях, сдвигаются вмести с ними, в то время как атомы, находящиеся в периодических полосах, сдвигаются вместе с полосами лишь при движении в направлении, перпендикулярном к полосам. В отличие от случая «одного» квазипериода, однако, здесь сдвиг потенциала вдоль направления полос также оказывает влияние на движение атомов, поскольку полосы имеют теперь нетривиальную форму.

Для периодических потенциалов необщего положения (например, имеющих элементы вращательной симметрии) значения V_1 и V_2 могут совпадать. Открытые линии уровня у таких потенциалов отсутствуют, а на уровне $V_1 = V_2$ возникает сингулярная сеть (рис. 1), отделяющая области меньших значений V(x, y) от областей больших значений. Атомы движутся в ограниченных областях при $V_{min} < \epsilon_0 < V_1 = V_2$ и во всей плоскости с исключенными ограниченными областями (и, возможно, изолированных ограниченных областях) при $V_1 = V_2 < \epsilon_0 < V_{max}$.

Методы создания периодических потенциалов в плоскости естественно подразумевают наличие некоторого конечного числа параметров, описывающих такие потенциалы. Например, при формировании потенциала с помощью наложения двух синусоидальных стоячих волн (с генерацией высших гармоник или без нее) такими параметрами могут быть ориентации обеих синусоид, их амплитуды, периоды, положения максимумов, возможно, угол между их поляризациями и относительный сдвиг фаз. Нетрудно видеть, что в этом случае сдвиг максимумов любой из синусоид приводит в действительности к сдвигу результирующего потенциала как целого и не меняет качественно рассматриваемой нами картины.

Что касается более общих (непрерывных) вариаций описанных выше параметров, то здесь можно отметить одну общую важную особенность. А именно, потенциалы общего положения образуют открытое множество, т.е. соотношение $V_2 > V_1$ является устойчивым по отношению к произвольному малому изменению параметров. Напротив, условие $V_1 = V_2$ является неустойчивым и разрушается при сколь угодно малой вариации параметров общего вида. Кроме этого, локально устойчивыми являются также числа (n_1, n_2) , связывающие средние направления открытых линий уровня с периодами потенциала (хотя сами \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 могут меняться с изменением параметров), которые могут меняться лишь при переходе потенциала через ситуацию необщего положения ($V_1 = V_2$). Таким образом, можно видеть, что полное пространство параметров можно в общем случае разделить на области, соответствующие различным целочисленным парам (n_1, n_2) и разделенные границами, на которых имеет место соотношение $V_1 = V_2$.

Здесь мы хотели бы также сразу отметить, что несмотря на сравнительно простое описание «областей доступности» в периодических потенциалах при любых значениях энергии, консервативная динамика холодных атомов в таких потенциалах может обладать весьма нетривиальными свойствами [32–34].

Мы перейдем теперь к рассмотрению потенциалов с большим числом квазипериодов, что и будет составлять основное содержание нашей работы.

Создание квазипериодических потенциалов в системах ультрахолодных атомов с помощью интерференции стоячих волн также привлекало интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. В частности, такие потенциалы рассматривались как в случае трехмерных [35], так и в случае двумерных [36-39] оптических решеток для плененных атомов в магнитооптических ловушках (см. также обзор по созданию, удержанию и мониторингу поведения газов ультрахолодных атомов в том числе в потенциалах различной формы в работе [40]). Можно отметить также, что квазипериодические (квазикристаллические) структуры в двумерных системах взаимодействующих ультрахолодных атомов могут возникать и при отсутствии специальной внешней модуляции [41].

Как мы уже сказали выше, нас здесь будут интересовать квазипериодические потенциалы для двумерных систем ультрахолодных атомов. Мы рас-



Рис. 2. Наложение трех стоячих волн в плоскости с образованием потенциала с тремя квазипериодами (схематично). (Векторы η_i указывают направления фронтов волн, а векторы \mathbf{a}_i — сдвиги между максимумами их амплитуд)

смотрим здесь случаи трех и четырех квазипериодов, для которых на данный момент имеются глубокие аналитические результаты. В данном разделе мы просто сформулируем строгие аналитические результаты, полученные для таких потенциалов к настоящему времени. В следующем разделе мы более детально рассмотрим особенности возникающей здесь геометрии на конкретных примерах.

Как мы отметили, наиболее глубоко исследованной является на данный момент задача Новикова с тремя квазипериодами, которую мы и рассмотрим здесь наиболее подробно. В рассматриваемой нами методике создания потенциалов в плоскости эта ситуация соответствует потенциалам, получаемым наложением трех синусоидальных стоячих волн, ориентированных под разными углами (с появлением высших гармоник или без него) (рис. 2).

Наложение трех (и более) стоячих волн в решетках холодных атомов может использоваться не только для создания квазипериодических, но и интересных периодических потенциалов в двумерных системах (в частности, такая схема была предложена в работе [42] для создания шестиугольных (сотовых) решеток и в работе [43] для создания тришестиугольных (Кагоме) решеток). В этом случае волновые числа соответствующих волн должны, вообще говоря, удовлетворять ряду специальных дополнительных условий. В нашей ситуации мы будем предполагать, что волновые числа являются независимыми параметрами на пространстве рассматриваемых потенциалов. В случае общего положения рассматриваемые нами потенциалы не будут иметь точных периодов в плоскости, которые могут возникать лишь для специальных значений параметров.

Как мы уже говорили, приводимые ниже результаты будут основываться лишь на квазипериодических свойствах возникающих при этом потенциалов, поэтому многие дополнительные детали их возникновения не будут, в действительности, играть какой-либо роли.

Нетрудно видеть, что потенциал, порожденный тремя синусоидальными волнами (и высшими гармониками),

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{3} V_i \cos(\mathbf{k}_{(i)}\mathbf{r} + \delta_i) + \dots,$$

является ограничением периодической в \mathbb{R}^3 функции

$$V(X^1, X^2, X^3) = \sum_{i=1}^{3} V_i \cos X^i + \dots$$

при афинном вложени
и $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3,$ задаваемом формулами

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} k_{(1)}^{1}x + k_{(1)}^{2}y + \delta_{1} \\ k_{(2)}^{1}x + k_{(2)}^{2}y + \delta_{2} \\ k_{(3)}^{1}x + k_{(3)}^{2}y + \delta_{3} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{(1)}\mathbf{r} + \delta_{1} \\ \mathbf{k}_{(2)}\mathbf{r} + \delta_{2} \\ \mathbf{k}_{(3)}\mathbf{r} + \delta_{3} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Можно отметить при этом, что потенциалам, различающимся лишь сдвигами максимумов стоячих волн (δ_i), отвечает одна и та же функция $V(X^1, X^2, X^3)$ в \mathbb{R}^3 , и их различие обусловлено лишь изменением афинного вложения $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$, при котором плоскость \mathbb{R}^2 сдвигается в \mathbb{R}^3 , сохраняя свое направление.

Как мы уже сказали, даже квазипериодеские потенциалы, содержащие небольшое число гармоник, обладают уже достаточной сложностью, позволяющей наблюдать все аспекты общей задачи Новикова для трех квазипериодов, поэтому мы будем проводить рассмотрение описанной нами задачи исходя из общих результатов для функций с тремя квазипериодами. Ниже мы сформулируем в наиболее удобной для нас здесь форме ряд основополагающих результатов для общей задачи Новикова, следующих из результатов работ [4–11]. Аналогичные утверждения для искусственно создаваемых потенциалов в плоскости, в действительности, приводились в работе [44], где изучались электронные транспортные явления в таких потенциалах в присутствии сильного магнитного поля. Отметим, однако, что в работе [44] главную роль играла геометрия линий уровня квазипериодических потенциалов, а не геометрия областей их меньших значений, которую мы будем рассматривать здесь.

Нам будет удобно начать с замечания, что, хотя этого и не происходит в случае общего положения, потенциалы, полученные описанным нами способом, могут быть и периодическими. Такая ситуация возникает всякий раз, когда соответствующая плоскость $\mathbb{R}^2 \subset \mathbb{R}^3$ является целочисленной (рациональной), т.е. содержит два независимых целочисленных вектора в \mathbb{R}^3 . Нетрудно видеть, что соответствующие потенциалы являются всюду плотными среди всех рассматриваемых нами потенциалов, при этом их периодические свойства определяются значениями параметров $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$. Для описания линий уровня таких потенциалов могут быть использованы все сделанные ранее утверждения о периодических потенциалах, однако, здесь надо сразу отметить, что подавляющее большинство этих потенциалов будут иметь весьма большие (по абсолютной величине) периоды e_1 и e_2 . Как следствие этого, описанные выше свойства линий уровня таких потенциалов будут наблюдаться лишь на очень больших масштабах, при этом на меньших масштабах их линии уровня могут обладать совсем другими нетривиальными свойствами, более важными для описания наблюдаемых экспериментальных данных. В результате, для потенциалов с большими периодами, как правило, более информативными оказываются более общие утверждения о линиях уровня квазипериодических потенциалов, приводимые нами ниже.

Вместе с тем, как оказывается, роль всюду плотного множества периодических потенциалов в пространстве параметров является, в действительности, чрезвычайно важной при исследовании задачи Новикова для рассматриваемых нами квазипериодических потенциалов. Ниже мы сформулируем чрезвычайно важное утверждение, касающееся малых деформаций периодических потенциалов и вытекающее из результатов работ [4,5]. Отметим здесь, что в работах [4,5] предполагается в действительности выполнение некоторых условий регулярности (общего положения), которые мы не приводим здесь подробно, предполагая, что они всегда выполняются для реально возникающих физических потенциа-



Рис. 3. Открытая линия уровня квазипериодического потенциала, лежащая в прямой полосе конечной ширины и проходящая ее насквозь (схематично)

лов¹⁾. В этом случае в наиболее простой форме нужные нам следствия из [4,5] могут быть сформулированы следующим образом.

Пусть некоторый полный набор параметров

$$\mathbf{U}_0 = (\mathbf{k}_{(1)}^0, \mathbf{k}_{(2)}^0, \mathbf{k}_{(3)}^0, V_1^0, V_2^0, V_3^0, \dots)$$

отвечает некоторому периодическому потенциалу в плоскости. Тогда в пространстве параметров существует открытая окрестность Ω точки \mathbf{U}_0 («зона устойчивости»), такая что для любых $\mathbf{U} \in \Omega$:

А1. Все открытые линии уровня соответствующего двумерного потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$ лежат в прямых полосах конечной ширины, проходя их насквозь (рис. 3);

А2. Среднее направление $l(\mathbf{U})$ полос, содержащих открытые линии уровня потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$, определяется во всей области Ω некоторой (несократимой) целочисленной тройкой (m^1, m^2, m^3) из соотношения

$$\left(m^{1}\mathbf{k}_{(1)} + m^{2}\mathbf{k}_{(2)} + m^{3}\mathbf{k}_{(3)}, \mathbf{l}(\mathbf{U})\right) = 0.$$
 (2.3)

Отметим здесь, что для вложений (2.2) максимальной иррациональности соотношения (2.3) определяют однозначно (с точностью до знака) тройку (m^1, m^2, m^3) .

Тройки (m^1, m^2, m^3) имеют в действительности топологическое происхождение и могут быть введены также другим способом. А именно, вспомним, что среди параметров рассматриваемых нами потенциалов присутствуют, в частности, положения максимумов стоячих волн, используемых при создании потенциала. В рассматриваемой нами теперь картине сдвиг отдельной стоячей волны уже не эквивалентен простому сдвигу результирующего потенциала и представляет собой несколько более сложное преобразование. Легко видеть также, что сдвиг фронта стоячей волны (перпендикулярно самому себе) на период этой волны эквивалентен тождественному преобразованию. В целом, совокупность всех таких преобразований образует трехпараметрическую группу (\mathbb{T}^3), содержащую простые сдвиги в качестве алгебраической подгруппы. Вместе с тем, простые сдвиги образуют всюду плотное множество в рассматриваемой группе преобразований для потенциалов общего положения, поэтому все такие потенциалы, связанные описанными преобразованиями, являются, в некотором смысле, родственными. В частности, такие потенциала имеют схожие линии уровня при любом значении энергии ϵ_0 .

Если теперь мы рассмотрим потенциал $V(x, y, \mathbf{U})$ (общего положения) для некоторых значений $\mathbf{U} \in \Omega$ и зафиксируем значение ϵ_0 , отвечающее появлению открытых линий уровня, то мы можем проследить за изменением любой из таких линий при каждом из трех непрерывных сдвигов фронтов стоячих волн (в направлении роста фазы) на соответствующие периоды. Каждому из непрерывных сдвигов при этом будет соответствовать движение открытой линии уровня в плоскости (возможно, со слиянием с ней и отделением от нее замкнутых линий уровня в процессе движения), в результате которого она в конечном итоге перейдет в некоторую другую линию того же потенциала при сдвиге волны на полный период (рис. 4). Можно показать, что количество позиций N, на которое при этом сместится линия, одинаково для всех открытых линий уровня, и определяется лишь выбранным преобразованием.

Тройка чисел (N^1, N^2, N^3) , определенная при трех последовательных сдвигах соответственно первой, второй и третьей волн может быть при этом представлена в виде

 $(N^1, N^2, N^3) = M(m^1, m^2, m^3),$

где $M \in \mathbb{Z}$ и (m^1, m^2, m^3) — несократимая целочисленная тройка. Число M при этом всегда является четным и также имеет топологическое про-

¹⁾ Одним из основных условий, накладываемых в [4,5] на функцию $V(X^1, X^2, X^3)$ и рациональное направление вложения $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$, является отсутствие во всех плоскостях заданного направления сингулярных линий уровня, соединяющих две разные особые точки потенциала, хотя бы на одном из уровней энергии в интервале существования открытых линий уровня. Для морсовских функций $V(X^1, X^2, X^3)$ и рациональных направлений вложения $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ общего положения это условие выполняется. В некоторых физических примерах это условие может в лействительности нарушаться из-за наложения каких-либо дополнительных специальных симметрий. Мы не предполагаем здесь специального наличия таких дополнительных симметрий на рассматриваемых семействах потенциалов. В этом случае нарушение указанного условия может происходить лишь при некоторых специальных рациональных направлениях вложения, что, в действительности, не меняет описываемой картины в соответствующем семействе квазипериодических потенциалов.



Рис. 4. Сдвиг регулярных открытых линий уровня квазипериодического потенциала при сдвиге максимумов одной из стоячих волн на полный период в направлении роста фазы

исхождение (количество «классов эквивалентности» открытых линий уровня в плоскости), а тройка (m^1, m^2, m^3) совпадает с введенной ранее с точностью до знака.

Таким образом, можно видеть, что в пространстве параметров рассматриваемых нами потенциалов можно выделить совокупность «зон устойчивости» $\Omega_{\mathbf{m},M}$, параметризуемых введенными выше целочисленными тройками $\mathbf{m} = (m^1, m^2, m^3)$ (а также числами M). Числа (m^1, m^2, m^3) , вообще говоря, не пробегают всего множества целочисленных (несократимых) троек, однако их число в общем случае бесконечно, и они могут принимать сколь угодно большие значения. Каждая «зона устойчивости» представляет собой в действительности некоторую открытую область в пространстве параметров, обладающую кусочно-гладкой границей (границы различных зон могут примыкать друг к другу). Множество «зон устойчивости» представляет собой довольно богатую структуру в пространстве параметров, в частности, «зоны устойчивости» содержат все значения параметров, отвечающие появлению периодических потенциалов $V(x, y, \mathbf{U})$ (см. сноску 1)).

Можно видеть, что приведенное выше описание открытых линий уровня потенциалов, возникающих в зонах $\Omega_{\mathbf{m},M}$, является весьма простым и очень информативным (особенно, в случае небольших значений (m^1, m^2, m^3)). В частности, оно дает гораздо больше информации о поведении линий уровня принадлежащих $\Omega_{\mathbf{m},M}$ периодических потенциалов с большими периодами, чем может быть получено из факта их периодичности. С ростом значений (m^1, m^2, m^3) размеры зон устойчивости $\Omega_{\mathbf{m},M}$



Рис. 5. Усложнение геометрии «топологически регулярных» открытых линий уровня квазипериодического потенциала с ростом значений (m^1, m^2, m^3) (схематично)

уменьшаются, при этом также увеличивается оценка снизу на ширину полос, содержащих открытые линии уровня (и соответствующие области меньших значений). В этом случае приведенное выше описание также начинает относиться ко все большим и большим масштабам в плоскости \mathbb{R}^2 и не дает подробной информации о геометрии линий уровня на меньших масштабах (рис. 5). Как мы увидим ниже, в этой ситуации поведение линий уровня (на небольших масштабах) уже не может быть описано столь же простым образом и обладает гораздо более сложными (хаотическими) свойствами. Как мы увидим также, в предельных случаях такое поведение может приводить к полностью хаотическому поведению линий уровня квазипериодических потенциалов, обладающему сложными хаотическими свойствами на всех масштабах.

Исходя из описанных выше свойств линий уровня квазипериодических потенциалов в зонах устойчивости, можно видеть, что весьма схожими свойствами должны обладать в этом случае также и области $V(x, y, \mathbf{U}) < \epsilon_0$, если линии уровня $V(x, y, \mathbf{U}) = \epsilon_0$ являются открытыми (рис. 6).

А именно, если на уровне ϵ_0 имеются незамкнутые линии уровня, то любая открытая связная область $V(x, y, \mathbf{U}) < \epsilon_0$ также лежит в прямой полосе конечной ширины, проходя ее насквозь. Среднее направление такой полосы, очевидно, совпадает со средним направлением открытых линий уровня и задается уравнением (2.3). Отметим здесь сразу, что теперь как линии уровня, так и области меньших значений потенциала, уже не являются периодическими для общих значений параметров. Свойства (A1), (A2), однако, как можно видеть, дают определенную аналогию со случаем периодических потенциалов.



Рис. 6. Область меньших значений квазипериодического потенциала, лежащая в прямой полосе конечной ширины и проходящая ее насквозь (схематично)

Легко видеть, что транспортные явления в потенциале с параметрами, лежащими в одной из зон устойчивости, могут обладать резко выраженной анизотропией. Это свойство должно, как правило, наблюдаться в том случае, если в ансамбле частиц, помещенных в такой потенциал, присутствуют частицы с энергиями, отвечающими появлению открытых линий уровня потенциала. Можно видеть, в действительности, что подобная анизотропия может наблюдаться также и при более общих предположениях, в частности, в системах сильно взаимодействующих частиц или в гидродинамическом приближении.

Здесь надо сделать важное замечание относительно транспортных явлений в рассматриваемом нами случае. А именно, в зонах устойчивости с большими значениями чисел (m^1, m^2, m^3) ширина полос, содержащих области $V(x, y, \mathbf{U}) < \epsilon_0$ при наличии открытых линий уровня при $V(x, y, \mathbf{U}) = \epsilon_0$, становится довольно большой, а сама форма таких областей все более и более сложной, что (весьма схематично) показано на рис. 6. Как следствие этого, движение частиц в таких областях становится все более и более сложным, постепенно приобретая признаки блуждания в случайном потенциале.

Отметим здесь также, что описанное нами выше движение открытых линий уровня (и ограничиваемых ими «областей доступности») при сдвигах максимумов каждой из стоячих волн зависит самым существенным образом от значений (m^1, m^2, m^3) . В частности, скорость перемещения «областей доступности» при больших значениях (m^1, m^2, m^3) может значительно превышать скорость движения максимумов стоячих волн. Последнее обстоятельство может, в действительности, играть существенную роль для многих вопросов транспортировки атомов в оптических решетках (см. [45] и приводимые там ссылки). Такое движение, вообще говоря, осуществляет неполную транспортировку атомов в соответствующем направлении из-за отделения от «областей доступности» одних замкнутых областей и присоединения к ним других в процессе их перемещения.

Отметим здесь также еще одно важное обстоятельство. А именно, как мы уже сказали, наличие зоны устойчивости в пространстве параметров рассматриваемых нами потенциалов означает, естественно, сохранение определяемой ею картины при достаточно малых вариациях таких параметров. В действительности, как следует из топологических рассмотрений, эта картина является устойчивой и по отношению к гораздо более общим вариациям потенциала, в частности, вариациям, возникающим на конечных масштабах, если они достаточно малы. Можно видеть, таким образом, что приведенное описание геометрии областей $V(x, y, \mathbf{U}) < \epsilon_0$, а также особенностей транспортных явлений, является устойчивым по отношению к возмущениям или «дефектам» достаточно малой величины. Отмеченное обстоятельство является важным также при наличии дополнительных (неквазипериодических) медленно меняющихся потенциалов, которые также нередко присутствуют в экспериментальных постановках. Приведенное выше описание (с теми же самыми числами $(m^1, m^2, m^3))$ сохраняется в этом случае в областях, где максимальное изменение таких потенциалов не превышает энергетического интервала существования открытых линий уровня потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$. Надо сказать, что оценка допустимых вариаций потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$ здесь также быстро уменьшается с ростом чисел (m^1, m^2, m^3) .

Несмотря на то, что совокупность всех зон устойчивости $\Omega_{\mathbf{m},M}$ образует открытое покрытие всюду плотного множества в пространстве параметров, она, вообще говоря, не покрывает его целиком, и квазипериодические потенциалы с тремя квазипериодами могут обладать, как мы уже сказали, линиями уровня, более сложными по сравнению с описанными выше [6,10]. Можно сказать, тем не менее, что описанная выше «регулярная» ситуация является, в некотором смысле, основной для случая трех квазипериодов, в то время как более сложное поведение линий уровня требует специального построения соответствующего потенциала. Для более полного описания возникающей в общем случае картины мы приведем здесь, основываясь на результатах работ [7, 11], ряд важных утверждений о структуре линий уровня потенциалов с тремя квазипериодами самого общего вида. В действительности, вместе с приведенными выше утверждениями, приводимые ниже результаты представляют в определенном смысле полную теорию линий уровня потенциалов с тремя квазипериодами на плоскости.

Отметим, что все потенциалы, получаемые из 3-периодических функций при вложении $\mathbb{R}^2 \subset \mathbb{R}^3$ можно в действительности разделить на три типа. А именно, прежде всего, как мы уже видели, при определенных значениях $(\mathbf{k}_{(1)}, \mathbf{k}_{(2)}, \mathbf{k}_{(3)})$ соответствующий потенциал $V(x, y, \mathbf{U})$ может оказаться в действительности двоякопериодическим. Назовем здесь такие потенциалы потенциалами типа I. Вторая возможность заключается в том, что потенциал $V(x, y, \mathbf{U})$, не являясь двоякопериодическим, все-таки имеет один (с точностью до множителя) период в плоскости \mathbb{R}^2 . Такие потенциалы можно назвать потенциалами типа II. Как и потенциалы типа I, они возникают на всюду плотном множестве в пространстве параметров $(\mathbf{k}_{(1)}, \mathbf{k}_{(2)}, \mathbf{k}_{(3)})$, имеющем меру нуль. Наконец, к потенциалам типа III мы можем отнести потенциалы. не имеющие точных периодов в плоскости \mathbb{R}^2 . Только потенциалы типа III при этом являются потенциалами общего положения и соответствуют множеству полной меры в пространстве параметров. В формулируемых ниже утверждениях о линиях уровня квазипериодических потенциалов мы будем предполагать, что соответствующие потенциалы являются потенциалами типа II или III, поскольку потенциалы типа I уже были в действительности рассмотрены выше. При сделанных предположениях можно сформулировать следующие утверждения.

Пусть $V(x, y, \mathbf{U})$ — потенциал с тремя квазипериодами, принимающий значения в интервале $[V_{min}(\mathbf{U}), V_{max}(\mathbf{U})]$. Тогда:

В1. Открытые линии уровня $V(x, y, \mathbf{U})$ существуют в связном интервале $[V_1(\mathbf{U}), V_2(\mathbf{U})],$

$$V_{min}(\mathbf{U}) < V_1(\mathbf{U}) \le V_2(\mathbf{U}) < V_{max}(\mathbf{U}),$$

который может вырождаться в единственную точку $V_0(\mathbf{U}) = V_1(\mathbf{U}) = V_2(\mathbf{U}).$

В2. Всякий раз, когда открытые линии уровня возникают в конечном интервале $[V_1(\mathbf{U}), V_2(\mathbf{U})]$, они обладают сформулированными выше свойствами (A1), (A2).

ВЗ. В случае, когда интервал $[V_1(\mathbf{U}), V_2(\mathbf{U})]$ стягивается в единственную точку $V_0(\mathbf{U}) = V_1(\mathbf{U}) = V_2(\mathbf{U})$, возникающие на соответствующем уровне открытые линии уровня могут как удовлетворять условиям (A1), (A2) (это происходит на границах зон устойчивости $\Omega_{\mathbf{m},M}$), так и обладать более сложным хаотическим поведением (это возникает в точках накопления бесконечного числа зон $\Omega_{\mathbf{m},M}$ с неограниченно возрастающими значениями $(m^1, m^2, m^3)).$

Можно видеть, таким образом, что появление открытых линий уровня в «зонах устойчивости» совершенно не соответствует аналогичному явлению для истинно случайных потенциалов, где, как правило, открытые линии уровня возникают на единственном уровне энергии (если рассматривать случайные потенциалы с точки зрения теории перколяции [46, 47]). Также потенциалы, возникающие на границах «зон устойчивости», хотя и имеют открытые линии уровня лишь при одном значении ϵ_0 , не очень подходят на роль случайных потенциалов в силу «слишком регулярного поведения» их открытых линий уровня. Поэтому можно видеть, что в качестве моделей случайного потенциала естественно рассматривать лишь потенциалы с хаотическими линиями уровня. Как мы уже сказали, в случае трех квазипериодов такие потенциалы всегда возникают в точках накопления «зон устойчивости» со все более сложной геометрией открытых линий уровня потенциалов, так что здесь всегда имеется предельный переход от «регулярного» случая к «хаотическому».

Необходимо отметить также, что хаотические линии уровня, возникающие у потенциалов типа II сильно отличаются от хаотических линий уровня, возникающих у потенциалов типа III. Так, хаотические линии уровня потенциалов типа II всегда представляют собой кривые, имеющие асимптотическое направление в плоскости \mathbb{R}^2 [10]. Такие линии уровня напоминают в некоторой степени описанные выше «регулярные» линии уровня, проходя через плоскость в целом вдоль некоторого фиксированного направления. Их отличие заключается в том, что отклонения такой линии в перпендикулярном направлении не обязательно являются ограниченными, и она не может быть заключена ни в какой прямой полосе конечной ширины. То же самое можно сказать и о соответствующих областях меньших значений потенциала

$$V(x, y, \mathbf{U}) \le V_0,$$

а именно, они представляют собой некоторые «полосы», проходящие всю плоскость в некотором фиксированном направлении. Ширина этих полос, однако, может варьироваться неограниченно на разных участках, и они не могут быть заключены в прямые полосы фиксированной ширины. При сдвиге граничного значения ϵ_0 вниз на сколь угодно малую величину область меньших значений соответствующе-



Рис. 7. «Хаотическая» открытая линия уровня потенциала с тремя квазипериодами (схематично)

го потенциала состоит из сильно вытянутых ограниченных областей, а при сдвиге ϵ_0 вверх эта область представляет собой всю плоскость, из которой исключены сильно вытянутые ограниченные области (а также, возможно, добавлены не связанные с главной компонентой дополнительные ограниченные области, лежащие внутри исключенных областей).

Можно задаться вопросом, насколько потенциалы типа II с хаотическими линиями уровня могут рассматриваться в качестве модели случайного потенциала. В некотором смысле, их можно считать промежуточным случаем между «регулярными» и «хаотическими» потенциалами.

Хаотические линии уровня, возникающие у потенциалов типа III, являются гораздо более сложными и «заметают» всю плоскость \mathbb{R}^2 хаотическим образом (рис. 7). Аналогичное поведение проявляют при этом и соответствующие таким потенциалам области меньших значений $V(x, y, \mathbf{U}) \leq V_0$. При сдвиге граничного значения ϵ_0 вниз на сколь угодно малую величину область меньших значений соответствующего потенциала состоит из довольно сложных ограниченных областей, а при сдвиге ϵ_0 вверх эта область представляет собой всю плоскость, из которой исключены ограниченные области сложной формы (а также, возможно, добавлены не связанные с главной компонентой дополнительные ограниченные области, лежащие внутри исключенных областей). Важным обстоятельством здесь является то, что линейные размеры таких областей растут при приближении к значению ϵ_0 по степенному закону с некоторыми дробными показателями $(\sim |\epsilon - \epsilon_0|^{-\alpha})$, что объединяет такие потенциалы со случайными потенциалами [48, 49]. Надо отметить, однако, что здесь в общем случае может наблюдаться определенная анизотропия, а именно, наличие двух показателей роста, α и β , в одном определенном направлении в плоскости и ему перпендикулярном ($0 < \alpha, \beta < 1$). В целом стохастические свойства таких линий уровня довольно сложны и в настоящее время являются объектом интенсивных исследований (см., например, [10, 11, 50–65]).

Хаотичность линий уровня потенциала, образованного тремя стоячими волнами, инвариантна относительно сдвигов фаз δ_i (т. е. положения максимумов стоячих волн) при фиксированных остальных параметрах. При таких сдвигах сохраняется значение V_0 , а также геометрические особенности хаотических линий уровня (в частности, показатели α и β). Изменение «областей доступности» $V(x, y) \leq V_0$ при сдвигах максимумов стоячих волн сопровождается здесь их довольно сложным движением, а также многочисленными перестройками на их границах. Вообще говоря, транспортировка атомного газа при адиабатическом изменении положений максимумов стоячих волн в этой ситуации должна вычисляться отдельно для каждого такого потенциала.

В данной работе мы постараемся представить такие линии уровня и соответствующие им области меньших значений потенциала наиболее наглядным образом. Кроме того, как мы уже говорили, нам будет интересна динамика ультрахолодных атомов в описанных нами областях. Особенно интересным при этом, на наш взгляд, является наложение свойств хаотической динамики как таковой на хаотические свойства «областей доступности» для этой динамики.

Здесь мы хотели бы отметить еще одно важное свойство «хаотических» линий уровня потенциалов $V(x, y, \mathbf{U})$ с тремя квазипериодами, а именно, наличие на них участков, где такая линия уровня (а также соответствующая область меньших значений $V(x, y, \mathbf{U}) \leq V_0$) «очень близко» подходит к самой себе (рис. 8). Говоря точнее, рассматривая все большие и большие области в плоскости, мы можем найти на такой линии уровня участки, сколь угодно близко подходящие друг к другу. Как следствие этого, при рассмотрении квазиклассической динамики атомов с энергиями, близкими к соответствующему уровню V_0 , необходимо всегда рассматривать также эффекты туннелирования из одной части «области доступности» в другую вблизи таких участков.

Еще одним следствием указанного выше обстоятельства является то, что, в отличие от ситуации в зонах устойчивости, здесь глобальная геометрия областей $V(x, y, \mathbf{U}) \leq V_0$ является неустойчивой по отношению к сколь угодно малым локальным вариациям потенциала V(x, y) и может сильно изменяться (на больших масштабах) при наличии сколь



Рис. 8. Эффекты туннелирования между различными частями классических «областей доступности» при их сближении для потенциалов с тремя квазипериодами

угодно малых возмущений или дефектов. Как следствие этого, транспортные свойства частиц в таких потенциалах могут также сильно зависеть от наличия таких дефектов в плоскости потенциала. При наличии дополнительных медленно меняющихся потенциалов, например, типа

$$V(x,y) = ax^2, \quad a \to 0,$$

глобальная геометрия открытых линий уровня и соответствующих им областей меньших значений суммарного потенциала чаще всего будет повторять соответствующую геометрию для плавного потенциала на больших масштабах и вести себя типичным «хаотическим» образом на малых масштабах.

Согласно общей гипотезе Новикова, в случае трех квазипериодов появление потенциалов с хаотическими линиями уровня может происходить лишь на множестве меры нуль и, более того, фрактальной коразмерности строго больше единицы, в полном пространстве параметров. Можно видеть, таким образом, что для экспериментальной реализации потенциала с тремя квазипериодами, близкого по свойствам к случайному в описанном выше смысле, необходим весьма специальный подбор параметров, задающих такой потенциал. На рис. 9 приведен пример расположения зон устойчивости в пространстве существенных параметров при ограничении потенциала

$$\cos X^1 + \cos X^2 + \cos X^3$$

на двумерные плоскости при всевозможных афинных вложениях $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$. В данном случае существенным является лишь направление вложения, которое может быть задано единичным вектором в \mathbb{R}^3 , ортогональным вложенным в него плоскостям



Рис. 9. Зоны устойчивости для квазипериодических потенциалов в плоскости, получаемых ограничением потенциала $\cos X^1 + \cos X^2 + \cos X^3$ при всевозможных афинных вложениях $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ [54, 55]. Зоны представляют собой области на единичной сфере, образованной концами единичных векторов, ортогональных направлению вложения

 \mathbb{R}^2 . Концы таких векторов лежат на единичной сфере \mathbb{S}^2 и, таким образом, все зоны устойчивости могут быть представлены как области на единичной сфере. Можно видеть, что объединение (бесконечного числа) таких областей задает довольно сложное множество на сфере, а дополнение к нему обладает фрактальными свойствами. Отметим здесь также, что гипотеза Новикова пока не доказана строго, хотя была подтверждена в ряде серьезных численных экспериментов.

Сформулируем теперь аналитические результаты, известные к настоящему времени для потенциалов с четырьмя квазипериодами. Надо сразу сказать, что задача Новикова для случая четырех квазипериодов является еще более сложной по сравнению со случаем трех квазипериодов. Вместе с тем, случай четырех квазипериодов может оказаться весьма важным в рассматриваемой нами постановке в связи с проблемой модулирования двумерных квазикристаллов в системах холодных атомов.

В рассматриваемой нами постановке потенциалы с четырьмя квазипериодами получаются в результате наложения четырех независимых синусоидальных стоячих волн (возможно, с генерацией высших гармоник, рис. 10) и могут быть записаны в следующей общей форме:



Рис. 10. Наложение четырех стоячих волн в плоскости с образованием потенциала с четырьмя квазипериодами (схематично). Векторы η_i указывают направления фронтов волн, а векторы \mathbf{a}_i — сдвиги между максимумами их амплитуд

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{4} V_i \cos(\mathbf{k}_{(i)}\mathbf{r} + \delta_i) + \dots$$

Квазипериодические свойства потенциала определяются при этом параметрами $(\mathbf{k}_{(1)}, \mathbf{k}_{(2)}, \mathbf{k}_{(3)}, \mathbf{k}_{(4)})$, задающими афинное вложение $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^4$, согласно формулам

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} k_{(1)}^{1}x + k_{(2)}^{2}y + \delta_{1} \\ k_{(2)}^{1}x + k_{(2)}^{2}y + \delta_{2} \\ k_{(3)}^{1}x + k_{(3)}^{2}y + \delta_{3} \\ k_{(4)}^{1}x + k_{(4)}^{2}y + \delta_{4} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{(1)}\mathbf{r} + \delta_{1} \\ \mathbf{k}_{(2)}\mathbf{r} + \delta_{2} \\ \mathbf{k}_{(3)}\mathbf{r} + \delta_{3} \\ \mathbf{k}_{(4)}\mathbf{r} + \delta_{4} \end{pmatrix}.$$

Мы приведем несколько упрощенные следствия из результатов работ [23,24], являющиеся аналогом первого из утверждений, сформулированных выше для случая трех квазипериодов. Как и ранее, мы не будем подробно рассматривать все условия регулярности (общего положения), накладываемые на рассматриваемые потенциалы в работах [23,24], и будем предполагать, что они всегда выполняются для реальных потенциалов. Тогда из результатов работ [23,24] следует утверждение:

полное пространство параметров

$$\mathbf{U}_0 = (\mathbf{k}_{(1)}^0, \mathbf{k}_{(2)}^0, \mathbf{k}_{(3)}^0, \mathbf{k}_{(4)}^0, V_1^0, V_2^0, V_3^0, V_4^0, \dots)$$

задающих потенциалы с четырьмя квазипериодами, содержит всюду плотное множество открытых областей («зон устойчивости» Ω), таких что в каждой из областей Ω :

С1. Открытые линии уровня $V(x, y, \mathbf{U})$ существуют в конечном связном интервале энергий $[V_1(\mathbf{U}), V_2(\mathbf{U})]$:

$$V_{min}(\mathbf{U}) < V_1(\mathbf{U}) \le V_2(\mathbf{U}) < V_{max}(\mathbf{U}).$$

С2. Все открытые линии уровня соответствующего двумерного потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$ лежат в прямых полосах конечной ширины, проходя их насквозь (рис. 3);

С3. Среднее направление $l(\mathbf{U})$ полос, содержащих открытые линии уровня потенциала $V(x, y, \mathbf{U})$, определяется во всей области Ω некоторой (несократимой) целочисленной четверкой (m^1, m^2, m^3, m^4) из соотношения

$$\left(m^{1}\mathbf{k}_{(1)}+m^{2}\mathbf{k}_{(2)}+m^{3}\mathbf{k}_{(3)}+m^{4}\mathbf{k}_{(4)},\,\mathbf{l}(\mathbf{U})\right)=0$$

Как и в случае трех квазипериодов, четверки (m^1, m^2, m^3, m^4) имеют в действительности топологическое происхождение и могут быть определены аналогичным описанному ранее способом, опирающимся на преобразованиях сдвигов параметров δ_i .

Так же, как и в случае трех квазипериодов, объединение зон устойчивости (в общем случае) не покрывает здесь всего пространства параметров. Дополнение к этому объединению образует сложное множество, отвечающее возникновению потенциалов с хаотическими линиями уровня. Надо сказать, что как особенности хаотического поведения линий уровня, так и структура соответствующего множества в пространстве параметров к настоящему времени почти не изучены. В частности, можно предположить, что множество параметров, отвечающих потенциалам с хаотическими линиями уровня, имеет здесь ненулевую меру. Таким образом, в пространствах потенциалов с четырьмя квазипериодами построение потенциалов со свойствами истинно случайных потенциалов может быть более простым с экспериментальной точки зрения. Отметим, что, как и в случае трех квазипериодов, каждый «хаотический» потенциал является пределом усложняющихся «регулярных» потенциалов из-за накопления бесконечного числа «зон устойчивости» вблизи точки U_0 , определяющей такой потенциал.

Переходя к потенциалам с большим числом квазипериодов, задаваемым вложениями

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} k_{(1)}^1 x + k_{(1)}^2 y + \delta_1 \\ \vdots \\ k_{(d)}^1 x + k_{(d)}^2 y + \delta_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{(1)} \mathbf{r} + \delta_1 \\ \vdots \\ \mathbf{k}_{(d)} \mathbf{r} + \delta_d \end{pmatrix},$$

отметим, что никаких строгих аналитических результатов для случая d > 4 на данный момент нет. Можно, однако, видеть, что и в этом случае квазипериодические потенциалы могут обладать «регулярным» поведением открытых линий уровня. В общем случае мы будем говорить, что потенциал с d квазипериодами имеет регулярные открытые линии уровня, если выполняются следующие условия:

D1. Открытые линии уровня V(x, y) существуют в конечном связном интервале энергий

$$V_{min} < V_1 \le V(x, y) \le V_2 < V_{max}.$$

D2. Все открытые линии уровня потенциала V(x, y) лежат в прямых полосах конечной ширины, проходя их насквозь (рис. 3);

D3. Среднее направление l полос, содержащих открытые линии уровня потенциала V(x, y), определяется некоторым (несократимым) целочисленным вектором (m^1, \ldots, m^d) из соотношения

$$\left(m^{1}\mathbf{k}_{(1)}+\cdots+m^{d}\mathbf{k}_{(d)},\,\mathbf{l}\right)=0$$

Потенциалы с d квазипериодами с регулярным поведением открытых линий уровня возникают, в частности, всегда, когда они образуются с помощью достаточно малых (квазипериодических) добавок к потенциалам с меньшим числом квазипериодов (и регулярным поведением открытых линий уровня). Но в действительности, этим такие ситуации не ограничиваются и можно построить огромное количество примеров весьма сложных потенциалов с большим числом квазипериодов и регулярным поведением открытых линий уровня в описанном выше смысле.

Можно показать, что в самом общем случае существует огромное множество ситуаций, когда для потенциала общего положения на некотором семействе квазипериодических потенциалов $V(x, y, \mathbf{U})$ имеют место свойства (D1)–(D3) и, более того, такая ситуация является локально устойчивой. При этом в пространстве параметров возникает зона устойчивости $\Omega_{(m^1,...,m^d)}$, содержащая исходную точку \mathbf{U}_0 , такая что условия (D1)–(D3) выполняются во всех ее точках с некоторыми значениями $V_1(\mathbf{U})$ и $V_2(\mathbf{U})$ и неизменными $(m^1,...,m^d)$. Границы зоны $\Omega_{(m^1,...,m^d)}$ в действительности определяются при этом условием $V_1(\mathbf{U}) = V_2(\mathbf{U})$.

Возвращаясь к рассмотренной нами методике создания квазипериодических потенциалов в системах холодных атомов (суперпозиция стоячих волн), можно показать, как и ранее, что числа (m^1, \ldots, m^d) могут быть определены и чисто топологическим образом (путем последовательных сдвигов максимумов стоячих волн на период и наблюдения соответствующих сдвигов открытых линий уровня).

В общем случае можно констатировать, что при создании квазипериодических потенциалов по поведению их линий уровня их естественно разделить на потенциалы, сохраняющие определенные свойства упорядоченных потенциалов, и потенциалы, приближающиеся к случайным потенциалам. Потенциалы первого типа при этом устойчивы и возникают на некоторых открытых областях в пространстве задающих их параметров, при этом каждая из таких областей определяется своим значением топологического инварианта — целочисленного вектора (m^1, \ldots, m^d) . Потенциалы второго типа неустойчивы и возникают на достаточно сложных множествах фрактального типа (дополнениях к объединению областей $\Omega_{(m^1,...,m^d)}$). Для построения потенциалов со свойствами случайных потенциалов необходимо, таким образом, выделить совокупность областей $\Omega_{(m^1,...,m^d)}$ из пространства параметров. Рассматривая потенциалы на полученном дополнении, можно предположить, что соответствующие потенциалы с большим числом квазипериодов могут служить, в действительности, одной из моделей случайных потенциалов, поскольку сложность поведения их открытых линий уровня очень быстро нарастает с ростом числа квазипериодов. В заключение данного раздела отметим, что возникновение случайных потенциалов также рассматривалось в системах оптических решеток для ультрахолодных атомов [66, 67].

3. ДИНАМИКА ЧАСТИЦ В ПОТЕНЦИАЛАХ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ

Главным объектом изучения в данном разделе будет динамика ультрахолодных атомов в двумерной плоскости в присутствии квазипериодического потенциала V(x, y). В главном приближении такая динамика может рассматриваться классическим образом, когда предполагается, что атомы обладают достаточно хорошо определенными траекториями в \mathbb{R}^2 . Исключение при этом может представлять движение атомов на специальных участках траекторий, где важную роль может играть квантовое туннелирование с одного участка траектории на другой. Как мы уже неоднократно говорили, нам, прежде всего, будет интересна динамика атомов с энергиями, соответствующими появлению открытых линий уровня рассматриваемых потенциалов. Для применения квазиклассического описания мы должны, таким образом, предполагать выполнение соотношения $h/\sqrt{2MV} \ll a$, где a — типичная величина периодов используемых нами стоячих волн. В рассматриваемой ситуации мы предполагаем, что распределение атомов по энергии таково, что достаточно большое количество атомов в ансамбле имеют энергии, отвечающие появлению открытых линий уровня потенциала, что предполагает также соотношение $T \simeq V$. Таким образом, в нашем случае надо положить также $h/\sqrt{2MT} \ll a$. В общем случае, силы, действующие на атомы в оптических ловушках, могут содержать как консервативную, так и диссипативную части [68,71]. Мы будем рассматривать здесь классическую динамику невзаимодействующих атомов в бездиссипативном пределе, который дает хорошее приближение к реальной динамике тяжелых атомов во многих важных ситуациях.

Как можно видеть, особенности геометрии квазипериодических потенциалов должны проявляться более всего в динамике частиц при энергиях, лежащих в интервалах появления открытых линий уровня потенциала. Мы сосредоточимся именно на исследовании такой динамики. Как легко видеть, особенности этой динамики должны естественным образом проявляться в транспортных свойствах ультрахолодного газа при наличии частиц соответствующих энергий в ансамбле.

Как мы видели в предыдущем разделе, квазипериодические потенциалы могут быть в действительности разделены на два типа в соответствии с поведением их открытых линий уровня. Такое разделение имеет при этом самое непосредственное отношение к динамике частиц в таких потенциалах, поскольку определяет геометрию «областей доступности» при движении частиц с определенными энергиями. Как следствие этого, можно ожидать различие в динамике частиц в потенциалах этих двух типов, наблюдаемого при исследовании систем ультрахолодных атомов.

Как мы уже упоминали выше, динамика в двумерных гамильтоновых системах обладает еще одной особенностью, а именно, она является интегрируемой на низких уровнях энергии и хаотизируется при большой энергии [25,26]. На промежуточных энергетических уровнях фазовое пространство системы разделяется на области, где имеет место интегрируемый случай, и множества, где возникает хаотическая динамика. В частности, можно наблюдать эффекты постепенной хаотизации динамики, когда частица может надолго «прилипать» к инвариантным двумерным торам, совершая редкие «прыжки» (полеты Леви) между различными торами, а также другие подобные эффекты. Эта особенность динамики исследовалась в системах холодных атомов как для свободных атомов, движущихся в периодических потенциалах [33, 34], так и при наличии дополнительного взаимодействия движения атома с внутренними степенями свободы [72, 73].

В данной работе мы не будем рассматривать внутренних степеней свободы атомов и сосредоточимся лишь на движении атома как целого. Как мы уже говорили, мы будем интересоваться здесь динамикой атомов с энергиями, отвечающими появлению открытых линий уровня у соответствующих потенциалов. Именно в этой области нам будет особенно интересно наблюдать сочетание различных режимов (интегрируемость, ее усложнение и переход к хаотической динамике) в различных областях фазового пространства. Можно сразу отметить, что поскольку открытые линии уровня квазипериодического потенциала также возникают при некоторых «промежуточных» (между минимальным и максимальным) его значениях, часто описанная выше «постепенная хаотизация» динамики будет возникать именно вблизи таких линий уровня. Можно также при этом сказать, что такая хаотизация должна, конечно, коррелировать с нетривиальной геометрией «областей доступности» движения атомов в рассматриваемых нами потенциалах. В частности, для развитой хаотизации движение атомов должно быть близко к диффузионному, так что транспортные свойства атомного газа определяются диффузией атомов в областях заданной геометрии. В условиях «промежуточной» хаотизации можно ожидать, что геометрия областей доступности влияет существенным образом на полеты Леви между двумерными торами, что, конечно, также является определяющим при рассмотрении транспортных свойств атомного газа. Кроме того, в рассматриваемой ситуации двумерные торы, отвечающие интегрируемой динамике, могут разделять (трехмерные) многообразия постоянной энергии нетривиальным образом, так что мы можем наблюдать также неинтегрируемую динамику, локализованную в различных участках «областей доступности». Геометрия таких участков и их расположение при этом, конечно, также связана с общей геометрией «областей доступности» при заданной энергии частицы. В целом, как нетрудно видеть, в рассматриваемой нами модели именно режимы диффузии или полетов Леви определяют те транспортные свойства атомного газа, которые могут позволять наблюдать различия между введенными выше «регулярными» и «хаотическими» квазипериодическими потенциалами.

Ниже мы приводим результаты численного исследования классической динамики частиц в описываемых нами потенциалах. В качестве модели мы рассмотрим здесь потенциалы с тремя квазипериодами, получаемые ограничением потенциала

$$V\left(\cos X^1 + \cos X^2 + \cos X^3\right)$$

на плоскости, задаваемые различными (изометрическими) вложениями (2.2). Надо сказать, что в этом семействе потенциалов возникают абсолютно все ситуации, возможные для потенциалов с тремя квазипериодами с точки зрения задачи Новикова, а именно, мы найдем здесь как устойчивые «регулярные» потенциалы с самыми различными особенностями геометрии открытых линий уровня, так и богатую совокупность «хаотических» потенциалов. Можно отметить лишь единственную особенность потенциалов данной совокупности, которая заключается в следующем. Именно, для любого «регулярного» потенциала, возникающего в описанном семействе, интервал существования открытых линий уровня симметричен относительно нуля, т.е. мы всегда имеем соотношение $V_1(\mathbf{U}) = -V_2(\mathbf{U})$ для введенных выше величин $V_1(\mathbf{U})$ и $V_2(\mathbf{U})$. Точно также, для всех «хаотических» потенциалов данного семейства открытые линии уровня возникают в точности на нулевом уровне энергии ($V_0 = 0$). Данная особенность свойственна приведенному нами семейству потенциалов и, вообще говоря, не имеет места в самом общем случае. Во всем остальном геометрические свойства линий уровня потенциалов рассматриваемого нами семейства отражают самую общую ситуацию. Поскольку, как мы уже сказали, нам интересна динамика частиц в областях появления открытых линий уровня потенциала, мы часто будем исследовать здесь такую динамику при значении $\epsilon = 0$.

Все потенциалы, таким образом, будут иметь вид

$$V(x,y) = \cos(a_1x + b_1y + c_1) + + \cos(a_2x + b_2y + c_2) + \cos(a_3x + b_3y + c_3) \quad (3.1)$$

с некоторыми коэффициентами a_i , b_i и c_i . В действительности, поскольку выбор направления координатных осей в плоскости \mathbb{R}^2 не будет иметь для нас большого значения, мы будем полагать, что ось x совпадает с линией пересечения \mathbb{R}^2 с плоскостью (X^1, X^2) в \mathbb{R}^3 . Таким образом, мы можем всегда положить здесь $a_3 = 0$.

Как мы уже отмечали выше, тип потенциала определяется в нашем случае лишь направлением



Рис. 11. Потенциал (3.2), обладающий «регулярными» открытыми линиями уровня, из самой крупной зоны устойчивости на рис. 9. Закрашенные области отвечают значениям $V(x, y) \leq 0$

вложения $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ и описывается диаграммой, представленной на рис. 9. Можно видеть, что, подбирая параметры вложения, мы легко можем реализовать любую из интересующих нас ситуаций.

Для сравнения динамики в потенциалах различного типа мы приведем здесь результаты для трех потенциалов, первые два из которых обладают «регулярными» открытыми линиями уровня и принадлежат довольно крупным зонам устойчивости на рис. 9, а третий — «хаотическими» открытыми линиями уровня, возникающими лишь при нулевом значении энергии.

Наша первая серия вычислений будет относиться к потенциалу

$$a_{1} = -0.12251993420338196,$$

$$b_{1} = -0.2250221718850486,$$

$$c_{1} = 1.5505542426422338,$$

$$a_{2} = 0.9924660526802913,$$

$$b_{2} = -0.02777898711920925,$$

$$c_{3} = 0.12374024573075965,$$

$$a_{3} = 0,$$

$$b_{3} = 0.9739575709622912,$$

$$c_{3} = 3.1548761694687415$$
(3.2)

(рис. 11), лежащему внутри самой крупной зоны на рис. 9 с топологическими числами $(m^1, m^2, m^3) =$ = (1, 0, 0). Надо сказать, что мы специально проводим здесь отдельное рассмотрение потенциала из этой зоны, поскольку она в действительности несколько отличается от остальных зон. А именно, кроме упомянутой нами выше «частичной» интегрируемости, свойственной двумерным гамильтоновым системам, здесь имеется дополнительная близость к интегрируемой ситуации, связанная с тем, что центру данной зоны отвечает интегрируемый при всех энергиях потенциал

$$V(x,y) = \cos x + \cos y.$$

Как следствие этого, интегрируемая динамика может здесь возникать на более богатых множествах начальных условий по сравнению с потенциалами из других зон. Как мы в действительности увидим, это предположение подтверждается, в частности, нам не удалось здесь найти хорошо выраженной диффузионной динамики на уровне $\epsilon = 0$, которая возникает лишь при заметном увеличении энергии частицы. Вместе с тем, возникновение потенциалов именно из этой зоны является наиболее вероятным по сравнению с другими в эксперименте в силу значительных размеров этой зоны.

Как мы уже говорили, мы сразу ограничиваемся здесь рассмотрением трехмерных многообразий в фазовом пространстве, фиксируя полную энергию частицы. Рассматриваемый нами потенциал имеет открытые линии уровня в весьма широком интервале энергий

$$-0.7493 \le V \le 0.7493$$

(приближенно), мы вначале рассмотрим динамику частиц с энергией $\epsilon = 0$. Как мы уже сказали выше, мы можем ожидать здесь появления целых областей, где динамика в действительности является интегрируемой и происходит на двумерных торах, вложенных в фазовое пространство. Именно это и происходит на уровне $\epsilon = 0$, более того, подбирая специально начальные данные, можно обнаружить области их значений, где динамика на торах отвечает довольно простому движению в координатном пространстве (рис. 12).

При изменении начальных данных на уровне $\epsilon = 0$ (и том же самом потенциале) можно, однако, обнаружить (меньшие) области, в которых геометрия инвариантных торов все более усложняется, что приводит также к усложнению движения частиц в координатном пространстве (рис. 13).

Подбирая начальные данные еще более специальным образом (на уровне $\epsilon = 0$), можно увидеть также еще более сложные перестройки инвариантных торов, где происходит «прилипание» частиц на довольно длительное время к более простым инвариантным торам и «прыжки» с одного из таких торов на другой (полеты Леви), совершаемые в определенные моменты времени (рис. 14).



Рис. 12. Примеры инвариантных торов, отвечающих сравнительно простой динамике атомов в «регулярном» потенциале (3.2) при нулевой полной энергии

Режимы, представленные на рис. 12–14, отвечают динамике частиц с нулевой полной энергией. Как мы уже говорили, для этого потенциала нам не удалось обнаружить диффузионных режимов при $\epsilon = 0$, однако они появляются при увеличении энергии частиц (рис. 15). В действительности, отчетливо выраженное диффузионное поведение возникает здесь при энергиях, когда открытые линии уров-



Рис. 13. Примеры инвариантных торов, задающих более сложную динамику атомов в «регулярном» потенциале (3.2) при нулевой полной энергии

ня потенциала уже исчезают, а область доступности простирается в обоих направлениях. Интересно, что диффузионная динамика здесь сохраняет, тем не менее, ярко выраженную анизотропию, сохраняя память о среднем направлении открытых линий уровня потенциала. Можно здесь также отметить, что даже на этих уровнях при этом остается довольно много инвариантных торов, а диффузионная дина-





Рис. 14. Полеты Леви между «близкими» и «далекими» торами и усложнение инвариантных торов при изменении начальных условий в «регулярном» потенциале (3.2) при нулевой полной энергии частицы



Рис. 15. Области доступности и переход к диффузионному режиму в «регулярном» потенциале (3.2) при повышении энергии частицы ($\epsilon = 0.5$ и $\epsilon = 0.98$)

мика имеет одновременно вид полетов Леви с «прилипанием» к инвариантным торам. Как мы уже говорили, такое поведение свойственно, видимо, лишь потенциалам из зоны с $(m^1, m^2, m^3) = (1, 0, 0)$ (и идентичных с ней зон) в силу упомянутых выше обстоятельств. В частности, мы приведем ниже описание динамики в потенциале из другой крупной зоны устойчивости, которое, по-видимому, свойственно большинству потенциалов с «регулярными» линиями уровня.

При дальнейшем повышении энергии движение частиц в потенциале переходит от диффузионного движения к баллистическому. Мы должны отметить здесь, однако, что баллистическое движение в квазипериодических потенциалах также обладает, повидимому, весьма существенными особенностями. В частности, для потенциалов рассматриваемого нами семейства даже при довольно высоких энергиях довольно большую часть фазового объема занимают баллистические траектории определенных направлений. Для рассматриваемого нами потенциала можно сразу выделить три основных направления, а именно направления линий уровня трех косинусов в формуле (3.1), вдоль которых баллисти-



Рис. 16. Появление баллистических траекторий в «регулярном» потенциале (3.2) при повышении энергии частицы ($\epsilon = 4$)

ческое движение возникает уже при достаточно низких энергиях (рис. 16). При повышении энергии число таких направлений возрастает и можно наблюдать также баллистические траектории с направлениями, отличными от указанных трех.

Кроме описанных выше «чисто» баллистических траекторий, можно наблюдать также траектории, состоящие из длинных баллистических участков указанных направлений, соединенных короткими участками «переключения» между двумя направлениями (рис. 17). Как и «чисто» баллистические траектории, такие траектории должны также вносить специфические особенности в транспортные явления при соответствующих энергиях частиц.



Рис. 17. «Почти» баллистические траектории в «регулярном» потенциале (3.2) ($\epsilon = 4$)

Можно видеть, однако, что с увеличением числа соответствующих баллистических направлений, а также усложнением геометрии «квазибаллистических» траекторий, обнаруживать такие свойства будет все сложнее и сложнее.

Можно видеть, таким образом, что транспортные явления, обусловленные баллистическим движением атомов, также раскрывают геометрическую структуру квазипериодических потенциалов. По сравнению со структурой, отвечающей геометрии открытых линий уровня потенциала, однако, эта структура является более простой и непосредственно связана с задающими потенциал гармониками. Как мы увидим дальше, это свойство баллистического движения проявляется в действительности для потенциалов всех типов, и, в этом смысле, соответствующие транспортные явления почти не отличают «регулярных» квазипериодических потенциалов от «хаотических». При этом, в отличие от случая диффузионного движения, дающего хорошо наблюдаемый вклад в процессы переноса, связанный с геометрией открытых линий уровня потенциала, экспериментальное наблюдение транспортных вкладов от баллистических траекторий устойчивых направлений может быть существенно более сложным из-за сложения большого количества таких вкладов при высоких энергиях. С другой стороны, баллистическое движение в квазипериодических потенциалах также, по-видимому, является фундаментальным свойством таких потенциалов, в частности, баллистические направления также играют важную роль в квантовой динамике в потенциалах этого типа (см. [38]).

Как мы уже отмечали выше, диффузионная динамика, а также динамика, содержащая далекие прыжки между различными типами локализованной динамики, которые дают нам более всего информации и типе и топологических параметрах потенциала, в данном примере возникают преимущественно при энергиях, лежащих выше интервала существования открытых траекторий. Однако такая линамика сохраняет «память» о геометрии открытых линий уровня потенциала и дает сильно анизотропный вклад соответствующего направления в транспортные явления при этих энергиях. Такая особенность, как мы уже говорили выше, по-видимому, связана с «дополнительными причинами» появления интегрируемой динамики в соответствующей зоне устойчивости, приводящими к увеличению фазового объема, заполненного такой динамикой.

Вторая серия наших вычислений будет относиться к потенциалу

 $a_{1} = -0.6194151736623348,$ $b_{1} = -0.44502823229775823,$ $c_{1} = 1.4421279589366298,$ $a_{2} = 0.7850635914605004,$ $b_{2} = -0.3511272752829312,$ $c_{3} = 0.8986352554278761,$ $a_{3} = 0,$ $b_{3} = 0.8238079321117983,$ $c_{3} = 2.3379002628621635,$ (3.3)



Рис. 18. Потенциал (3.3), обладающий «регулярными» открытыми линиями уровня, из зоны устойчивости на рис. 9, отвечающей топологическим числам $(m^1, m^2, m^3) =$ = (1, 1, 1). Закрашенные области отвечают значениям $V(x, y) \leq 0$

лежащему внутри зоны на рис. 9 с топологическими числами $(m^1, m^2, m^3) = (1, 1, 1)$ (рис. 18). Как и предыдущий потенциал, потенциал (3.3) обладает достаточно большим интервалом энергий

 $-0.7548 \le V \le 0.7548$,

содержащим открытые линии уровня потенциала.

Здесь, в действительности, для наблюдения большинства описанных режимов достаточно исследовать динамику частиц при энергии $\epsilon = 0$. В частности, мы также можем наблюдать здесь наличие инвариантных торов различной сложности (рис. 19), а также области в фазовом пространстве, разделяемые такими торами (рис. 20).

Здесь можно также наблюдать такое явление, как неполное разделение инвариантными торами энергетического уровня, когда между торами имеются «зазоры», позволяющие траектории выходить из «почти изолированной» области в определенные моменты времени. Такая ситуация выражается в координатном пространстве длительным блужданием частиц в определенных областях с весьма редкими переходами (полетами Леви) между ними (рис. 21).

Наконец, в определенных областях начальных данных на нулевом уровне энергии здесь можно также наблюдать гораздо более сложные полеты Леви (рис. 22), переходящие в диффузионные режимы (рис. 23). Мы предполагаем, что наличие явно выраженной диффузионной динамики среди прочих режимов в интервале существования открытых линий уровня является в действительности общим явлением для «регулярных» квазипериодических потенциалов, если нет специальных причин, подавляющих



Рис. 19. Примеры инвариантных торов, отвечающих динамике атомов в «регулярном» потенциале (3.3) при нулевой полной энергии

такую динамику (как в предыдущем случае). Как нетрудно видеть, геометрия областей доступности для частиц фиксированной энергии оказывает здесь самое непосредственное влияние на геометрию полетов Леви и диффузионной динамики.

Как и в предыдущем случае, дальнейшее повышение энергии приводит к возникновению баллистических траекторий в рассматриваемом потенциале. Главные устойчивые направления таких траекторий (рис. 24) здесь также определяются просто направ-

И. А. Дынников, А. Я. Мальцев



Рис. 20. Неинтегрируемая динамика в области, отделенной от остального фазового пространства в «регулярном» потенциале (3.3) при нулевой полной энергии



Рис. 21. Редкие полеты Леви в «регулярном» потенциале (3.3) при нулевой полной энергии частицы

лениями линий уровня косинусов, представленных в формуле (3.1), и не связаны, в действительности, с типом возникающего потенциала. Баллистические траектории устойчивых направлений, как мы уже отмечали выше, занимают конечный фазовый объем при фиксированном уровне энергии.

При дальнейшем повышении энергии частиц количество устойчивых направлений баллистических траекторий растет. Кроме того, как и в предыдущем случае, здесь также возникает множество «квазибаллистических» траекторий, имеющих довольно длинные баллистические участки, разделенные короткими переходами между ними (рис. 25). Как и в



Рис. 22. Частые полеты Леви в «регулярном» потенциале (3.3) при нулевой полной энергии частицы

предыдущем случае, можно отметить, что геометрические особенности вклада баллистических траекторий в транспортные явления становятся все более и более «размытыми» с ростом числа устойчивых направлений таких траекторий, а также с усложнением геометрии «квазибаллистических» траекторий. Что же касается определения типа потенциала, а также его устойчивых топологических параметров (чисел (m^1, m^2, m^3)), они, как и в предыдущем случае, лучше всего определяются вкладом диффузионных траекторий, а также траекторий, содержащих длинные «перескоки» (полеты Леви) между участками почти интегрируемой или локализованной динамики. Можно отметить, что в данном примере (в отличие от предыдущего) соответствующая динамика возникает по большей части в интервале существования открытых линий уровня потенциала. Мы предполагаем, что это свойство должно прояв-



Рис. 23. Диффузионная динамика в «регулярном» потенциале (3.3) при нулевой полной энергии частицы



Рис. 24. Баллистические траектории «главных» направлений в «регулярном» потенциале (3.3) ($\epsilon = 4$)

ляться в действительности для большинства типов «регулярных» потенциалов (в отсутствие дополнительных причин для увеличения фазового объема, занятого интегрируемой динамикой), создаваемых рассматриваемым способом.

Последняя серия наших вычислений относится к потенциалу

$a_1 = -0.6190763027420052,$	
$b_1 = -0.2572674789786692,$	
$c_1 = 1.311209111211166,$	
$a_2 = 0.7853308419916342,$	
$b_2 = -0.20280395367888493,$	(3.4)
$c_3 = 0.8662242771884692,$	
$a_3 = 0,$	
$b_3 = 0.9448195598272575,$	
$c_3 = 2.950743051151684,$	

имеющему «хаотические» линии уровня (рис. 26). В данном случае открытые линии уровня, как мы уже говорили, существуют лишь при значении $V_0 = 0$.

Как и в предыдущих двух случаях, в этом случае на уровне энергии $\epsilon = 0$ также существуют области, отвечающие движению по торам как сравнительно простой (рис. 27), так и более сложной геометрии (рис. 28).

Кроме того, в определенных областях начальных данных можно наблюдать и неинтегрируемую динамику, ограниченную, однако, некоторыми инвариантными торами на многообразии $\epsilon = 0$. Такая дина-



Рис. 25. «Почти» баллистические траектории в «регулярном» потенциале (3.3) ($\epsilon = 4$)

мика также легко отличима от других типов при ее проекции на координатное пространство (рис. 29).

Как и в предыдущих случаях, при определенных начальных условиях на нулевом уровне энергии можно также наблюдать «прилипание» траек-



Рис. 26. Потенциал (3.4), обладающий «хаотическими» открытыми линиями уровня. Закрашенные области отвечают значениям $V(x, y) \leq 0$

тории частицы к инвариантным торам на довольно длительное время, перемежаемое полетами Леви в определенные моменты (рис. 30).

Так же, как и предыдущем случае, изменяя начальные данные, мы можем добиться усложнения геометрии торов и перехода к диффузионной динамике частиц (рис. 31). Диффузионная динамика здесь также ограничена «областью доступности», которая имеет теперь совершенно другую геометрию и сама обладает в некотором смысле «диффузионными свойствами». Надо сказать, что, повидимому, в классическом пределе транспортные свойства частиц на нулевом уровне энергии здесь близки к транспортным свойствам локализованных (хотя и в больших областях) частиц, поскольку вероятность далекого диффундирования в рассматриваемой области очень мала. Можно отметить, что в случае трех квазипериодов такие области всегда содержат участки границы, очень близко подходящие друг к другу, где возможно квантовое туннелирование. В этом случае именно квантовое туннелирование, по-видимому, должно играть большую роль для транспортных явлений при $\epsilon = 0$.

В целом, транспортные свойства атомного газа в описанном потенциале при постепенном повышении энергии частиц ансамбля должны (в классическом пределе) существенно меняться при появлении в ансамбле частиц с положительными энергиями. Действительно, при увеличении энергии области доступности расширяются и становятся неодносвязными в отличие от случая $\epsilon = 0$. Можно сказать, что в некотором смысле у таких областей при этом появляется свойство «протекания». Вместе с тем, они сохраняют некоторое время и определенную «диффу-



Рис. 27. Примеры инвариантных торов, отвечающих сравнительно простой динамике атомов в «хаотическом» потенциале (3.4) при нулевой полной энергии

зионную» форму, что должно проявляться в транспортных свойствах атомного газа. Как можно видеть на рис. 32, диффузионные свойства динамики частиц в таких потенциалах быстро нарастают в увеличением значения ϵ . При уменьшении энергии частиц «области доступности» становятся ограни-



Рис. 28. Примеры инвариантных торов, задающих более сложную динамику атомов в «хаотическом» потенциале (3.4) при нулевой полной энергии



Рис. 29. Неинтегрируемая динамика, ограниченная инвариантными торами в фазовом пространстве в «хаотическом» потенциале (3.4) при нулевой полной энергии





Рис. 30. Полеты Леви в «хаотическом» потенциале (3.4) при нулевой полной энергии

ченными областями в плоскости. Можно видеть, таким образом, здесь заметную разницу с потенциалами, обладающими «регулярными» линиями уровня, где картина существенно не меняется при вариации энергии частиц вблизи нуля.

При значительном повышении энергии в потенциале (3.4) возникают баллистические траектории, обладающие устойчивыми направлениями (рис. 33). Как и в предыдущих двух случаях, главными устойчивыми направлениями являются при этом направления линий уровня косинусов, задающих потенциал (3.4) согласно формуле (3.1). Соответствующие траектории появляются на наиболее низких уровнях энергии, при дальнейшем повышении энергии число таких направлений растет. Так же, как и в предыдущих двух случаях, конечный фазовый объем занимают «квазибаллистические» траектории, состоящие из длинных участков баллистических траекторий, разделенных короткими промежуточными участками (рис. 34). При этом, как мы уже говорили выше, для определения геометрических особенностей «хаотического» потенциала, как и в «регулярном» случае, более всего подходит, видимо, изучение вклада «диффузионных» и «скачущих» траекторий, появляющихся при «промежуточных» значениях энергии.

ЖЭТФ, том **160**, вып. 6 (12), 2021



Рис. 31. Переход к диффузионной динамике при изменении начальных условий в «хаотическом» потенциале (3.4) при нулевой полной энергии частицы

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматриваются вопросы, связанные с геометрией квазипериодических потенциалов на плоскости, методами их создания, зависимостью от управляющих параметров, а также динамикой квазиклассических частиц в таких потенциалах. Основные рассмотрения относятся к ситуации появления таких потенциалов в системах ультрахолодных атомов в магнитооптических ловушках, хотя приводимые нами результаты имеют место в действительности для самых общих типов квазипериодических потенциалов. Показано, что в общем случае квазипериодические потенциалы на плоскости естественно разделить на два основных класса, а именно, потенциалы с «регулярным» поведением открытых ли-



Рис. 32. Области доступности и диффузионная динамика в «хаотическом» потенциале (3.4) при положительных энергиях частиц ($\epsilon = 0.64$ и $\epsilon = 0.72$)

ний уровня и потенциалы с «хаотическим» поведением открытых линий уровня. В каждом семействе квазипериодических потенциалов, зависящих гладко от некоторого набора параметров, потенциалы из этих классов возникают на множествах различной структуры, дополняющих друг друга в полном пространстве параметров. А именно, первое множество представляет собой объединение (счетного числа) областей с кусочно-гладкими границами, в то время как второе имеет фрактальные свойства. По поведению открытых линий уровня первые потенциалы могут быть отнесены к «регулярному» типу (приближающихся к периодическим потенциалам),



Рис. 33. Появление баллистических траекторий в «хаотическом» потенциале (3.4) при повышении энергии частицы ($\epsilon=5$)

в то время как вторые могут рассматриваться в качестве модели случайных потенциалов. Бездиссипативная динамика ультрахолодных атомов в рассматриваемых потенциалах является интегрируемой на нижних уровнях энергии, постепенно хаотизируясь с ростом энергии атомов. Как правило, в интервале существования открытых линий уровня потенциала присутствуют оба типа (интегрируемый и хаотический) такой динамики, при этом свойства хаотической динамики атомов существенно зависят от геометрии линий уровня потенциала. Исследование транспортных свойств атомного газа в квазипериодических потенциалах при наличии в ансамбле частиц с соответствующими энергиями может, таким образом, позволить наблюдать различия между потенциалами обоих типов, а также дать более подробную информацию о геометрии их открытых линий уровня.



ЛИТЕРАТУРА

- 1. H. Bohr, Acta Mathematica 47, 237 (1926).
- A. S. Besicovitch, Proceed. London Math. Soc. 2, 495 (1926).

- **3**. С. П. Новиков, УМН **37**, 3 (1982).
- 4. А. В. Зорич, УМН 39, 235 (1984).
- 5. И. А. Дынников, УМН 47, 161 (1992).
- 6. С. П. Царев, Частное сообщение (1992-93).
- И. А. Дынников, Математические заметки 53, 57 (1993).
- A. V. Zorich. in: Proc. Geometric Study of Foliations, (Tokyo, November 1993), ed. by T. Mizutani et al., World Scientific, Singapore (1994), p. 479.
- I. A. Dynnikov, Surfaces in 3-Torus: Geometry of Plane Sections, Proc. of ECM2, BuDA (1996).
- 10. I. A. Dynnikov, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 45.
- 11. И. А. Дынников, УМН 54, 21 (1999).
- 12. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН 69, 419 (1959).
- И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН 78, 411 (1962).
- **14**. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН **87**, 389 (1965).
- 15. Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, Наука, Москва (1967).
- 16. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, Электронная теория металлов, Наука, Москва (1971).
- А. А. Абрикосов, Основы теории металлов, Наука, Москва (1987).
- M. I. Kaganov and V. G. Peschansky, Phys. Rep. 372, 445 (2002).
- С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, Письма в ЖЭТФ
 63, 809 (1996).
- 20. С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, УФН 168, 249 (1998).
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, Sol. State Phys., Bulletin of Braz. Math. Society, New Series 34, 171 (2003).
- 22. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, J. Stat. Phys. 115, 31 (2004).
- 23. С. П. Новиков, УМН 54, 147 (1999).
- **24**. И. А. Дынников, С. П. Новиков, УМН **60**, 3 (2005).
- **25**. E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1983).

- **26**. А. Лихтенберг, М. Либерман, *Регулярное и стохастическое движение*, Мир, Москва (1984).
- 27. В. С. Летохов, Письма в ЖЭТФ 7, 348 (1968).
- V. Letokhov, Laser Control of Atoms and Molecules, Oxford University Press, New York (2007).
- 29. I. Bloch, Nature Phys. 1, 23 (2005).
- 30. I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- 31. M. Greiner and S. Fölling, Nature 453, 736 (2008).
- 32. A. Hemmerich, D. Schropp, Jr., and T. W. Hänsch, Phys. Rev. A 44, 1910 (1991).
- 33. D. Hennequin and P. Verkerk, arXiv:0906.2121 [physics.atom-ph]
- 34. D. Hennequin and P. Verkerk, Eur. Phys. J. D 57, 95 (2010).
- 35. L. Guidoni, C. Triche, P. Verkerk, and G. Grynberg, Phys. Rev. Lett. 79, 3363 (1997).
- 36. L. Guidoni, B. Depret, A. di Stefano, and P. Verkerk, Phys. Rev. A 60, R4233 (1999).
- 37. L. Sanchez-Palencia and L. Santos, Phys. Rev. A 72, 053607 (2005).
- 38. K. Viebahn, M. Sbrocia, E. Carter, Jr-Chiun Yu, and U. Schneider, Phys. Rev. Lett. **122**, 110404 (2019).
- 39. R. Gautier, H. Yao, and L. Sanchez-Palencia, Phys. Rev. Lett. 126, 110401 (2021).
- 40. L. Guidoni and P. Verkerk, J. Optics B: Quantum and Semiclassical Optics 1, R23 (1999).
- 41. S. Gopalakrishnan, I. Martin, and E. A. Demler, Phys. Rev. Lett. 111, 185304 (2013).
- 42. L.-M. Duan, E. Demler, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. 91, 090402 (2003).
- 43. L. Santos, M. A. Baranov, J. I. Cirac, H.-U. Everts, H. Fehrmann, and M. Lewenstein, Phys. Rev. Lett. 93, 030601 (2004).
- 44. A. Ya. Maltsev, J. Math. Phys. 45, 1128 (2004).
- 45. M. R. Lam, N. Peter, Th. Groh, W. Alt, C. Robens, D. Meschede, A. Negretti, S. Montangero, T. Calarco, and A. Alberti, Phys. Rev. X 11, 011035 (2021).
- 46. D. Stauffer, Phys. Rep. 54, 1 (1979).
- 47. J. W. Essam, Rep. Prog. Phys. 43, 833 (1980).
- **48**. E. K. Riedel, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **106**, 110 (1981).

- 49. S. A. Trugman, Phys. Rev. B 27, 7539 (1983).
- **50**. А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **112**, 1710 (1997).
- 51. A. Zorich, Amer. Math. Soc. Transl., Ser. 2, Vol. 197, AMS, Providence, RI (1999), p. 135.
- 52. Р. Де Лео, УМН 55, 181 (2000).
- 53. Р. Де Лео, УМН 58, 197 (2003).
- 54. R. De Leo, Phys. Lett. A 332, 469 (2004).
- 55. R. De Leo, Physica B: Cond. Matt. 362, 62 (2005).
- 56. R. De Leo, Exper. Math. 15, 109 (2006).
- 57. Р. Де Лео, И. А. Дынников, УМН 62, 151 (2007).
- 58. R. De Leo and I.A. Dynnikov, Geom. Dedicata 138, 51 (2009).
- 59. A. Skripchenko, Discrete Contin. Dyn. Sys. 32, 643 (2012).
- 60. A. Skripchenko, Ann. Glob. Anal. Geom. 43, 253 (2013).
- I. Dynnikov and A. Skripchenko, Amer. Math. Soc. Transl., Ser. 2, Vol. 234, AMS, Providence, RI (2014), p. 173, arXiv:1309.4884.
- 62. I. Dynnikov and A. Skripchenko, Trans. Moscow Math. Soc. 76, 287 (2015).
- 63. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, Invent. Math. 206, 109 (2016).

- 64. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, Bulletin de la Société Mathématique de France 144, 539 (2016).
- 65. А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, Труды МИАН 302, 296 (2018).
- 66. P. Horak, J.-Y. Courtois, and G. Grynberg, Phys. Rev. A 58, 3953 (1998).
- 67. D. Boiron, C. Mennerat-Robilliard, J.-M. Fournier, L. Guidoni, C. Salomon, and G. Grynberg, Eur. Phys. J. D — Atomic, Molecular, Opt. Plasma Phys. 7, 373 (1999).
- 68. J. P. Gordon and A. Ashkin, Phys. Rev. A 21, 1606 (1980).
- 69. J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, Journal of the Optical Society of America B 2, 1707 (1985).
- 70. V. G. Minogin and V. S. Letokhov, Laser Light Pressure on Atoms, CRC Press; 1st edition (January 1, 1987).
- 71. A. P. Kazantsev, G. I. Surdutovich, and V. P. Yakovlev, *Mechanical Action of Light on Atoms*, World Scientific Publishing Company; Illustrated edition (August 1, 1990).
- **72.** В. Ю. Аргонов, С. В. Пранц, ЖЭТФ **123**, 946 (2003).
- **73**. С. В. Пранц, ЖЭТФ **158**, 459 (2020).

О ВОЗМОЖНОСТИ СОХРАНЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АНСАМБЛЕ ОДИНАКОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

А. М. Башаров^{а,b*}, А. И. Трубилко^{с**}

^а Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» 123182, Москва, Россия

^b Московский физико-технический институт (технический университет) 141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

> ^с Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России 196105, Санкт-Петербург, Россия

> > Поступила в редакцию 25 августа 2021 г., после переработки 25 августа 2021 г. Принята к публикации 31 августа 2021 г.

Показано, что ансамбль из N_c независимых одинаковых квантовых осцилляторов в случае их нерезонансного взаимодействия с одним затухающим осциллятором эффективно описывается как ансамбль одинаковых осцилляторов, распадающихся в поле общего термостата. Скорость излучения такого ансамбля необычным образом зависит от числа N_c осцилляторов и может быть полностью подавлена в зависимости от числа осцилляторов ансамбля и при условии нулевой плотности фотонов термостата в определенной частотной области спектра. Такая особенность отражает невинеровский характер динамики ансамбля осцилляторов и возникает при корректном учете всех антивращающих и быстроменяющихся во времени (в картине Дирака) слагаемых в операторах взаимодействия осцилляторов, которыми обычно пренебрегают.

DOI: 10.31857/S0044451021120087

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о динамике гармонических осцилляторов является классической задачей физики и возникает в самых разнообразных ее разделах. Помимо физических приложений задача о гармонических осцилляторах является хорошим полигоном для отработки различных математических методов теории открытых квантовых систем.

Основной проблемой теории открытых квантовых систем является получение кинетического уравнения открытой системы, взаимодействующей с термостатным окружением. Основным используемым здесь приближением является марковское приближение и представление о термостатном окружении как о дельта-коррелированном поле. В случае открытой системы из гармонических квантовых осцилляторов, взаимодействующей с гармоническими осцилляторами термостатного бозонного поля, первой замеченной проблемой была некорректность результатов, получаемых стандартными методами в случае квадратичного гамильтониана. Важным здесь является словосочетание «стандартными методами», под которым имеются в виду методы матрицы плотности, описанные в книге [1]. В работе [2] установлено, что корректное кинетическое уравнение получается для квантового гармонического осциллятора в случае пренебрежения в операторе взаимодействия так называемыми антивращающими слагаемыми. Такое приближение иначе известно как приближение вращающейся волны. В дальнейшем основная масса работ по теории открытых квантовых систем была выполнена в приближении вращающейся волны. Однако в работе [3] было указано, что при рассмотрении двух связанных друг с другом осцилляторов, каждый из которых распадается в свой термостат, нарушается второе начало термодинамики. В работе [4] показано, что второе начало термодинамики не нарушается, а прибли-

^{*} E-mail: basharov@gmail.com

 $^{^{\}ast\ast}$ E-mail: trubilko.andrey@gmail.com

жение вращающейся волны должно сопровождаться жесткими ограничениями на частотный спектр участвующих во взаимодействии полей так, как это требует алгебраическая теория возмущений [5,6].

При обсуждении системы гармонических осцилляторов многие полагают, что нет ничего принципиально нового в их рассмотрении, поскольку в случае квадратичного гамильтониана система из осцилляторов может быть легко диагонализована преобразованием Боголюбова. В случае открытых систем, т.е. при взаимодействии ансамбля осцилляторов с ансамблем дельта-коррелированных термостатных осцилляторов, в работе [7] показано, с какими математическими сложностями приходится здесь сталкиваться. При этом общие формулы, полученные обобщенным преобразованием Боголюбова, оказывается не так просто проанализировать. Так, из общих формул не видно, как «изолированный» осциллятор, нерезонансно связанный с затухающим осциллятором, распадается в тот же термостат, что и затухающий, но в другую частотную область. Этот результат получен в рамках алгебраической теории возмущений [8] и свидетельствует о пользе локального анализа осцилляторных систем, несмотря на возможность диагонализации квадратичного гамильтониана. Деление анализа осцилляторных открытых квантовых систем на глобальный и локальный подходы введено в работах [3,9], отчасти вследствие ошибочного результата [3] о противоречии локального подхода второму началу термодинамики. Наша задача — показать эффективность локального подхода, который, в отличие от глобального подхода, относительно просто указывает на новые физические эффекты, которые не видны в общих формулах глобального подхода. При этом такая простота держится на нетривиальном математическом аппарате — алгебраической теории возмущений и технике квантовых стохастических дифференциальных уравнений. Необходимость алгебраической теории возмущений особенно видна для оптических открытых систем [10], поскольку без перехода к эффективному гамильтониану, не содержащему в представлении взаимодействия быстроменяющихся переменных, стандартное приближение дельта-коррелированных полей окружения не будет отвечать рассматриваемой физической ситуации. Квантовые стохастические дифференциальные уравнения не знакомы физикам, однако в марковском приближении уравнение Шредингера открытой системы и ее окружения строго определено именно в смысле квантового стохастического дифференциального уравнения [11].

В недавней работе [12] показано, что ансамбль квантовых осцилляторов распадается в общий термостат невинеровским образом, т.е. интенсивность импульса излучения зависит от числа осцилляторов в ансамбле осциллирующим образом. Этот необычный результат пока не получен в рамках глобального подхода и он целиком обязан общему выводу квантовой теории открытых систем — стохастическое дифференциальное уравнение Шредингера управляется всеми основными квантовыми случайными процессами: уничтожающим, рождающим и считывающим [13]. Роль считывающего процесса в динамике открытой системы выделена терминологически — если считывающий процесс играет роль, то динамику такой открытой системы называют невинеровской. Общий вид уравнения получен давно, однако до работы [12] не было примера осцилляторных систем, в которых считывающий процесс проявил бы себя.

Роль общего термостата в распаде ансамбля одинаковых квантовых частиц состоит как в появлении режима квантового запутывания в динамике частиц [14], так и в специфических эффектах стабилизации возбужденного состояния ансамбля по отношению к коллективному распаду [15, 16]. Поэтому поиск ситуаций, в которых появляется режим общего термостата, весьма актуален.

Новая модель распада системы осцилляторов в поле общего термостата возникает, если осцилляторы нерезонансно взаимодействуют с общим затухающим осциллятором, а именно с осциллятором, резонансно взаимодействующим с термостатом. Такая задача аналогична задаче о распаде атомов, помещенных внутрь резонатора в условиях дисперсионного предела для резонансной частоты атомов по отношению к частоте моды резонатора [17]. Если мода резонатора затухает, то атомы оказываются распадающимися в поле общего термостата.

Отметим, что эффект стабилизации возбужденного состояния ансамбля по отношению к коллективному распаду определяется корректным учетом антивращающих слагаемых, а это выполняется в рамках алгебраической теории возмущений. Подчеркнем, что вопрос о корректном учете антивращающих слагаемых в кинетическом уравнении для квантового гармонического осциллятора вне рамок алгебраической теории возмущений в рамках локального подхода не решен.

В данной статье покажем, что корректный учет антивращающих слагаемых в случае ансамбля невзаимодействующих между собой одинаковых квантовых осцилляторов, нерезонансно связанных с одним затухающим осциллятором, приводит к распаду ансамбля в поле общего бозонного термостата с невинеровской зависимостью эффективной константы распада от числа осцилляторов в ансамбле. При определенных числах осцилляторов их ансамбль распадается не с увеличенной скоростью распада [18-20], а противоположным образом коллективный распад в поле общего термостата может быть полностью подавлен. То есть и ансамбль квантовых осцилляторов, нерезонансно связанных с затухающим осциллятором, испытывает эффект стабилизации возбужденных состояний аналогично ансамблю одинаковых гармонических осцилляторов и возбужденных атомов, распадающихся в поле общего термостата [12, 15, 16]. Подчеркнем, что с учетом работы [12] найдено два случая своеобразной динамики ансамбля гармонических осцилляторов. Эти случаи пока не обнаружены в рамках глобального подхода с диагонализацией гамильтониана всех осцилляторов рассматриваемой задачи. Между тем факт диагонализации гамильтониана системы ни о чем не говорит, поскольку общие формулы здесь совершенно непрозрачны [7] и увидеть новый физический результат весьма затруднительно — во всяком случае, в рамках глобального подхода еще не установлен факт стабилизации возбужденного состояния осцилляторов по отношению к коллективному распаду в поле общего термостата. Правда, в рамках глобального подхода задача о динамике осцилляторов, нерезонансно связанных с затухающим осциллятором, пока и не ставилась.

В статье методами алгебраической теории возмущений рассмотрена система одинаковых квантовых гармонических осцилляторов в количестве N_c, нерезонансно взаимодействующих с затухающим осциллятором. Такая модель для одного осциллятора была рассмотрена в работе [4]. Было показано, что и «изолированный» осциллятор, пусть и нерезонансно связанный с затухающим, также начинает релаксировать, оставаясь при этом независимым от затухающего осциллятора. Если рассматривать систему из N_c «изолированных» осцилляторов, нерезонансно связанных с одним затухающим осциллятором, то указанную релаксацию при определенных N_c можно полностью подавить. Такая зависимость скорости распада от числа частиц N_{c} в квантовом ансамбле одинаковых частиц противоположна известному эффекту типа сверхизлучения, когда скорость релаксации возрастает пропорционально N_c [18-20]. Необычная зависимость обусловлена учетом антивращающих слагаемых. Именно алгебраическая теория возмущений дает возможность корректно учесть антивращающие слагаемые и позволяет представить эффективное взаимодействие ансамбля «независимых» осцилляторов с бозонным термостатом затухающего осциллятора в виде случайного считывающего квантового процесса в случае нулевой плотности фотонов термостата на частоте изолированных осцилляторов.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В качестве исходного гамильтониана H^{Ini} задачи о нерезонансном взаимодействии ансамбля «изолированных» осцилляторов с общим затухающим осциллятором возьмем следующий:

$$H^{Ini} = H^{Osc} + H^{D} + H^{Th} + H^{D-Th} + H^{D-Osc},$$

где

$$H^{Osc} = \sum_{i=1}^{N_c} \hbar \Omega_c c_i^{\dagger} c_i$$

— гамильтониан системы одинаковых осцилля
торов частоты $\Omega_c,$

$$H^D = \hbar \Omega_D a^{\dagger} a$$

— гамильтониан затухающего осциллятора с частотой Ω_D ,

$$H^{Th} = \hbar \int \omega b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega} \, d\omega$$

— гамильтониан термостата, в который распадается затухающий осциллятор. Операторы рождения и уничтожения c_i^{\dagger} и c_i квантов *i*-го осциллятора, а также аналогичные операторы a^{\dagger} и *a* для затухающего осциллятора подчиняются обычным бозонным коммутационным соотношениям и коммутируют для различных осцилляторов и с бозонными операторами b_{ω}^{\dagger} и b_{ω} рождения и уничтожения квантов термостата. Локальный подход к теории открытых квантовых систем предполагает, чтобы и для затухающего осциллятора, и для нерезонансно с ним связанного ансамбля осцилляторов кинетические уравнения выводились бы заново.

Взаимодействие затухающего осциллятора с термостатом определяется обычным образом:

$$H^{D-Th} = \int \gamma(\omega) \left(a + a^{\dagger}\right) \left(b_{\omega} + b_{\omega}^{\dagger}\right) d\omega, \quad (1)$$

где $\gamma(\omega)$ — параметр связи затухающего осциллятора с термостатом.

Нерезонансное взаимодействие одинаковых осцилляторов с затухающим осциллятором имеет вид (g — параметр связи)

$$H^{D-Ocs} = g \left(c_i e^{-i\Omega_c t} + c_i^{\dagger} e^{i\Omega_c t} \right) \times \\ \times \left(a e^{-i\Omega_D t} + a^{\dagger} e^{i\Omega_D t} \right).$$
(2)

В операторе (1) антивращающими слагаемыми являются следующие:

$$\int \gamma(\omega) \left(ab_{\omega} + a^{\dagger} b_{\omega}^{\dagger} \right) d\omega,$$

аналогичные слагаемые в операторе (2), но в силу нерезонансности взаимодействия (2) все представленные там слагаемые в картине Дирака являются быстроменяющимися функциями времени. В то же время и часть интегралов, отвечающих вращающимся слагаемым,

$$\int \gamma(\omega) \left(a^{\dagger} b_{\omega} + a b_{\omega}^{\dagger} \right) d\omega$$

в картине Дирака являются быстроменяющимися функциями времени. Это часть интеграла, где интегрирование ведется за пределами узкой частотной области спектра вблизи частоты Ω_D . Согласно анализу [10] все быстроменяющиеся во времени слагаемые H^{Ini} должны быть исключены унитарным преобразованием и переходом к эффективному гамильтониану. Эта идея и лежит в основе алгебраической теории возмущений [6]. Выше, когда говорилось об учете антивращающих слагаемых, имелся в виду учет всех быстроменяющихся слагаемых в картине Дирака.

Алгебраическая теория возмущений дает возможность записать эффективный гамильтониан для всей системы. Оказывается, что из него можно выделить эффективный гамильтониан H^{Eff} ансамбля осцилляторов, которые во втором порядке теории возмущений оказываются взаимодействующими с термостатом затухающего осциллятора, но с квантами другой частотной области, нежели той, с которой взаимодействует затухающий осциллятор. Обобщая результаты работ [3,4,21] для нескольких «изолированных» осцилляторов, эффективный гамильтониан $H^{Eff}(t)$ ансамбля одинаковых осцилляторов получаем в виде (использована картина Дирака, о чем указывает явное написание аргумента времени)

$$H^{Eff}(t) = V^{Tr}(t) + V^{St}(t),$$
 (3)

$$V^{St}(t) = -\frac{G^2}{2\hbar\Omega_c} N_c \int_{\omega,\omega'\in(\Omega_c)} b^{\dagger}_{\omega} b_{\omega'} e^{i(\omega-\omega')t} d\omega \, d\omega',$$

$$V^{Tr}(t) = -G \sum_i \int_{\omega\in(\Omega_c)} c^{\dagger}_i b_{\omega} e^{-i(\omega-\Omega_c)t} d\omega - -G \sum_i \int_{\omega\in(\Omega_c)} c_i b^{\dagger}_{\omega} e^{i(\omega-\Omega_c)t} d\omega.$$

При этом сдвиг Лэмба включаем в частоту перехода осцилляторов, поскольку больше он ни на что не влияет. Все процессы определяются эффективной константой взаимодействия

$$G = \frac{g\gamma(\Omega_D)}{2\hbar\Omega_D}$$

В соответствии с общей [22] теорией структура эффективного гамильтониана, получаемая методами алгебраической теории возмущений, в части взаимодействия с термостатом содержит два типа слагаемых. Первый, $V^{Tr}(t)$, описывает переходы с изменением энергии — осцилляторное возбуждение переходит в квант термостата и наоборот. В марковском приближении эти слагаемые выражаются через рождающий и уничтожающий квантовые случайные процессы, которыми моделируется термостат. Их можно выразить через квантовые винеровские случайные процессы, и если только они присутствуют в эффективном гамильтониане, то динамику ансамбля одинаковых осцилляторов иногда называют винеровской [6].

Второй тип слагаемых описывает виртуальный обмен квантов с термостатом без изменения энергетического состояния осцилляторов рассматриваемого ансамбля. Мы называем это слагаемое штарковским взаимодействием с термостатом. В марковском приближении это слагаемое описывается квантовым считывающим процессом [16]. В отличие от винеровских процессов, для квантового считывающего процесса имеет место другая алгебра для дифференциалов Ито. Подчеркнем, что в марковском приближении в случае эффективных гамильтонианов типа (3) естественно уравнение Шредингера для волнового вектора состояния ансамбля и термостата описывать как квантовое стохастическое дифференциальное уравнение, управляемое всеми основными квантовыми случайными процессами — рождающим, уничтожающим и считывающим. Области интегрирования обозначены как (Ω_c) с центральной частотой Ω_c и шириной порядка скорости релаксации «изолированного» осциллятора. Именно эта
частотная область термостата и представляется в марковском приближении упомянутыми квантовыми случайными процессами [6].

Подчеркнем особенность оператора штарковского взаимодействия $V^{St}(t)$. Он мал по сравнению с оператором перехода, но содержит множитель, пропорциональный числу осцилляторов в ансамбле N_c. При представлении оператора штарковского взаимодействия квантовым считывающим случайным процессом эта малая величина входит в большую величину в виде множителя, роль которого возрастает с ростом N_c. В ансамблях с достаточным числом частиц этот множитель осциллирует с изменением N_c . Если исходить из масштабов слагаемых $V^{Tr}(t)$ и $V^{St}(t)$, то эффект должен проявиться при $N_c \approx 10^2$ [16]. Появление осциллирующего множителя в случае ансамбля из одинаковых атомов интерпретировано в предыдущих работах как результат своеобразной интерференции процесса с излучением кванта в термостат и виртуальных процессов переизлучения квантов, когда энергетическое состояние системы не меняется.

В результате стандартных вычислений, которые подробно изложены в работах [8, 16, 22, 23], получаем кинетическое уравнение, описывающее динамику ансамбля осцилляторов, нерезонансно связанных с затухающим осциллятором:

$$\frac{d\rho^{S}(t)}{dt} = -\hat{\Gamma}\rho^{S}(t), \qquad (4)$$

$$\hat{\Gamma}\rho^{S}(t) = -\frac{i}{\hbar} \Big[\rho^{S}(t), H^{L-S} \Big] + \\ + \left(\frac{1}{2} L_{+} L_{-} \rho^{S}(t) + \frac{1}{2} \rho^{S}(t) L_{+} L_{-} - L_{-} \rho^{S}(t) L_{+} \right), \\ H^{L-S} = \frac{2\pi G^{2}}{\hbar^{2} \Omega_{c}} \frac{\sin Y_{\Lambda} - Y_{\Lambda}}{Y_{\Lambda}^{2}} \sum_{j=1}^{N_{c}} c_{j}^{\dagger} \sum_{k=1}^{N_{c}} c_{k}, \quad (5) \\ L_{-} = \frac{Y_{\Lambda}^{e}}{Y_{\Lambda}} \sum_{j=1}^{N_{c}} c_{j}, L_{+} L_{-} = \\ L_{-} = U_{-} \sum_{k=1}^{N_{c}} C_{k} = U_{-} \sum_{k=1}^{N_{c}} C_{k}$$

$$= 2 \frac{1 - \cos I_{\Lambda}}{Y_{\Lambda}^2} \sum_{j=1} c_j^{\dagger} \sum_{k=1} c_k$$
$$Y_{\Lambda}^e = e^{-iY_{\Lambda}} - 1.$$

Подчеркнем, что с операторами и величинами (5) кинетическое уравнение (4) рассматривается как уравнение в безразмерных величинах.

Заметим, что операторы затухающего осциллятора в марковском приближении не вошли напрямую в уравнения (4) и (5). От затухающего осциллятора остались константы связи, которые вошли в эффективную константу связи G, и его термостат, который определяет релаксацию ансамбля «изолированных» осцилляторов. Важно подчеркнуть, что ансамбль «изолированных» осцилляторов взаимодействует с другой частотной областью термостата, а именно (Ω_c), тогда как затухающий осциллятор взаимодействует с областью (Ω_D). За исключением штарковского взаимодействия этот результат обобщает случай одного «изолированного» осциллятор ра [8,22] на ансамбль изолированных осцилляторов. Специфика ансамбля проявляется именно в необходимости учета штарковского взаимодействия.

В заключение раздела отметим, что в рамках изложенного подхода получаются также кинетические уравнения для затухающего осциллятора, которые здесь мы не приводим. Факт рассмотренного нерезонансного взаимодействия с ансамблем «изолированных» осцилляторов проявляется только в дополнительном сдвиге частоты, аналогичном полученному в работе [4]. При этом сами кинетические уравнения и константа распада затухающего осциллятора остаются неизменными, т. е. затухающий осциллятор и с учетом нерезонансного взаимодействия с ансамблем распадается независимо от распада ансамбля.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы свели задачу о нерезонансном взаимодействии затухающего осциллятора с ансамблем квантовых гармонических осцилляторов к случаю распада ансамбля квантовых осцилляторов в общий бозонный термостат. Параметры затухающего осциллятора вошли в параметры, определяющие распад ансамбля в общий термостат, и задача свелась к уже исследованной нами [12]. Перечислим основные результаты.

Аналогично случаю динамики атомного ансамбля невинеровская динамика ансамбля осцилляторов характеризуется двумя новыми эффектами. Первый — релаксационный сдвиг частоты

$$\Delta\Omega_R\approx \frac{\pi^2 G^4}{3\hbar^4\Omega_c}N_c$$

точнее, коллективный сдвиг энергии уровней осцилляторов, зависящий от числа осцилляторов в ансамбле. Этот сдвиг определяется слагаемым H^{S-L} в релаксационном операторе (4), (5):

$$H^{L-S} = \frac{\pi^2 G^4}{3\hbar^3 \Omega_c} N_c \sum_{j=1}^{N_c} c_j^{\dagger} \sum_{k=1}^{N_c} c_k.$$
(6)

Направление коллективного сдвига противоположно лэмбовскому сдвигу, который выписан в других работах [4, 22] и здесь просто включается в частоту Ω_c .

Второй эффект — зависимость коллективной релаксации от числа частиц в осцилляторе, отличная от полученной в работах [18–20]. Если ввести коллективные операторы рождения и уничтожения возбуждения в ансамбле осцилляторов,

$$C^{\dagger} = \sum_{j=1}^{N_c} c_j^{\dagger}, \quad C = \sum_{k=1}^{N_c} c_k,$$

то интенсивность излучения ансамбля осцилляторов оценим как

$$I(t) = -\hbar\Omega_c \frac{d\langle C^{\dagger}C\rangle}{dt},\tag{7}$$

причем согласно (4) и (5) имеем

$$\frac{d}{dt}\langle C^{\dagger}C\rangle = -G\frac{1-\cos(G^2N_c/2\Omega_c^2)}{(G^2N_c/2\Omega_c^2)^2}\langle C^{\dagger}C\rangle.$$
 (8)

(В уравнениях (6)–(8) величины размерные.) Дополнительный множитель, о котором говорили выше при обсуждении штарковского взаимодействия, входящий мультипликативно в константу винеровского распада, дается выражением

$$\frac{1-\cos(G^2N_c/2\Omega_c^2)}{(G^2N_c/2\Omega_c^2)^2}$$

При значениях числа осцилляторов в ансамбле

$$N_c = 2n\pi \frac{2\Omega_c^2}{G^2}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots,$$

константа коллективной релаксации принимает значение, в точности равное нулю. Такое поведение — следствие корректного учета антивращающих слагаемых в методе алгебраической теории возмущений.

Вид импульса сверхизлучения во времени,

$$\langle C^{\dagger}C \rangle = \langle C^{\dagger}C \rangle_{0} \exp\left(-G\frac{1-\cos\left(\frac{G^{2}N_{c}}{2\Omega_{c}^{2}}\right)}{\left(\frac{G^{2}N_{c}}{2\Omega_{c}^{2}}\right)^{2}}t\right),$$

зависит от начального состояния осцилляторов, определяемого средним $\langle C^{\dagger}C\rangle_0$, или способа приготовления коллективной системы. Как и в случае винеровской динамики, значение интенсивности оказывается пропорциональным квадрату числа осцилляторов N_c^2 только для случая сфазированно приготовленного начального состояния, когда $\langle C^{\dagger}C\rangle_0 \propto \propto N_c^2$. Для такого состояния и средние $\langle C^{\dagger}\rangle_0 \propto \propto \langle C\rangle_0 \propto N_c$. В случае приготовления системы со случайным распределением фаз осцилляторов значение среднего $\langle C^{\dagger}C\rangle_0 \propto N_c$, поскольку в этом случае $\langle C^{\dagger}\rangle_0 \propto \langle C\rangle_0 \propto \sqrt{N_c}$.

4. ВЫВОДЫ

Результаты данной работы дополняют предыдущие работы авторов [8, 10, 12, 17, 21, 22] и показывают, что и ансамбль одинаковых атомов, и ансамбль одинаковых осцилляторов испытывают сходную невинеровскую динамику, если ансамбль локализован в объеме, много меньшем длины волны, и распадается в общий термостат, а число частиц в ансамбле становится критическим (порядка сотни). При этом физическая реализация общего термостата может быть различной. В дополнение к естественным ситуациям, например, атомы в окружающем вакуумном электромагнитном поле, общий термостат возникает в случае нерезонансного взаимодействия элементов ансамбля с одной затухающей нерезонансной модой резонатора. Этот случай важен, поскольку здесь можно несколько ослабить требования к степени локализации ансамбля. Невинеровская динамика в описанном в статье смысле противоположна известным результатам — вместо увеличения скорости распада с ростом числа частиц возможно полное подавление коллективной релаксации. К тому же появляется новый коллективный релаксационный сдвиг частоты, зависящий от числа частиц в ансамбле — атомов или квантовых осцилляторов. Отличие случая атомов от случая гармонических осцилляторов заключается в разных формах импульса коллективного излучения. У атомов импульс сверхизлучения формируется с некоторой задержкой, в случае осцилляторов распад начинается без задержки сразу. Невинеровская динамика ансамбля отражает общие результаты теории открытых квантовых систем, а также существенную роль учета квантового считывающего процесса. Подчеркнем, что все известные работы по теории открытых квантовых систем, выполненные с использованием представлений о квантовых случайных процессах (кроме исследований детектирования излученных фотонов [24, 25]), не учитывали квантовый считывающий процесс [13] и использовали только представления о рождающем и уничтожающем квантовых случайных процессах. Однако роль квантового считывающего процесса и его вклад в динамику открытой системы следуют из строгих общих математических результатов, и актуальной задачей было найти физические ситуации, в которых квантовый считывающий процесс проявил бы себя. Такая ситуация возникла в задачах взаимодействия вакуумного электромагнитного поля с ансамблем одинаковых частиц. В работе [16] процессы второго порядка по константе взаимодействия с вакуумным электромагнитным полем были представлены через квантовый считывающий процесс в марковском приближении. Однако в силу второго порядка малости эти процессы были малыми. Но оказалось, что, несмотря на свою малость, считывающий процесс проявляется в ансамблях либо атомов, либо квантовых осцилляторов. Квантовый считывающий процесс в силу алгебраических свойств дифференциалов Ито оказался способным встраиваться в рождающий и уничтожающий процессы и перенормировать константу взаимодействия ансамбля с вакуумным электромагнитным полем. Физически такое встраивание можно интерпретировать как своеобразные процессы конкуренции и интерференции квантовых переходов в открытой системе с испусканием реального фотона и виртуальных процессов переизлучения. В первом случае в открытой квантовой системе менялось квантовое состояние и его энергия. Во втором случае энергия открытой системы не изменялась, так что соответствующий оператор диагонален по квантовым состояниям открытой системы. Здесь важно заметить, что в стандартном подходе к выводу кинетического уравнения, известном большинству специалистов [1], в силу ограниченности этого подхода, такие слагаемые вклада в релаксационный оператор кинетического уравнения не дают. Это отдельно подчеркнуто в [1]. Более изощренные методы анализа динамики открытых квантовых систем, например, на основе квантового стохастического предела [26], учитывают диагональные слагаемые, однако пока нет примеров применения данного подхода к эффективному гамильтониану. В данной работе представлен анализ нового случая, в котором проявились свойства квантового считывающего процесса. Представляется, что набор различных случаев реализации открытых квантовых систем позволит найти экспериментально реализуемую ситуацию, допускающую такую систему управления оптическими возбуждениями, которая может пригодиться для формирования контролируемой невинеровской динамики ансамбля возбужденных квантовых частиц. Последнее может оказаться востребованным в задачах квантовой информации, где рассматриваются многокубитные системы и коллективная релаксация приводит к быстрой декогеренции. Невинеровская динамика, как следует из результатов данной работы, способна подавить коллективную релаксацию и сохранить возбуждение в ансамбле одинаковых частиц. Авторы надеются, что и для задач дискретной фотоники [27,28] эффекты сохранения возбуждения могут оказаться интересными при рассмотрении квантовых аналогов явлений.

Финансирование. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00234а).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. К. Блум, *Теория матрицы плотности и ее приложения*, Мир, Москва (1983).
- 2. D. F. Walls, Z. Phys. 234, 231 (1970).
- A. Levy and R. Kozloff, Europhys. Lett. 107, 20004 (2014).
- А. И. Трубилко, А. М. Башаров, ЖЭТФ 156, 407 (2019).
- A. I. Maimistov and A. M. Basharov, Nonlinear Optical Waves, Kluwer Acad., Dordrecht (1999).
- 6. А. М. Башаров, ЖЭТФ 158, 978 (2020).
- A. E. Teretenkov, Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics 22, 1930001 (2019).
- А. И. Трубилко, А. М. Башаров, ЖЭТФ 157, 74 (2020).
- A. S. Trushechkin and I. V. Volovich, Europhys. Lett. 113, 30005 (2016).
- А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ 111, 632 (2020).
- 11. C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, Springer-Verlag, Berlin (2004).
- **12**. А. М. Башаров, А. И. Трубилко, ЖЭТФ **160**, 498 (2021).
- А. С. Холево, в сб. Итоги науки и техн. Совр. пробл. математики. Фунд. направления, ВИНИТИ 83, 3 (1991).
- 14. А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ 75, 151 (2002).
- **15**. А. М. Башаров, ЖЭТФ **140**, 431 (2011).
- 16. A. M. Basharov, Phys. Rev. A 84, 013801 (2011).
- 17. A. M. Basharov, V. N. Gorbachev, and A. A. Rodichkina, Phys. Rev. A 74, 042313 (2006).

- **18**. Л. А. Вайнштейн, А. И. Клеев, ДАН **311**, 862 (1990).
- 19. Q. Zhang et al., Phys. Rev. Lett. 113, 047601 (2014).
- 20. F. Dinc and A. M. Branczyk, Phys. Rev. Res. 1, 032042(R) (2019).
- 21. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ 110, 505 (2019).
- 22. A. I. Trubilko and A. M. Basharov, Phys. Scripta 95, 045106 (2020).
- **23**. А. М. Башаров, ЖЭТФ **142**, 419 (2012).

- 24. A. Barchielli, Phys. Rev. A 34, 1642 (1986).
- 25. C. W. Gardiner, A. S. Parkins, and P. Zoller, Phys. Rev. A 46, 4363 (1992).
- **26**. L. Accardi, Y. G. Lu, and I. Volovich, *Quantum Theory and its Stochastic Limit*, Springer-Verlag, Berlin (2002).
- 27. A. I. Maimistov, Nonlin. Phenomena Complex Syst. J. 19, 358 (2016).
- 28. Y. Kivshar, Low Temp. Phys. 45, 1201 (2019).

СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА И УСТОЙЧИВОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ БИСЛОЕВ ИЗ АТОМОВ В *SP*³-ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ

В. А. Грешняков, Е. А. Беленков*

Челябинский государственный университет 454001, Челябинск, Россия

Поступила в редакцию 16 апреля 2021 г., после переработки 27 июля 2021 г. Принята к публикации 28 июля 2021 г.

Выполнено квантовомеханическое моделирование структуры и свойств слоевых полиморфных разновидностей алмаза, называемых алмазоподобными бислоями. Алмазоподобные бислои (DL) представляют собой полностью полимеризованные бислойные графены L₆, L₄₋₈, L₃₋₁₂, L₄₋₆₋₁₂ и L₅₋₇. Расчеты, выполненные методом теории функционала плотности, показали, что алмазоподобные бислои могут быть получены в результате сильного одноосного сжатия исходных бислойных графенов перпендикулярно плоскости этих слоев в диапазоне давлений от 8.6 до 51.4 ГПа. Использование в качестве предшественников графеновых слоев, состоящих из топологических дефектов, приводит к снижению давления фазового перехода в несколько раз по сравнению с обычным графеном L₆. Минимальная слоевая плотность (0.98 мг/м²) соответствует бислою DL₄₋₆₋₁₂ с наибольшим диаметром пор (4.56 Å). Все изученные алмазоподобные бислои, в отличие от графена и алмаза, должны быть полупроводниками с шириной прямой запрещенной зоны от 1.36 до 2.38 эВ. В результате молекулярно-динамического моделирования установлено, что при нормальном давлении бислои DL₆, DL₄₋₈, DL₄₋₆₋₁₂ и DL₅₋₇ могут быть устойчивыми при 300 К, тогда как бислой DL₃₋₁₂ должен быть неустойчив при температурах выше 260 К. Наиболее устойчивый алмазоподобных бислой DL₆ и трехмерная фаза на его основе должны обладать высокими механическими характеристиками. Этот бислой может быть однозначно идентифицирован в синтезированных углеродных материалах по теоретически рассчитанному спектру комбинационного рассеяния и абсорбционному рентгеновскому спектру.

DOI: 10.31857/S0044451021120099

1. ВВЕДЕНИЕ

Углеродные наноструктуры, согласно общей схеме структурной классификации углеродных соединений [1], имеют кристаллографическую размерность $0D_c$, $1D_c$ или $2D_c$. Теоретически координация атомов в наноструктурах может быть равна 2, 3 или 4, что соответствует sp-, sp^2 - или sp^3 -гибридизации электронных орбиталей атомов. Большинство известных углеродных наноструктур состоит из атомов углерода в 3-координированных (sp^2 -гибридизированных) состояниях [2–4]. Также могут существовать наноструктуры, состоящие из атомов в sp-гибридизированных состояниях, или ги-

бридные наноструктуры, в которых атомы углерода находятся в различных состояниях — *sp*-*sp*², $sp-sp^3$, sp^2-sp^3 или $sp-sp^2-sp^3$. Некоторые из таких наноструктур были описаны и изучены теоретически или получены и исследованы экспериментально. Наноструктурами из *sp*-гибридизированных атомов, имеющими нульмерную кристаллографическую размерность, являются карбиновые нанокольца [5, 6]. Изолированные атомные карбиновые цепочки можно считать одномерными наноструктурами [7,8]. Гибридные соединения также могут иметь $0D_c$ -структуру (фуллереноподобные кластеры и нанодиски [9]), $1D_c$ -структуру (карбиноидные нанотрубки [10, 11], димеры нанотрубок [12] и пентаграфеновые нанотрубки [13]) или 2D_c-структуру (графиновые слои [11, 14, 15], пентаграфен [16], тетрагексауглерод [17], слои из полимеризованных фуллеренов и нанотрубок [18, 19]). К двумерным гибрид-

^{*} E-mail: belenkov@csu.ru

ным наноструктурам также относятся графановые слои, состоящие из ковалентно связанных sp^3 -гибридизированных атомов углерода и атомов водорода [20–22]. По-видимому, возможно существование углеродных алмазоподобных наноструктур, состоящих только из атомов в состояниях sp^3 -гибридизации. Действительно, одномерные наноструктуры такого типа были теоретически исследованы в работах [23, 24].

Вопрос о том, могут ли устойчиво существовать слои только из углеродных атомов в 4-координированных состояниях и какова структура этих двумерных соединений, остается недостаточно изученным. Анализ возможной структуры алмазоподобных монослоев, которые могли быть аналогами графеновых монослоев, показал, что структурные разновидности алмазоподобных монослоев должны быть неустойчивыми [25]. Добиться устойчивости двумерных алмазоподобных наноструктур возможно в результате формирования бислоев, толщина которых составляет два атома [25]. Согласно схеме модельного построения структуры различных углеродных соединений [1], алмазоподобные наноструктуры из 4-координированных атомов возможно построить в результате сшивки наноструктур-предшественников из 3-координированных атомов.

Структура алмазоподобных бислоев теоретически может быть сформирована в результате сшивки пар графеновых слоев различных полиморфных разновидностей. В первую очередь, наибольший интерес представляют бислои, которые могут быть сформированы из обычного графена L₆, основных полиморфов графена L₄₋₈, L₃₋₁₂ и L₄₋₆₋₁₂, состоящих из топологических дефектов 3, 4, 8 и 12 [26,27], а также из слоев L₅₋₇, которые состоят из топологических дефектов 5–7–7–5 Стоуна – Троуэра – Уэлса [28], и обладают высокой устойчивостью.

В данной работе проведено теоретическое исследование ряда новых гипотетических бислоев, состоящих только из *sp*³-гибридизированных атомов.

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Для построения кристаллических решеток алмазоподобных слоев была использована модельная методика, предложенная в работе [29]. Исходные структуры слоев получались в процессе сшивки параллельно расположенных двумерных предшественников — графеновых слоев. В качестве предшественников был использован обычный графен L₆, три другие основные полиморфные разновидности гра-



Рис. 1. Структуры предшественников алмазоподобных слоев: графеновые слои L_{4-8} (*a*), L_{3-12} (*б*), L_{4-6-12} (*в*) и L_{5-7} (*г*)

фена, L_{4-8} , L_{3-12} и L_{4-6-12} [1], а также графен L_{5-7} , состоящий только из дефектов Стоуна–Троуэра–Уэлса [28] (рис. 1).

Начальная геометрическая оптимизация структуры слоевых нанокристаллов проводилась полуэмпирическим методом РМ7 в программе МОРАС [30], пока величина сил не становилась меньше 0.5 мэB/Å. Элементарные ячейки и группы симметрии определялись при использовании таблицы субпериодических групп для слоевых соединений [31]. Дальнейшая оптимизация структуры и расчет свойств алмазоподобных слоев выполнялись методом теории функционала плотности (DFT), который реализован в программном комплексе Quantum ESPRESSO [32]. Расчеты проводились при использовании функционала обменно-корреляционной энергии Пердью-Берка-Эрнцерхофа (РВЕ) [33] только для валентных электронов. Влияние ионных остовов учитывалось по методу сохраняющего норму псевдопотенциала Труллера – Мартинса [34]. Для интегрирования в зонах Бриллюэна использовались сетки $14 \times 14 \times 1$ из k-точек, определенные по методу Монхорста-Пака [35]. Значение отсечки кинетической энергии было принято равным 60 Ry. Расчеты структуры и свойств углеродных наноструктур выполнялись при постоянном параметре элементарных ячеек, расположенных перпендикулярно плоскости слоев, который составил 15 Å.

Имитация термической обработки алмазоподобных слоев проводилась методом молекулярной динамики с временным интервалом 1 фс при использовании суперячеек, содержащих от 32 до 48 атомов, и k-сеток $6 \times 6 \times 1$. Исследование процессов фазовых переходов бислойных графенов в алмазоподобные слои при высоком давлении выполнялось по методике, описанной в работе [36]. Спектры комбинационного рассеяния алмазоподобных соединений были рассчитаны по методике из работы [37]. Расчет рентгеновских абсорбционных спектров углеродных фаз и наноструктур проводился по методике из работы [38] для суперячеек, содержащих от 64 до 72 атомов. Модули Юнга углеродных слоев были рассчитаны по следующей формуле:

$$Y = \frac{1}{Sh} \left(\frac{\partial E_{total}}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=0},\tag{1}$$

где S — площадь поверхности слоя, h — толщина слоя, E_{total} — полная энергия, ε — относительное удлинение (до 1.8%). Объемный модуль наноструктурированной фазы из наиболее устойчивых алмазоподобных слоев вычислялся в области относительного изменения объема до 1.8% из модифицированного уравнения состояния Кумара – Шармы [39].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Первый этап работы заключался в модельном построении возможной структуры алмазоподобных слоев из различных графеноподобных предшественников. Анализ способов формирования структуры алмазоподобных слоев показал, что они могут быть получены в процессе сшивки двух параллельно расположенных графеновых слоев. При другой ориентации предшественников и в зависимости от их количества формируются только гибридные $(sp^2 - sp^3)$ наноструктуры. Были рассмотрены два варианта относительного расположения пары графеновых слоев, которые аналогичны расположению слоев в кристаллах графита при АВ- и АА-упаковках [36]. В результате геометрической оптимизации модельно-построенных исходных структур алмазоподобных слоев методом РМ7 установлено, что устойчивой является только структура бислоев, полученных при сшивке графеновых слоев L₆, L₄₋₈, L₃₋₁₂, L₄₋₆₋₁₂ и L₅₋₇ с упаковкой АА. На рис. 2 приведены фрагменты структур алмазоподобных бислоев DL₆, DL₄₋₈, DL₃₋₁₂, DL₄₋₆₋₁₂ и DL₅₋₇, оптимизированных методом DFT-PBE.

Установлено, что алмазоподобные бислои DL_6 , DL_{3-12} и DL_{4-6-12} имеют гексагональные элементарные ячейки, тогда как бислои DL_{4-8} и DL_{5-7} —



Рис. 2. Структуры алмазоподобных бислоев DL₆ (*a*), DL₄₋₈ (*б*), DL₃₋₁₂ (*b*), DL₄₋₆₋₁₂ (*b*) и DL₅₋₇ (*d*)

соответственно квадратную и центрированную прямоугольную ячейки (рис. 2). В табл. 1 приведены группы симметрии и параметры элементарных ячеек этих слоев. Все атомы в бислоях DL₆, DL₄₋₈, DL₃₋₁₂ и DL₄₋₆₋₁₂ находятся в кристаллографически эквивалентных позициях. В бислое DL₅₋₇ имеются три неэквивалентные кристаллографические позиции атомов. Структуры алмазоподобных бислоев характеризуются длинами межатомных связей и углами между ними (табл. 2). Минимальная длина связи (1.5289 Å) наблюдается в бислое DL_{3-12} , а максимальная длина (1.6268 Å) — в DL₅₋₇. Толщина бислоев изменяется в диапазоне от 1.5747 до 1.6069 Å соответственно для бислоев DL_{3-12} и DL_{5-7} . Наименьший угол между связями (60°) наблюдается в бислое DL_{3-12} , наибольший угол (150°) характерен для бислоев DL₃₋₁₂ и DL₄₋₆₋₁₂. Поры наибольшего размера наблюдаются в 12-угольных призматических звеньях бислоев DL₃₋₁₂ и DL₄₋₆₋₁₂, диаметр которых составляет примерно 4.5 Å. Деформационный параметр Str, характеризующий отклоне-

Слой	Группа симметрии	$a, \mathrm{\AA}$	$b, \mathrm{\AA}$	$h, \mathrm{\AA}$	N, at.
DL_6	$p6/mmm~(N^{\bullet}80)$	2.7369	2.7369	1.5970	4
DL_{4-8}	$p4/mmm~(N^{o}61)$	3.8218	3.8218	1.5985	8
DL_{3-12}	$p6/mmm~(N^{o}80)$	5.8204	5.8204	1.5747	12
DL_{4-6-12}	$p6/mmm~(N^{o}80)$	7.5116	7.5116	1.5946	24
DL_{5-7}	$cmmm \ (N^{\underline{0}} 47)$	8.2607	6.4825	1.6069	32

Таблица 1. Структурные характеристики бинарных алмазоподобных слоев (*a* и *b* — параметры двумерной элементарной ячейки; *h* — толщина слоя; *N* — число атомов в элементарной ячейке)

Таблица 2. Длины межатомных связей (*L*), углы между ними (β), диаметры наибольших пор (*D*_{pore}) и деформационные параметры (Str и Def) в кубическом алмазе и углеродных бислоях

Параметры	Алмаз	DL_6	DL_{4-8}	DL_{3-12}	DL_{4-6-12}	DL_{5-7}
$L_{min}, \mathrm{\AA}$	1.5577	1.5802	1.5547	1.5289	1.5612	1.5376
$L_{max}, \mathrm{\AA}$	1.5577	1.5970	1.6030	1.5863	1.6082	1.6268
β_{min} , град	109.47	90.00	90.00	60.00	90.00	89.56
β_{max} , град	109.47	120.00	135.00	150.00	150.00	140.38
$D_{pore}, \mathrm{\AA}$	1.425	1.603	2.568	4.460	4.560	1.983
Str, Å	0.000	0.107	0.134	0.103	0.138	0.132
Def, град	0.00	90.0	128.9	188.9	128.9	94.1

ние длин связей в исследуемой алмазоподобной наноструктуре от длины связи в алмазе, варьируется в пределах от 0.103 до 0.138 Å. Другой деформационный параметр, Def, характеризует отклонение углов в исследуемом бислое от алмазного угла и варьируется в диапазоне от 90.0 до 188.9°. Следовательно, наименее напряжена структура бислоя DL₆, тогда как наиболее напряженными наноструктурами являются бислои DL₃₋₁₂ и DL₄₋₆₋₁₂.

Так как структуры всех полученных алмазоподобных бислоев являются сильно напряженными (деформированными) по отношению к структуре кубического алмаза, на следующем этапе работы была исследована их термическая устойчивость. Молекулярно-динамическое моделирование термической обработки бислоев было проведено в диапазоне температур от 200 до 300 К. В результате было установлено, что при температуре 300 К структура всех алмазоподобных бислоев неустойчива. Однако при более низких температурах эти бислои могут быть устойчивыми. На рис. 3 приведены графики зависимости полной энергии от времени термической обработки. В процессе отжига алмазоподобных бислоев происходит постепенное гофрирование их структуры. Наиболее устойчивым является бислой DL₆, так как его деструкция происходит при температуре более 270 K и сопровождается разделением исходного бислоя на два обычных графеновых слоя. Бислои DL₄₋₈ и DL₅₋₇ устойчивы в области 240 K, при повышении температуры происходит их преобразование в гибридные напряженные слои. Наименее устойчивыми являются бислои DL₃₋₁₂ и DL₄₋₆₋₁₂, поскольку их структуры преобразуются в гибридные слои при температуре выше 210 K.

На следующем этапе работы были изучены возможные способы экспериментального получения алмазоподобных бислоев. Наиболее вероятный способ синтеза алмазоподобных бислоев — сильное статическое сжатие бислойного графена при низких температурах, поскольку по такому механизму могут быть экспериментально получены алмазоподобные соединения из графита [40–42]. Анализ показал, что искомые бислои могут быть сформированы при сжатии бислойных графенов с упаковкой АА вдоль оси, перпендикулярной плоскостям графеновых слоев. Наилучшим предшественником бислоя DL₆ является обычный графен (L₆), тогда как для бислоев DL_{4–8}, DL_{3–12}, DL_{4–6–12} и DL_{5–7} необходимо ис-





Рис. 3. Зависимости полной энергии E_{total} от времени t термической обработки алмазоподобных бислоев (в правом верхнем углу каждого графика приведено изображение суперячейки бислоя после отжига)

пользовать состоящие из топологических дефектов графеновые слои L₄₋₈, L₃₋₁₂, L₄₋₆₋₁₂ и L₅₋₇. Экспериментально структуру бислойного графена типа АА можно получить в результате частичного интеркалирования слоев атомами лития, так как именно такая структура получается при интеркалировании литием обычного графита [43].

На рис. 4 изображены зависимости разностной полной энергии от межслоевого расстояния, харак-

теризующие фазовые переходы бислойных графенов в алмазоподобные бислои. Установлено, что структурное преобразование графенов в алмазоподобные бислои происходит при сближении исходных графеновых слоев на расстояние от 1.707 до 1.756 Å. Величина энергетического барьера (ΔE_{G-D}), который необходимо преодолеть для структурного перехода фазы из 3-координированных атомов в фазу из 4-координированных атомов, изменяется в преде-

$\Delta E_{\textit{total}}$, э \mathbf{B}/\mathbf{a} том



лах от 1.08 до 1.34 эВ/атом (табл. 3). Минимальное значение давления (P_{G-D}), при котором происходит структурное преобразование, наблюдается для прямого фазового перехода $L_{4-6-12} \rightarrow DL_{4-6-12}$ и равно 8.6 ГПа (табл. 3). Данная величина P_{G-D} значительно меньше соответствующих значений давлений формирования наиболее устойчивых алмазоподобных фаз [36, 44–46]. Максимальное значение



Рис. 4. Зависимости разностной полной энергии ΔE_{total} от межслоевого расстояния h для следующих прямых фазовых переходов графеновых бислоев: L₆ в алмазоподобный бислой DL₆ (a); L₄₋₈ в DL₄₋₈ (δ); L₃₋₁₂ в DL₃₋₁₂ (e); L₄₋₆₋₁₂ в DL₄₋₆₋₁₂ (z); L₅₋₇ в DL₅₋₇ (d)

 P_{G-D} (51.4 ГПа) характерно для фазового перехода $L_6 \rightarrow DL_6$ и является близким к соответствующим расчетным величинам для формирования 3С- и 2H-политипов алмаза [36,46]. Кроме того, для наиболее устойчивых алмазоподобных бислоев по графикам на рис. 4 можно определить энергетические барьеры для обратных фазовых переходов (ΔE_{D-G}), значения которых необходимы для оценки темпера-

Таблица 3. Расчетные значения свойств кубического алмаза, графена и бинарных алмазоподобных слоев (ρ — слоевая плотность; ΔE_{diam} — разностная полная энергия относительно полной энергии алмаза; ΔE_{G-D} и P_{G-D} — энергетический барьер и давление фазового перехода графеновых слоев (G) в алмазоподобные соединения (D); Δ_{DOS} и Δ_{BS} — ширины запрещенных зон, определенные соответственно по плотности электронных состояний и по зонной структуре)

Слой/фаза	$ ho,{ m mr}/{ m m}^2$	$\Delta E_{diam},$ э B/atom	$\Delta E_{G-D},$ э B/atom	$P_{G-D},$ ГПа	Δ_{DOS} , эВ	Δ_{BS} , эВ
Алмаз	_	0	0.31 [36]	59.0 [36]	4.35	5.61
Γ рафен L_6	0.745	-0.04	—	—	0	0
Бислой DL_6	1.230	1.22	1.34	51.4	1.45	1.86
Бислой DL ₄₋₈	1.092	1.55	1.09	29.6	1.80	2.38
Бислой DL ₃₋₁₂	0.816	2.00	1.08	16.7	0.75	1.36
Бислой DL ₄₋₆₋₁₂	0.980	1.65	1.08	8.6	1.42	1.42
Бислой DL ₅₋₇	1.192	1.32	1.21	12.9	1.40	1.88

туры этих фазовых переходов по формуле

$$T_{D-G} \sim \Delta E_{D-G}/3k_B.$$

Так, например, значение ΔE_{D-G} для обратного фазового перехода бислоя DL₆ в бислойный графен L₆ составляет 0.07 эВ/атом, что соответствует $T_{D-G} \approx$ ≈ 270 К. Следовательно, результаты расчетов фазовых переходов хорошо согласуются с проведенными молекулярно-динамическими расчетами, согласно которым новые бислои являются неустойчивыми при температуре выше 300 К.

На следующем этапе работы были рассчитаны некоторые свойства алмазоподобных бислоев. Слоевая плотность ρ изучаемых бислоев изменяется в пределах от 0.816 (DL₃₋₁₂) до 1.230 (DL₆) мг/м² (табл. 3), которая на 10–65% больше плотности обычного графена [43]. Анализ показал, что ρ линейно уменьшается при увеличении деформационного параметра Def. Зависимость хорошо описывает следующая формула:

$$\rho = a_1 + b_1 \operatorname{Def}$$

где $a_1 = 1.580 \text{ мг/м}^2$, $b_1 = -0.004 \text{ мг/град} \cdot \text{м}^2$.

Также были рассчитаны разностные полные энергии бислоев относительно полной энергии кубического алмаза (ΔE_{diam}), которые приведены в табл. 3. Наименьшее значение ΔE_{diam} характерно для бислоя DL₆ (1.22 эB/атом), наибольшее для DL₃₋₁₂ (2.00 эB/атом), что очень хорошо согласуется с приведенными выше результатами молекулярно-динамических расчетов, согласно которым наиболее устойчивым является бислой DL₆, а наименее устойчивым — DL_{3-12} . Установлено, что ΔE_{diam} линейно возрастает при увеличении Def по следующей формуле:

$$\Delta E_{diam} = a_2 + b_2 \operatorname{Def},$$

где $a_2 = 0.011$ эВ/атом, $b_2 = 0.159$ эВ/град · атом.

Электронные свойства алмазоподобных бислоев были изучены при расчете спектров электронных состояний и зонных структур. На рис. 5 приведены плотности электронных состояний кубического алмаза и пяти гипотетических бислоев, по которым были определены минимальные разницы между энергиями электронов дна зоны проводимости и вершины валентной зоны (Δ_{DOS}). Величины Δ_{DOS} алмазоподобных бислоев меньше соответствующей величины для алмаза на 58-83 % и находятся в диапазоне от 0.75 \Rightarrow B (DL₃₋₁₂) до 1.80 \Rightarrow B (DL₄₋₈), см. табл. 3. Наблюдается корреляция между Def и Δ_{DOS} — ширина запрещенной зоны уменьшается при увеличении напряжения структуры. На корректность выполненных расчетов указывает то, что значение расчетной ширины прямой запрещенной зоны кубического алмаза составило 5.61 эВ и очень хорошо соответствует экспериментально определенной величине 5.4 эВ [47].

Зонные структуры гексагональных бислоев DL_6 , DL_{3-12} и DL_{4-6-12} были рассчитаны на интервалах между точками высокой симметрии G, K и M в зоне Бриллюэна, для тетрагонального бислоя DL_{4-8} — на интервалах между точками G, X и M, для базоцентрированного ромбического бислоя DL_{5-7} — на интервалах между точками G, X, Y, Y_1 и S. Установлено, что минимальная ширина запрещенной зоны



Рис. 5. Плотности электронных состояний кубического 3С-алмаза и алмазоподобных бислоев

 (Δ_{BS}) бислоев, определенная по зонной структуре, изменяется в пределах от 1.36 эВ (DL₃₋₁₂) до 2.38 эВ (DL₄₋₈) (табл. 3). Так как значения Δ_{DOS} и Δ_{BS} совпадают только для бислоя DL₄₋₆₋₁₂, этот бислой является прямозонным полупроводником, а четыре других бислоя — полупроводниками с непрямой запрещенной зоной.

Для наиболее стабильного алмазоподобного бислоя (DL₆) и трехмерной наноструктурированной фазы на его основе были определены упругие характеристики при механических нагрузках. Трехмерная наноструктурированная фаза представляла собой алмазоподобные бислои, упакованные в стопки с порядком чередования слоев AB. На рис. 6*a* приведены результаты расчетов разностной полной энергии ΔE_{total} при различных относительных одноосных растяжениях ε слоевых наноструктур по двум направлениям, устанавливающим диапазон изменения модуля Юнга *Y* для наноструктур, симметрия которых подобна симметрии графена [48]. При относительно небольших деформациях ($\varepsilon < 0.018$) модули Юнга определялись по формуле (1) после аппроксимации зависимостей $\Delta E_{total} = f(\varepsilon)$ полиномом второй степени. Апробация методики расчета показала, что расчетные значения постоянных упругости графена по направлениям типа «зигзаг» и «кресло» соответственно равны 343.7 и 354.5 Н/м и очень хорошо согласуются с экспериментальными значениями (310-350 Н/м) [49]. Модули Юнга для графена принимают следующие значения: $Y_{zig-zag} = 1026$ ГПа, $Y_{armchair} = 1058$ ГПа, которые хорошо соответствуют значению 1.05 ТПа, рассчитанному методом DFT в работе [50]. Для алмазоподобного бислоя DL₆ модули упругости (389.2 и 384.3 Н/м) превосходят соответствующие расчетные величины для графена примерно на 10%, однако значения модулей Юнга (Y_{ziq-zaq} = 787 ГПа, $Y_{armchair} = 777 \, \Gamma \Pi a$) оказались меньше соответствующих величин для графена на 25 %, что объясняется относительно большой толщиной бислоя.

Далее были проведены расчеты объемного модуля B для кубического алмаза и наноструктурированной фазы на основе бислоев DL_6 при всесторонне равномерном сжатии. В результате геометри-



Рис. 6. а) Зависимости разностной полной энергии ΔE_{total} от относительного удлинения ε структуры графена L₆ и алмазоподобного бислоя DL₆. б) Зависимости ΔE_{total} от компоненты тензора деформации (ε_{11}) при объемном сжатии структур 3С-алмаза и фазы DL₆ $P6_3/mmc$

ческой оптимизации структуры было установлено, что эта фаза имеет гексагональную элементарную ячейку (пространственная группа P6₃/mmc № 194) и характеризуется следующими позициями Уайкова:

4e(0.0000, 0.0000, 0.6678), 4f(0.3333, 0.6667, 0.6678).

Зависимости ΔE_{total} от компоненты тензора деформации ($\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$) приведены на рис. 66. Объемный модуль при бесконечно малых деформациях (B_0) был определен в процессе аппроксимации зависимости $\Delta E_{total} = f(\varepsilon_{11})$ модифицированной функцией состояния Кумара–Шармы. Для кубического алмаза значение B_0 составило 438.2 ГПа, которое лишь на 1.7 % меньше экспериментально определенного значения 446.1 ГПа [51]. Расчеты показали, что величина B_0 для наноструктурированной фазы из бислоев DL₆ равна 236.9 ГПа и меньше соответству-



Рис. 7. Рассчитанные спектры комбинационного рассеяния кубического алмаза (1) и бислоя DL₆ (2)

ющей расчетной величины для алмаза на 46 %, однако превышает объемный модуль высокопрочного карбида кремния [52].

Для возможности экспериментальной идентификации наиболее устойчивого алмазоподобного бислоя (DL₆) были проведены расчеты его спектральных характеристик. На рис. 7 приведены спектры комбинационного рассеяния для кубического алмаза и бислоя DL₆. В расчетном колебательном спектре алмаза имеется один пик при $k = 1340 \text{ см}^{-1}$, соответствующий валентным С-С-колебаниям. Позиция (волновое число) этого пика не более чем на 0.6 % отличается от экспериментально определенного сдвига комбинационного рассеяния (1332 см $^{-1}$) для кубического алмаза [43]. Расчеты показали, что колебательный спектр алмазоподобного бислоя DL₆ характеризуется двумя пиками высокой интенсивности, расположенными при $k = 1312, 1050 \text{ см}^{-1},$ которые соответствуют колебаниям атомов в плоскости слоя и перпендикулярно ей. Расчетный колебательный спектр бислоя DL₆ значительно отличается от экспериментальных спектров алмаза, графита, фуллеренов и нанотрубок [43,53,54], поэтому его идентификация не должна вызвать затруднений.

Кроме спектроскопии комбинационного рассеяния, для идентификации углеродных наноструктур часто используется абсорбционная рентгеновская спектроскопия, позволяющая изучать плотность незанятых электронных состояний [40, 55, 56]. Ближняя тонкая структура спектров поглощения рентгеновского излучения (NEXAFS) была рассчитана для кубического алмаза, гексагонального графита и алмазопобного бислоя DL₆ (рис. 8). Расчетный спектр поглощения фотонов при возбуждении остовного C1*s*-уровня углерода для 3С-алмаза удовлетворительно соответствует экспериментальному спектру [57] (рис. 8) и очень хорошо согласуется с теоретическим спектром из работы [58]. Также разность между энергиями доминирующего максиму-



Рис. 8. Рентгеновские абсорбционные спектры кубического алмаза (1, 2), гексагонального графита (3) и алмазоподобного бислоя DL₆ (4). Экспериментальный спектр алмаза (1) был получен в работе [57]

ма алмаза (291.0 эВ) и максимума графита, отвечающего свободным π -состояниям (285.6 эВ), хорошо соответствует ширине прямой запрещенной зоны алмаза (см. табл. 3). Установлено, что рассчитанный NEXAFS-спектр слоевой разновидности алмаза DL₆ значительно отличается от соответствующих спектров 3С-алмаза и 2Н-графита. Энергии, соответствующие максимальным плотностям состояний в зоне проводимости бислоя DL₆, равны 287.0, 290.0, 291.5, 294.2, 300.0, 302.3 эВ (рис. 8). В отличие от графита, наблюдается небольшой поляризационный эффект, который проявляется в различии спектров в области энергий фотонов от 302 до 315 эВ для направлений падающего излучения (100) и (001). Стоит отметить, что расчетный NEXAFS-спектр бислоя DL₆ также может быть использован для его идентификации с помощью спектроскопии характеристических потерь энергии электронами (EELS) [55].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведены *ab initio* исследования структуры, термической стабильности, процесса формирования и свойств алмазоподобных бислоев, получаемых на основе бислойных графенов L_6 , L_{4-8} , L_{3-12} , L_{4-6-12} и L_{5-7} . В результате расчетов методом теории функционала плотности установлено, что бислой DL₆ является наиболее устойчивым бисЖЭТФ, том **160**, вып. 6 (12), 2021

лоем, который стабилен до 300 К, тогда как бислой DL_{3-12} наименее устойчив, так как его деструкция происходит при температуре выше 260 К. Алмазоподобные бислои могут быть получены в результате сильного одноосного сжатия бислойного графена вдоль оси, перпендикулярной плоскостям этих слоев, в диапазоне давлений от 8.6 до 51.4 ГПа. Величина давления формирования бислоев быстро уменьшается за счет повышения доли топологических дефектов в структуре исходных слоев графена. Так, например, давление формирования бислоев DL_{4-6-12} и DL_{5-7} более чем на 78% меньше давления формирования макрокристаллов алмаза из графита при холодном сжатии.

Слоевая плотность изученных алмазоподобных бислоев превышает плотность обычного графена на 10-65%. Теоретически слоевая плотность гексагонального бислоя DL₆ могла быть равна удвоенной плотности исходных графеновых слоев L₆. Меньшие значения слоевой плотности относительно такой теоретической оценки обусловлены тем, что углерод-углеродные связи в алмазоподобных слоях удлиняются по сравнению со связями в графеновых слоях. Кроме того, в структурах бислоев имеются поры диаметром до 4.56 Å, поэтому эти бислои в перспективе могут быть использованы в качестве молекулярных сит.

Все изученные бислои должны быть полупроводниками, и их электронные свойства значительно отличаются от свойств графита и алмаза, поскольку ширина их минимальной прямой запрещенной зоны изменяется в пределах от 1.36 до 2.38 эВ.

Расчеты механических характеристик наиболее устойчивого бислоя показали, что средняя постоянная упругости бислоя DL₆ на 10.8% большее соответствующей величины для графена (L₆), однако средний модуль Юнга бислоя DL₆ оказался меньше соответствующего модуля для графена на 25 %. Объемный модуль упорядоченного конденсата из бислоев DL₆ составляет 234 ГПа, величина которого близка к величине для карбида кремния. Возможный способ экспериментального получения наиболее стабильного бислоя DL₆ может заключаться в одноосном статическом сжатии бислойного графена с упаковкой АА, которая может быть достигнута за счет частичного интеркалирования литием. Ось сжатия должна быть параллельна нормали плоскости исходного бислойного графена, так как именно в этом случае возможно формирование высокопрочных углеродных слоевых наноструктур, подобных экспериментально наблюдавшемуся высокопрочному димеру графена при наноиндентировании пары обычных графеновых слоев [59]. Экспериментальную идентификацию алмазоподобного бислоя DL_6 можно выполнить с помощью теоретически рассчитанного спектра комбинационного рассеяния, содержащего только две интенсивные колебательные моды при k = 1050, 1312 см⁻¹. Более достоверно бислой DL_6 может быть идентифицирован по рентгеновскому абсорбционному спектру (или спектру EELS).

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-43-740015. Один из авторов (В. А. Г.) благодарит Фонд поддержки молодых ученых Челябинского государственного университета за частичную финансовую поддержку данного исследования.

ЛИТЕРАТУРА

- Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, ФТТ 55, 1640 (2013).
- S. K. Tiwari, V. Kumar, A. Huczko, R. Oraon, A. De Adhikari, and G. C. Nayak, Crit. Rev. Sol. St. Mater. Sci. 41, 1 (2016).
- L. Liu and J. Zhao, in Syntheses and Applications of Carbon Nanotubes and Their Composites, ed. by S. Suzuki, Intech Open Science, London (2013), Ch. 12, p. 257.
- А. А. Чиброва, А. А. Шувалов, Ю. С. Скибина, В. А. Кохия, М. И. Осьмаков, А. О. Шевченко, Российские нанотехнологии 11, 98 (2016).
- E. A. Rohlfing, D. M. Cox, and A. Kaldor, J. Chem. Phys. 81, 3322 (1984).
- Е. А. Беленков, Ф. К. Шабиев, Кристаллография 52, 299 (2007).
- X. Zhao, Y. Ando, Yi Liu, M. Jinno, and T. Suzuki, Phys. Rev. Lett. 90, 187401 (2003).
- K. Sharma and N. Costa, Phys. Rev. Lett. 125, 105501 (2020).
- Е. А. Беленков, А. Л. Ивановский, С. Н. Ульянов,
 Ф. К. Шабиев, Ж. структ. хим. 46, 1001 (2005).
- 10. Е. А. Беленков, И. В. Шахова, ФТТ 53, 2265 (2011).
- L. Li, W. Qiao, H. Bai, and Y. Huang, RSC Adv. 10, 16709 (2020).

- H. S. Domingos, J. Phys.: Condens. Matter 16, 9083 (2004).
- J. J. Quijano-Briones, H. N. Fernandez-Escamilla, and A. Tlahuice-Flores, Comput. Theor. Chem. 70, 1108 (2017).
- 14. G. Li, Y. Li, H. Liu, Y. Guo, Y. Lia, and D. Zhu, Chem. Comm. 46, 3256 (2010).
- Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов, ЖЭТФ 147, 949 (2015).
- 16. S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 112, 2372 (2015).
- 17. B. Ram and H. Mizuseki, Carbon 137, 266 (2018).
- 18. В. А. Давыдов, Л. С. Кашеварова, А. В. Рахманина, В. М. Сенявин, О. П. Пронина, Н. Н. Олейников, В. Н. Агафонов, А. Шварк, Письма в ЖЭТФ 72, 807 (2000).
- 19. Y. Jing and N. R. Aluru, Physica B 520, 82 (2017).
- 20. X. D. Wen, L. Hand, V. Labet, T. Yang, R. Hoffmann, N. W. Ashcroft, A. R. Oganov, and A. O. Lyakhov, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 108, 6833 (2011).
- 21. K. A. Krylova, J. A. Baimova, R. T. Murzaev, and R. R. Mulyukov, Phys. Lett. A 383, 1583 (2019).
- 22. J. R. Morse, D. A. Zugell, E. Patterson, J. W. Baldwin, and H. D. Willauer, J. Power Sources 494, 229734 (2021).
- 23. Р. А. Браже, В. С. Нефедов, ФТТ 56, 602 (2014).
- 24. M. M. Maslov, K. S. Grishakov, M. A. Gimaldinova, and K. P. Katin, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 28, 97 (2019).
- 25. В. А. Грешняков, Е. А. Беленков, Ж. структ. хим.
 61, 887 (2020).
- **26**. Е. А. Беленков, А.Е. Коченгин, ФТТ **57**, 2071 (2015).
- 27. Р. И. Бабичева, С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, К. Жоу, ЖЭТФ 156, 79 (2019).
- 28. V. H. Crespi, L. X. Benedict, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Phys. Rev. B 53, R13303 (1996).
- **29**. Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, ЖЭТФ **146**, 116 (2014).
- 30. J. J. P. Stewart, J. Mol. Model. 19, 1 (2013).
- International Tables for Crystallography, Vol. E, Ch. 4.1, pp. 219–389 (2006).

- P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R. A. DiStasio Jr., A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. Kucukbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. L. Nguyen, H.-V. Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Ponce, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, and S. Baroni, J. Phys.: Condens. Matter 29, 465901 (2017).
- 33. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- 34. N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991).
- 35. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188 (1976).
- 36. В. А. Грешняков, Е. А. Беленков, ЖЭТФ 151, 310 (2017).
- 37. M. Lazzeri and F. Mauri, Phys. Rev. Lett. 90, 036401 (2003).
- 38. O. Bunau and M. Calandra, Phys. Rev. B 87, 205105 (2013).
- **39**. В. А. Грешняков, Е. А. Беленков, Изв. вузов, Физика **57**, 24 (2014).
- 40. W. L. Mao, Ho-K. Mao, P. J. Eng, T. P. Trainor, M. Newville, C.-C. Kao, D. L. Heinz, J. Shu, Y. Meng, and R. J. Hemley, Science **302**, 425 (2003).
- 41. V. F. Britun, A. V. Kurdyumov, and I. A. Petrusha, Powder Metall. Met. Ceram. 43, 87 (2004).
- 42. V. D. Blank and B. A. Kulnitskiy, Int. J. Nanotechnol. 13, 640 (2016).
- 43. H. O. Pierson, Handbook of Carbon, Graphite, Diamond, and Fullerenes: Properties, Processing and Applications, Noyes, Park Ridge (1993).

- 44. A. R. Oganov, R. J. Hemley, R. M. Hazen, and A. P. Jones, Rev. Mineral. Geochem. 75, 47 (2013).
- 45. Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, ФТТ 60, 1290 (2018).
- 46. V. A. Greshnyakov, E. A. Belenkov, and M. M. Brzhezinskaya, Phys. Stat. Sol. (b) 256, 1800575 (2019).
- 47. C. Kittel, Introduction to Solid States Physics, Wiley, New York (1996).
- 48. G. Cao, Polymers 6, 2404 (2014).
- 49. A. Politano and G. Chiarello, Nano Res. 8, 1847 (2015).
- 50. F. Liu, P. M. Ming, and J. Li, Phys. Rev. B 76, 064120 (2007).
- 51. F. Occelli, P. Loubeyre, and R. Letoullec, Nature Mater. 2, 151 (2003).
- K. Kunc, M. Balkanski, and M. A. Nusimovici, Phys. Stat. Sol. (b) 72, 229 (1975).
- 53. H. Kuzmany, R. Pfeiffer, M. Hulman, and C. Kramberger, Phil. Trans. A 362, 2375 (2004).
- 54. A. Jorio and R. Saito, J. Appl. Phys. 129, 021102 (2021).
- 55. Е. М. Байтингер, Е. А. Беленков, М. М. Бржезинская, В. А. Грешняков, ФТТ 54, 1606 (2012).
- 56. M. Brzhezinskaya, E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov, G. E. Yalovega, and I. O. Bashkin, J. Alloys Compd. 792, 713 (2019).
- 57. P. J. Pauzauskie, J. C. Crowhurst, M. A. Worsley, T. A. Laurence, A. L. D. Kilcoyne, Y. Wang, T. M. Willey, K. S. Visbeck, S. C. Fakra, W. J. Evans, J. M. Zaug, and J. H. Satcher, Jr., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 108, 8550 (2011).
- 58. M. Taillefumier, D. Cabaret, A.-M. Flank, and F. Mauri, Phys. Rev. B 66, 195107 (2002).
- 59. Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, C. Berger, W. A. de Heer, E. Tosatti, E. Riedo, and A. Bongiorno, Nature Nanotechnol. 13, 133 (2018).

ЭФФЕКТИВНОЕ ТРЕНИЕ И ПОДВИЖНОСТЬ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЧАСТИЦ (НАНОЛЕНТ И НАНОТРУБОК) НА ПЛОСКОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ ПОДЛОЖКЕ h-BN

А. В. Савин*

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН) 119991, Москва, Россия

> Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова 117997, Москва, Россия

> > Поступила в редакцию 12 июня 2021 г., после переработки 16 июля 2021 г. Принята к публикации 25 июля 2021 г.

Методом молекулярной динамики с использованием двумерной цепной модели показано, что движение графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) на плоской термализованной многослойной подложке h-BN описывается как движение частиц в вязкой среде с постоянным коэффициентом трения. Возникающее при движении эффективное трение имеет волновую природу, причиной торможения является взаимодействие наночастицы с тепловыми изгибными колебаниями листов подложки. Величина коэффициента трения монотонно увеличивается с ростом температуры и уменьшается с увеличением размера наночастицы. Для нанолент возникающее трение разделяется на два типа: на внутреннее и краевое (на трение внутренней поверхности наноленты и трение ее краев с поверхностью подложки). При длинах L < 35 нм главную роль в торможении движения играет краевое, а при L > 35 нм — внутреннее трение. Под действием постоянной продольной силы динамика наночастиц всегда выходит на режим движения с постоянной скоростью, значение которой прямо пропорционально величине силы и обратно пропорционально значению коэффициента трения. Моделирование движения наноленты при наличии нормальной нагрузки (давления) показывает, что рост нагрузки приводит к уменьшению внутреннего трения из-за уменьшения под нанолентой амплитуды тепловых изгибных колебаний слоев подложки и к увеличению краевого трения из-за вдавливания краев наноленты в подложку. В силу этого эффект уменьшения трения при увеличении нормальной нагрузки может наблюдаться только для нанолент достаточно большого размера (L > 250 нм), когда главную роль играет внутреннее трение.

DOI: 10.31857/S0044451021120105

1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные (2D) слоистые материалы, такие как графен (G), гексагональный нитрид бора (h-BN), дисульфид молибдена (MoS₂) и вольфрама (WS₂), вызывают большой интерес из-за своих уникальных электронных [1–3] и механических [4–7] свойств. Благодаря очень низкому трению слоев эти материалы могут быть использованы в качестве высокоэффективной сухой смазки [8–14]. В последнее время повышенное внимание уделяется гетерогенным слоистым материалам, которые могут демонстрировать различные новые физические свойства по сравнению с их однородными аналогами [15–17]. Так, было показано, что использование гетероструктур G/h-BN позволяет получить нужные электронные свойства [18,19], а также существенно понизить трение между слоями [20].

Важной задачей для механических устройств нано- и микроразмеров является максимально возможное уменьшение трения [21]. Стандартные схемы смазки на таких размерах перестают работать, здесь необходимо от жидкой смазки перейти к сухой, связанной со скольжением плоских молекулярных слоев. Такой подход, впервые теоретически предложенный несколько десятилетий назад [22],

^{*} E-mail: asavin@center.chph.ras.ru



Рис. 1. Прямоугольный лист графена размера 2.02×1.88 нм² (160 атомов углерода), лежащий на плоской поверхности кристалла h-BN

позволил достичь чрезвычайно низких коэффициентов трения [23–25]. Особенно сильно понизить трение позволяет использование двумерных материалов, таких как графен и гексагональный нитрид бора h-BN [26]. Слоистые структуры из этих материалов могут обладать сверхскольжением слоев [15, 20, 27].

Использование слоистых 2D-структур требует фундаментального понимания истоков силы трения на атомном уровне. В работах [20, 27, 28] проводилось моделирование медленного протягивания слоя графена, расположенного над слоем h-BN, под действием боковых сил. Величина трения оценивалась как максимальное значение возникающей силы, препятствующей скольжению. Фактически находилась сила трения покоя при нулевой температуре. Функционирование механических устройств нано- и микроразмеров невозможно описать без учета тепловых колебаний. Поэтому здесь учет влияния тепловых колебаний на трение имеет особое значение. В отличие от стандартных сценариев трения, где трение всегда уменьшается с повышением температуры [29], в двухслойной структуре G/h-BN трение может увеличиваться с повышением температуры [30].

Целью настоящей работы является объяснение на атомарном уровне возникающего трения при движении наночастиц (нанолент и нанотрубок графена) по плоской поверхности многослойной подложки. В качестве подложки будет использована плоская поверхность гексагонального кристалла нитрида бора h-BN (см. рис. 1). Для определения коэффициентов возникающего эффективного трения будет промоделировано торможение свободного движения наночастиц вследствие их взаимодействия с термализованной подложкой (вследствие перекачки начальной кинетической энергии наночастиц в подложку). Будет проанализирована зависимость коэффициентов трения от размера наночастиц и температуры подложки.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 строится цепная 2D-модель, используемая далее для моделирования движения графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) по плоской многослойной подложке h-BN. В разд. 3 проводится моделирование торможения свободного движения наночастиц в результате их взаимодействия с термализованной подложкой. Определяется коэффициент возникающего эффективного трения и анализируется его природа. В разд. 4 анализируется подвижность наночастиц, моделируется их движение под действием боковой силы. В разд. 5 проводится проверка выполнения для нанолент эмпирического закона Амонтона-Кулона (моделируется влияние на трение нормальной нагрузки). Заключительные замечания приводятся в разд. 6.

2. МОДЕЛЬ

Для описания динамики нанолент и нанотрубок графена на плоской поверхности многослойной подложки удобно использовать двумерную модель системы молекулярных цепей [31–33]. Если считать, что наночастица (нанолента или нанотрубка графена) и листы h-BN подложки лежат так, что у всех направление зигзаг совпадает с осью x (см. рис. 1), то двумерная цепная модель будет описывать сечение системы наночастица + многослойная подложка вдоль оси x (см. рис. 2). Тогда одной частице в двумерной модели будут соответствовать все атомы наноленты (нанотрубки), имеющие одинаковые координаты x, z.

Если атомы, расположенные вдоль одной линии, параллельной оси y, двигаются синхронно, меняя только координаты x, z, то гамильтониан одной наноленты (нанотрубки) графена (h-BN) будет иметь вид гамильтониана цепи, расположенной в плоскости xz:

$$H_{i} = \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{1}{2} M_{i}(\dot{\mathbf{u}}_{n}, \dot{\mathbf{u}}_{n}) + V_{i}(R_{n}) + U_{i}(\theta_{n}) \right].$$
(1)

Здесь индекс i = 1, если рассматривается нанолента графена (G), и i = 2, если рассматривается нанолента бор нитрида (BN). Двумерный вектор $\mathbf{u}_n = (x_n, z_n)$ задает координаты *n*-ой частицы цепи. Масса частицы для цепи G совпадает с массой атома углерода $M_1 = M_{\rm C} = 12m_p$, а для цепи BN — со средней массой атомов бора и нит-



Рис. 2. Вид стационарных состояний однослойных листов графена длины L = 2.33, 4.79, 9.70 нм (число звеньев цепи $N_c = 20, 40, 80$) и однослойных нанотрубок с индексом киральности (10,0), (20,0), (40,0) (число звеньев циклической цепи $N_c = 20, 40, 80$) на многослойной подложке, образованной поверхностью кристалла h-BN (части a, b, c и d, e, f). Число слоев листов h-BN K - 1 = 3, число звеньев в BN-цепи $N_{bn} = 360$. Черная прямая показывает положение поверхности неподвижной подложки

рида $M_2 = (M_B + M_N)/2 = 12.4085m_p (m_p = 1.6603 \cdot 10^{-27} \text{ кг} - \text{масса протона}).$

Отметим, что используемая цепная 2D-модель (1) не позволяет описать поперечные (вдоль оси y) колебания наноленты, но позволяет описать продольные (вдоль оси x) и изгибные (вдоль оси z) колебания наноленты.

Потенциал

$$V_i(R) = \frac{1}{2}K_i(R - R_i)^2$$
(2)

описывает продольную жесткость цепи, K_i — жесткость взаимодействия, R_i — равновесная длина связи (шаг цепи), $R_n = |\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n|$ — расстояние между соседними узлами n и n + 1.

Потенциал

$$U_i(\theta) = \epsilon_i [1 + \cos(\theta)] \tag{3}$$

описывает изгибную жесткость цепи, θ — угол между двумя соседними связями,

$$\cos(\theta_n) = -(\mathbf{v}_{n-1}, \mathbf{v}_n)/R_{n-1}R_n,$$

Bektop $\mathbf{v}_n = \mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n$.

Параметры потенциалов (2), (3) для цепи G определены в [31,32] из анализа дисперсионных кривых наноленты графена. Продольная жесткость $K_1 = 405$ H/м, шаг цепи $R_1 = r_{\rm CC}\sqrt{3}/2 = 1.228$ Å ($r_{\rm CC} = 1.418$ Å — длина валентной связи C–C в листе графена), энергия $\epsilon_1 = 3.5$ эВ.

Нанолента h-BN имеет такую же структуру, как и нанолента графена. В двумерной модели ее гамильтониан тоже будет иметь вид (1). Для нахождение параметров цепи BN была рассмотрена нанолента h-BN. Взаимодействие атомов наноленты описывалось расширенным потенциалом Терсоффа для нитрида бора [34]. Вычисления показали, что нанолента h-BN имеет такую же гексагональную структуру, как и нанолента графена. В основном состоянии длина валентной связи B–N $r_{\rm BN} = 1.445685$ Å незначительно превышает длину валентной связи С-С. Анализ дисперсионных кривых наноленты показал, что она имеет частотный спектр изгибных (внеплоскостных) колебаний $0 \leq \omega \leq 747~{\rm cm}^{-1}$ и спектр продольных (вутриплоскостных) колебаний $0 \le \omega \le 1688 \text{ см}^{-1}$. Вычисления показали, что дисперсионные кривые двумерной цепи с гамильтонианом (1) наилучшим образом соответствуют дисперсионным кривым полноатомной модели наноленты при жесткости $K_2 = 480$ H/м, шаге цепи $R_2 =$ $= r_{\rm BN}\sqrt{3}/2 = 1.252$ Å и энергии $\epsilon_2 = 1.10$ эВ (см. рис. 3).

Отметим, что гамильтониан цепи (1) дает энергию деформации наноленты, приходящуюся на продольную полосу ширины $\Delta y = R_i/\sqrt{3}$, поэтому, если энергию системы цепей далее будем нормировать по наноленте графена, то энергию деформации нанолент h-BN нужно умножить на нормирующий множитель $c = R_1/R_2 = r_{\rm CC}/r_{\rm BN} = 0.9808$.

Для вычисления эффективного потенциала невалентного взаимодействия узлов цепей (энергии взаимодействия одного атома с поперечной линией атомов) были использованы потенциалы Леннарда – Джонса

$$V(r) = \epsilon_0 \left[(r_0/r)^{12} - 2(r_0/r)^6 \right], \qquad (4)$$

со значениями энергии ϵ_0 и равновесными длинами взаимодействия r_0 , приведенными в таблице.

Проведенные вычисления показали (см. рис. 4), что взаимодействия узлов цепей, соответствующих слоям бор-нитридной подложки и слою графена,



Рис. 3. Вид дисперсионных кривых наноленты h-BN (красные линии 1 соответствуют поперечным, а синие 2 — продольным колебаниям наноленты). Штриховые кривые 3 и 4 соответствуют изгибным и продольным колебаниям цепной 2D-модели наноленты

Таблица. Значения параметров потенциала Леннарда-Джонса (4) для различных пар взаимодействующих атомов [35]

	BB	NN	BN	CB	CN
ϵ_0 , МэВ	7.81	2.99	4.81	5.96	3.69
$r_0, \mathrm{\AA}$	4.083	3.660	3.866	3.976	3.756

можно с высокой точностью описать потенциалом Леннарда – Джонса

$$W_i(r) = \varepsilon_i \left[5(r_i/r)^{11} - 11(r_i/r)^5 \right] / 6.$$
 (5)

Здесь *r* — расстояние между взаимодействующими узлами (индекс *i* = 1, если описывается взаимодействие узлов цепей BN, *i* = 2 — взаимодействие узлов цепей BN и G). Энергии взаимодействия



Рис. 4. Вид потенциалов взаимодействия узлов цепей $W_i(r)$, i = 1, 2 (кривые 1, 2). Сплошные линии дают зависимости, полученные численно, штриховые линии — зависимости, описываемые потенциалом Леннарда – Джонса (5)

 $\varepsilon_1 = 0.01511$ эВ, $\varepsilon_2 = 0.01433$ эВ, равновесные расстояния $r_1 = 3.642$ Å, $r_2 = 3.701$ Å.

При моделировании динамики многослойной подложки необходимо ограничить число слоев. Поэтому будем считать, что первый (самый нижний) слой уже взаимодействует с неподвижной плоской поверхностью кристалла (на рис. 2 эта поверхность показана черной линией). Энергия взаимодействия атомов слоев с неподвижной подложкой тоже вычислялась с помощью потенциалов Леннарда – Джонса (4).

Вычисления показали (см. рис. 5), что потенциал взаимодействия с неподвижной подложкой $W_0(h)$ (зависимость энергии от расстояния h узла цепи до плоскости подложки) с высокой точностью может быть описан (k, l) потенциалом Леннарда–Джонса

$$W_0(h) = \varepsilon_0 [k(h_0/h)^l - l(h_0/h)^k] / (l-k), \qquad (6)$$

где степень l = 10, k = 3.75, энергия взаимодействия $\epsilon_0 = 0.0974$ эВ, равновесное расстояние $h_0 = 3.49$ Å.

Рассмотрим K-слойные структуры, представленные на рис. 2. Пусть первые $k = 1, \ldots, K - 1$ слоев соответствуют ВN-цепям (слоям кристалла h-BN), состоящим из N_{bn} звеньев. Эти слои лежат на плоской твердой подложке и взаимодействуют с ней (будем считать, что поверхность твердой подложки совпадает с плоскостью z = 0). Последняя K-тая G-цепь, имеющая $N_c < N_{bn}$ звеньев, соответствует графеновой наночастице (наноленте, нанотрубке), лежащей на плоской деформируемой мно-



Рис. 5. Потенциал взаимодействия $W_0(h)$ узла цепи BN с неподвижной плоской поверхностью кристалла h-BN. Сплошная линия дает зависимость, полученную численно, штриховая линия — зависимость, описываемую потенциалом Леннарда – Джонса (6)

гослойной (*K*-1-слойной) подложке. Координаты узлов этой системы *K* цепей задаются векторами

$$\{\mathbf{u}_{n,k} = (x_{n,k}, z_{n,k})\}_{n=1,k=1}^{N_k, K},$$

где N_k — число узлов в k-й цепи ($N_k = N_{bn}$ при $k = 1, \dots, K - 1$ и $N_K = N_c$).

Гамильтониан системы цепей будет иметь вид

$$H = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{bn}} \frac{1}{2} c M_2(\dot{\mathbf{u}}_{n,k}, \dot{\mathbf{u}}_{n,k}) + \sum_{n=1}^{N_c} \frac{1}{2} M_1(\dot{\mathbf{u}}_{n,K}, \dot{\mathbf{u}}_{n,K}) + E, \quad (7)$$

где потенциальная энергия

$$E = c \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{bn}} [V_2(R_{n,k}) + U_2(\theta_{n,k}) + W_0(z_{n,k})] +$$
(8)

$$+c\sum_{k_1=1}^{K-2}\sum_{k_2=k_1+1}^{K-1}\sum_{n=1}^{N_{ab}}\sum_{l=1}^{N_{ab}}W_1(r_{n,k_1;l,k_2})+ \quad (9)$$

$$+\sum_{n=1}^{N_c} [V_1(R_{n,K}) + U_1(\theta_{n,K})] + (10)$$

+
$$\sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{ab}} \sum_{l=1}^{N_c} W_2(r_{n,k;l,K}).$$
 (11)

Здесь расстояние между соседними узлами k-й цепи $R_{n,k} = |\mathbf{u}_{n+1,k} - \mathbf{u}_{n,k}|$, косинус угла между двумя соседними связями

$$\cos(\theta_{n,k}) = -(\mathbf{v}_{n-1,k}, \mathbf{v}_{n,k})/R_{n-1,k}R_{n,k},$$

вектор $\mathbf{v}_{n,k} = \mathbf{u}_{n+1,k} - \mathbf{u}_{n,k}$, расстояние между узлами разных цепей k_1 и k_2 $r_{n,k_1;l,k_2} = |\mathbf{u}_{l,k_2} - \mathbf{u}_{n,k_1}|$. В формуле потенциальной энергии первое слагаемое (8) задает энергию деформации ВN-цепей с учетом энергии их взаимодействия с твердой подложкой, второе слагаемое (9) — энергию невалентного взаимодействия BN-цепей, третье слагаемое (10) энергию деформации G-цепи, а последнее слагаемое (11) — энергию невалентного взаимодействия G-цепи с BN-цепями.

3. ТОРМОЖЕНИЕ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ

Рассмотрим систему, состоящую из K - 1 = 3 слоев ВN-цепей с $N_{bn} = 2400$ звеньями. Длина такой трехслойной подложки $L = (N_{bn} - 1)R_2 = 300.4$ нм. В качестве графеновой наночастицы, расположенной на этой подложке, возьмем линейную G-цепочку из $N_c = 20, 40, 80, 160, 320$ звеньев (длина соответствующей наноленты графена $L_c = 2.3, 4.8, 9.7, 19.5, 39.2$ нм). Также в качестве графеновой наночастицы будут рассмотрены циклические цепочки (углеродные нанотрубки) из $N_c = 20, 40, 80$ звеньев (см. рис. 2d, e, f). Промоделируем свободное движение наночастицы по такой многослойной подложке.

Сначала поместим наночастицу у левого края подложки, как показано на рис. 2. Далее найдем стационарное состояние системы «наночастица + трехслойная подложка». Для этого численно методом сопряженных градиентов решим задачу на минимум энергии:

$$E \to \min: \{\mathbf{u}_{n,k}\}_{n=1,k=1}^{N_k, K},$$
 (12)

где число цепей K = 4, число узлов $N_1 = N_2 = N_3 = N_{ab} = 2400$, $N_4 = N_c$. Типичный вид стационарных состояний показан на рис. 2. Как видно на рисунке, нанотрубка графена в результате взаимодействия с подложкой с увеличением ее радиуса (числа звеньев N_c) начинает приобретать сплющенную каплевидную форму.

Для получения термализованного состояния системы поместим ее в термостат Ланжевена. Для этого зафиксируем *x*-координаты краевых частиц BN-цепей (положим скорости $\{\dot{x}_{1,k} \equiv 0, \dot{x}_{N_{ab},k} \equiv 0\}_{k=1}^{K-1}$) и *x*-координату центральной частицы G-цепи ($\dot{x}_{N_c/2,K} \equiv 0$) и численно проинтегрируем систему уравнений Ланжевена

$$M_{2}\ddot{\mathbf{u}}_{n,k} = -\frac{1}{c}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,k}} - \Gamma M_{2}\dot{\mathbf{u}}_{n,k} + \Xi_{n,k}, \qquad (13)$$
$$k = 1, \dots, K - 1, \quad n = 1, \dots, N_{bn},$$

9 ЖЭТФ, вып. 6 (12)

$$M_{1}\ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} - \Gamma M_{1}\dot{\mathbf{u}}_{n,K} + \Xi_{n,K}, \qquad (14)$$
$$n = 1, \dots, N_{C}.$$

где $\Gamma = 1/t_r$ — коэффициент трения (время релаксации $t_r = 0.4$ пс), $\Xi_{n,k} = (\xi_{n,k,1}, \xi_{n,k,2})$ — двумерный вектор нормально распределенных случайных сил, нормализованных условиями

$$\langle \xi_{n,k_1,i}(t_1)\xi_{l,k_2,j}(t_2)\rangle = 2M\Gamma k_B T \delta_{nl}\delta_{k_1k_2}\delta_{ij}\delta(t_2-t_1)$$

(T — температура термостата, k_B — постоянная Больцмана, масса $M = M_2/c$ при k < K и $M = M_1$ при k = K).

Возьмем начальные условия для системы уравнений движения Ланжевена (13), (14) соответствующими основному стационарному состоянию системы

$$\{\mathbf{u}_{n,k}(0) = \mathbf{u}_{n,k}^0, \quad \dot{\mathbf{u}}_{n,k}(0) = \mathbf{0}\}_{n=1,k=1}^{N_k, K}$$

и численно проинтегрируем систему в течение времени $t_0 = 20t_r$. За это время система придет в полное равновесие с термостатом, и мы получим термализованное состояние системы

{
$$\mathbf{w}_{n,k} = \mathbf{u}_{n,k}(t_0), \quad \mathbf{v}_{n,k} = \dot{\mathbf{u}}_{n,k}(t_0)$$
} $_{n=1,k=1}^{N_k, K}$.

Для моделирования свободного движения наночастицы по термализованной многослойной подложке оставим фиксированными только x координаты краевых узлов ВN-цепей, уберем взаимодействие системы с термостатом, а всем атомам наночастицы сообщим дополнительную начальную скорость $v_0 >$ > 0, направленную вдоль оси x. Для этого численно проинтегрируем систему уравнений движения

$$M_2 \ddot{\mathbf{u}}_{n,k} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,k}},\tag{15}$$

$$k = 1, \dots, K - 1, \quad n = 1, \dots, N_{bn}$$

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}}, \qquad (16)$$
$$n = 1, \dots, N_n$$

с начальными условиями

$$\mathbf{u}_{n,k}(0) = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{u}_{n,k}(0) = \mathbf{v}_{n,k}, n = 1, \dots, N_{bn}, \quad k = 1, \dots, K - 1,$$
(17)

$$\mathbf{u}_{n,K}(0) = \mathbf{w}_{n,K}, \quad \dot{\mathbf{u}}_{n,K}(0) = \mathbf{v}_{n,K} + v_0 \mathbf{e}_x, \qquad (18)$$
$$n = 1, \dots, N_c.$$

где вектор $\mathbf{e}_x = (1, 0).$

Проследим за движением центра тяжести наночастицы $x_c = (x_{1,K} + x_{2,K} + \ldots + x_{N_c,K})/N_c$ вдоль

100 a ΗM x_{c} 50100 б ΗM $x_{c}, 1$ 50100 200 300 400 0 *t*. пс

Рис. 6. Зависимость центра тяжести графеновой наночастицы x_c от времени t при температуре подложки T = 300 К. Тонкие кривые показывают 9 траекторий движения для различных независимых начальных реализаций термализованного состояния системы. Сплошная толстая (черная) линия дает траекторию среднего значения центра тяжести \bar{x}_c , полученную по 256 независимым реализациям термализованного состояния. Рисунок a показывает динамику для линейной цепи (наноленты), рис. δ — для циклической цепи (нанотрубки) с $N_c = 20$ звеньями. Штриховые (красные) линии показывают зависимость (19) при значении коэффициента эффективного трения $\gamma = 8.3$ и $8.6 \ {\rm Hc}^{-1}$

подложки. Характер движения графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) показан на рис. 6. Как видно на рисунке, вид траектории $x_c(t)$ зависит от реализации начального термализованного состояния системы, но взаимодействие с подложкой всегда приводит к торможению направленного движения частицы (начальная скорость движения $v_0 = 500 \text{ м/с}$). Если траектории усреднить по всем независимым реализациям термализованного состояния системы (взять среднее значение $\bar{x}_c(t) =$ $= \langle x_c(t) \rangle$), то динамика наночастицы с хорошей точностью описывается как движение частицы в вязкой среде:

$$\bar{x}_c(t) = \bar{x}_c(0) + v_0 \left[1 - \exp(-\gamma t)\right] / \gamma,$$
 (19)



Рис. 7. Зависимость коэффициента трения γ от температуры T для линейной (наноленты) и циклической цепи (нанотрубки) из $N_c = 20$ звеньев (соответственно кривые 1 и 2)

с коэффициентом вязкого «трения» $\gamma > 0$ (обратная величина γ^{-1} соответствует времени, за которое начальная скорость наночастицы уменьшается в e раз). Так, при $N_c = 20$ и температуре T = 300 К коэффициент эффективного трения для движения по подложке наноленты и нанотрубки $\gamma = 8.3$ и 8.6 нс⁻¹, см. рис. 6.

Численное моделирование динамики наночастиц показало, что ее вязкое торможение (19) происходит при всех размерах наночастиц и температурах подложки $0 < T \le 600$ K, но значение коэффициента эффективного трения γ зависит от температуры, размера и типа наночастицы. Зависимость γ от температуры показана на рис. 7. Как видно на рисунке, коэффициент трения монотонно растет с увеличением температуры. При $T \leq 300 K$ уменьшение температуры приводит к практически линейному уменьшению эффективного трения γ до значений, близких к нулю. Это позволяет заключить, что причиной торможения наночастиц является их взаимодействие с тепловыми колебаниями. Главную роль в этом взаимодействии играют изгибные колебания цепей — если уменьшить их амплитуду, то значительно уменьшается и эффективное трение. Так, если увеличить в десять раз энергию деформации валентных углов ϵ_i , i = 1, 2, увеличивая изгибную жесткость цепей, то коэффициент трения для цепи из $N_c = 20$ звеньев при T = 300 K уменьшится от значения $\gamma=8.3$ до значения 3.5
 ${\rm hc}^{-1}$ для линейной и от значения $\gamma = 8.6$ до $3.2 \ {
m hc}^{-1}$ для циклической цепи.

Заметим, что полученный существенный рост трения с увеличением температуры парадоксальным образом отличается от стандартных сценариев трения, где трение всегда уменьшается с увеличением температуры [29]. Отличие связано с тем, что в рассматриваемой системе трение имеет волновую природу (обусловлено взаимодействием с тепловыми колебаниями). Увеличение силы трения слоев G/h-BN с увеличением температуры также получено в работе [30].

С увеличением размера наночастицы коэффициент эффективного трения уменьшается. Так, при T = 300 К для циклической G-цепи (для нанотрубки) при числе звеньев $N_c = 20$ коэффициент трения для ее движения по подложке $\gamma = 8.6$ нс⁻¹, при $N_c = 40$ коэффициент $\gamma = 4.6$ нс⁻¹, а при $N_c = 80$ уже $\gamma = 1.9$ нс⁻¹.

Торможение наночастицы происходит из-за ее взаимодействия с атомами многослойной подложки. Для того чтобы определить распределение сил торможения вдоль движущейся наноленты графена, найдем средние значения продольных сил $F_{x,n}$, действующих со стороны подложки на узлы G-цепи. Вектор силы

$$\mathbf{F}_n = (F_{x,n}, F_{z,n}) = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=1}^{N_{ab}} \frac{\partial W_2(r_{l,k;n,K})}{\partial \mathbf{u}_{n,K}},$$

расстояние $r_{l,k;n,K} = |\mathbf{u}_{n,K} - \mathbf{u}_{l,k}|.$

Для нахождения средних значений сил при численном интегрировании системы уравнений движения (15), (16) с начальными условиями (17), (18) найдем распределение вдоль G-цепи продольных сил взаимодействия с подложкой:

$$\bar{F}_{x,n}(v) = \left\langle \frac{1}{t_1} \int_{0}^{t_1} F_{x,n}(t) \, dt \right\rangle$$

при начальной скорости движения v = 500 м/с. Возьмем время усреднения $t_1 = 100$ пс (как видно на рис. 6, на начальном интервале времени $[0, t_1]$ наночастица всегда сохраняет направленное движение). Найдем также средние значения этих сил для неподвижной частицы $\bar{F}_{x,n}(0)$ (значения сил при начальной скорости движения v = 0). Тогда можно определить силы торможения, препятствующие направленному движению как

$$F_{n,b}(v) = \bar{F}_{x,n}(v) - \bar{F}_{x,n}(0)$$

Распределение сил торможения вдоль G-цепи (вдоль наноленты графена) показано на рис. 8. Как



Рис. 8. Распределение вдоль G-цепи сил торможения движения (сил трения) F_b при числе звеньев цепи $N_c = 40, 80, 160$ (кривые 1, 2, 3). Начальная скорость движения цепи v = 500 м/с, температура подложки T = 300 К

видно на рисунке, главное действие силы трения с подложкой оказывают на края наноленты — на краях силы торможения значительно выше сил торможения во внутренней части цепи. Моделирование показало, что силы торможения прямо пропорциональны значению начальной скорости наночастицы v. Все это позволяет говорить о наличии двух сил трения — краевого трения, действующего на концевые атомы и значительно более слабого внутреннего трения, действующего на все остальные атомы цепи.

Наличие краевого трения позволяет объяснить зависимость коэффициента трения γ от длины цепи. Зависимость γ от числа звеньев линейной цепи N_c представлена на рис. 9. Как видно на рисунке, с увеличением длины цепи коэффициент эффективного трения монотонно уменьшается при всех значениях температуры.

Предположим, что при движении цепи по подложке со скоростью v на каждый ее узел действует одинаковая сила трения $F_1 = -M_1\gamma_1 v$ (сила трения соприкасающихся поверхностей) и сила $F_2 =$ $= -M_1\gamma_2 v$, действующая только на краевые узлы (сила краевого трения), тогда общий коэффициент трения для цепи из N_c звеньев

$$\gamma(N_c) = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c. \tag{20}$$

Полученные из численного моделирования динамики значения коэффициента трения γ для цепей с числом звеньев $N_c = 20, 40, 80, 160, 320$ с хорошей точностью подтверждают зависимость (20) (см. рис. 9). При температуре T = 100 К коэффициент



Рис. 9. Зависимость коэффициента трения γ от числа звеньев линейной G-цепи N_c (от длины наноленты) при температуре T = 100, 300, 500 К (кривые 1, 2, 3). Точ-ки — значения, найденные численно, линии — зависимости $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c$ со значениями коэффициентов γ_1, γ_2 соответственно 0.14, 22.6; 0.54, 77.5; 0.71, 152 нс⁻¹

внутреннего трения $\gamma_1 = 0.14$, коэффициент краевого трения $\gamma_2 = 22.6 \text{ нc}^{-1}$, при T = 300 K коэффициенты $\gamma_1\,=\,0.54,\;\gamma_2\,=\,77.5~{\rm hc}^{-1},$ при $T\,=\,500~{\rm K}$ коэффициенты $\gamma_1 = 0.71, \gamma_2 = 152 \text{ нc}^{-1}$. Как следует из этих цифр, коэффициент краевого всегда значительно превышает коэффициент внутреннего трения ($\gamma_2 \gg \gamma_1$). Оба вида трения будут давать одинаковый вклад в торможение движения цепи при числе звеньев $\bar{N}_c = 2\gamma_2/\gamma_1$. При меньшем числе звеньев главный вклад в торможение будет давать краевое, а при большем — внутреннее трение. При T == 100 К это характерное число узлов $\bar{N}_c = 323$, при T = 300 K число \bar{N}_c = 287, при T = 500 K $\bar{N}_c=428.$ Таким образом, при размерах наночастиц L < 35 нм основной вклад в торможение ее движения по многослойной подложке будет давать краевое трение (трение краев наночастицы с подложкой), а при L > 35 нм — внутреннее трение (трение внутренней поверхности наночастицы с подложкой).

Отметим, что полученные оценки не зависят от числа краевых узлов, на которые действует краевое трение. Если краевое трение действует на N_e конечных узлов с каждого края, то формула (20) примет вид

$$\gamma(N_c) = \gamma_1 + 2N_e \gamma_2'/N_c, \qquad (21)$$

где $N_e \gamma'_2 = \gamma_2$.

4. ПОДВИЖНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ

Если частица движется в вязкой среде под действием внешней силы F_x , то ее динамика описывается уравнением движения

$$M\ddot{x}_c = -\gamma M\dot{x}_c + F_x, \qquad (22)$$

где $M = N_c M_1$ — масса частицы. Из уравнения (22) следует, что со временем частица всегда будет двигаться с установившейся постоянной скоростью $v_F = F_x / \gamma M$. Здесь подвижность частицы, отношение средней скорости ее движения к силе,

$$\mu = v_F / F_x = 1 / \gamma N_c M_1. \tag{23}$$

Найдем подвижность наночастицы μ из прямого моделирования ее движения по термализованной подложке под действием постоянной силы $F_x > 0$ на узел G-цепи с номером $n = N_c/2$. Здесь динамика узлов G-цепи будет задаваться системой уравнений движения

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} + F_x \delta_{n,N_c/2} \mathbf{e}_x,$$

$$n = 1, \dots, N_c.$$
(24)

Таким образом, для моделирования вынужденного движения наночастицы нужно численно проинтегрировать систему уравнений движения (15), (24) с начальными условиями (17), (18), где скорость начального движения $v_0 = F_x/\gamma N_c M_1$.

Численное моделирование движения показало, что под действием постоянной силы $F_x > 0$ наночастица всегда (при любом значении температуры T и числа звеньев N_c) выходит на режим движения вдоль подложки с постоянной скоростью $v_F > 0$ (см. рис. 10). Конечно, вид траектории движения центра тяжести наночастицы $x_c(t)$ зависит от выбора начального термализованного состояния системы $\{\mathbf{w}_{n,k}, \mathbf{v}_{n,k}\}_{n=1,k=1}^{N_j, K}$ — могут происходить небольшие флуктуации скорости движения частицы. Но если усреднить по всем независимым реализациям начального термализованного состояния, то движение центра тяжести будет происходить с постоянной скоростью

$$\bar{x}_c(t) = \langle x_c(t) \rangle = \bar{x}_c(0) + v_F t.$$
(25)

Таким образом, движение наночастицы под действием постоянной силы по многослойной подложке происходит с постоянным значением скорости, а при выходе частицы на край подложки происходит ее отражение от края (см. рис. 10).



Рис. 10. Зависимость центра тяжести графеновой наночастицы x_c из $N_c = 20$ звеньев от времени t при температуре подложки T = 300 К и внешней силе $F_x = 0.001$ эВ/Å. Тонкие кривые показывают 9 траекторий движения для различных независимых начальных реализаций термализованного состояния системы. Сплошная толстая (черная) линия дает траекторию среднего значения центра тяжести \bar{x}_c , полученную по 256 независимым реализациям термализованного состояния системы. Рисунок a показывает динамику для линейной цепи (наноленты), рис. δ — для циклической цепи (нанотрубки). Скорости установившегося движения частиц $v_F = 542$ и 530 м/с

ся движения частиц $v_F = 542$ и 550 м/с

Значение постоянной скорости движения наночастицы v_F практически линейно зависит от величины силы F_x . Поэтому мы всегда можем найти подвижность наночастицы $\mu = v_F/F_x$. Зависимость подвижности наночастицы от температуры подложки показана на рис. 11. Как видно на рисунке, подвижность монотонно убывает с ростом температуры, а значение подвижности хорошо приближается формулой (23).

Таким образом, полученные значения подвижности подтверждают, что движение наночастиц на многослойной термализованной подложке носит характер движения частицы в вязкой среде, вязкость которой сильно зависит от значения температуры. С увеличением температуры возрастает сопротивление среды движению наночастицы. Возникающее эффективное трение имеет волновую природу, его



Рис. 11. Зависимость подвижности μ линейной и циклической G-цепи (наноленты и нанотрубки) из $N_c = 20$ звеньев от температуры подложки T. Сплошные кривые 1 и 2 дают значения, полученные из прямого моделирования движения наночастицы под действием внешней силы, штриховые кривые 3 и 4 — значения, полученные из формулы (23). Кривые 1 и 3 дают зависимости для наноленты, 2 и 4 — для нанотрубки

значение обусловлено в первую очередь взаимодействием наночастицы с тепловыми поперечными колебаниями слоев подложки. Чем сильнее эти колебания (чем выше температура), тем сильнее это взаимодействие и тем сильнее происходит отток кинетической энергии наночастицы в подложку.

5. ВЛИЯНИЕ НА ТРЕНИЕ СИЛЫ ДАВЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ НА ПОДЛОЖКУ

Согласно эмпирическому закону Амонтона–Кулона сила трения скольжения одного тела по поверхности другого тела (опоры) пропорциональна силе давления тела на опору (чем больше давление, тем больше сила трения). Проверим этот закон для наночастиц, находящихся на многослойной плоской подложке, выполняющей роль опоры. Для этого рассмотрим движение линейной G-цепи (наноленты) в присутствии силы F_z , вертикально прижимающей ее к подложке. В этом случае динамика звеньев G-цепи будет описываться системой уравнений движения:

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} - F_z \mathbf{e}_z, \quad n = 1, \dots, N_c, \quad (26)$$

где вектор $\mathbf{e}_z = (0, 1)$. Таким образом, для моделирования движения наночастицы при наличии прижи-



Рис. 12. Распределение сил торможения движения (сил трения) F_b вдоль G-цепи из $N_c=80$ звеньев при силе давления $F_z=0$ (кривая 1) и $F_z=0.03$ эВ/Å. Начальная скорость движения цепи v=500 м/с, температура подложки T=300 К

мающей ее к подложке вертикальной силы нужно численно проинтегрировать систему уравнений движения (15), (26) с начальными условиями (17), (18).

Численное моделирование динамики показало, что добавление вертикальной силы, прижимающей G-цепь к подложке, приводит к возрастанию краевых и уменьшению внутренних сил торможения (см. рис. 12). Так, при начальной скорости движения v = 500 м/c, температуре T = 300 K для цепи из $N_c = 80$ звеньев в отсутствие давления (при силе $F_z = 0$) сила внутреннего торможения

$$F_{b,1} = \sum_{n=11}^{N_c - 10} F_{n,b} = 0.259 \cdot 10^{-3} \text{ sB/Å},$$

сила краевого торможения

$$F_{b,2} = \sum_{n=1}^{10} F_{n,b} + \sum_{n=N_c-9}^{N_c} F_{n,b} = 0.848 \cdot 10^{-3} \text{ sB/Å}.$$

При давлении $F_z = 0.03$ эВ/Å сила внутреннего торможения уменьшается $F_{b,1} = 0.249$ эВ/Å, а сила краевого торможения увеличивается $F_{b,2} =$ = 1.068 эВ/Å.

С увеличением силы давления F_z коэффициент эффективного трения наночастицы с подложкой γ монотонно увеличивается (см. рис. 13). Полученные зависимости коэффициента трения от числа звеньев цепи N_c (длины наноленты) при разных значениях силы давления с хорошей точностью аппроксимируются формулой (20). Поэтому при каждом значении



Рис. 13. Зависимость коэффициента трения γ от числа звеньев линейной G-цепи N_c (от дины наноленты) при силе давления $F_z = -0.01, 0, 0.01, 0.03, 0.05$ эB/Å (кривые 1, 2, 3, 4, 5). Точки — значения, найденные численно, линии — аппроксимирующие эти значения зависимости $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c$. Температура подложки T = 300 K



Рис. 14. Зависимость коэффициентов краевого γ_2 и внутреннего γ_1 трения (рис. a, δ) от силы давления на наноленту F_z при температуре подложки T = 300 К

силы F_z мы можем определить значение коэффициентов внутреннего γ_1 и краевого γ_2 трения. Зависимости этих коэффициентов от силы давления представлены на рис. 14. Как видно на рисунке, величина коэффициента краевого трения (трения краев наночастицы с подложкой) γ_2 линейно растет, а величина коэффициента внутреннего трения (трения внутренней поверхности наночастицы с подложкой) γ_1 монотонно уменьшается с увеличением силы давления $F_z.$

Полученные зависимости $\gamma_1(F_z)$, $\gamma_2(F_z)$ позволяют заключить, что при размерах наночастицы, при которых главную роль в торможении ее движения по подложке играет краевое трение, закон Амонтона – Кулона выполняется, а при размерах, при которых главную роль играет внутреннее трение, — не выполняется (здесь увеличение нагрузки будет уже приводить к уменьшению общего трения). Таким образом, для нанолент графена на многослойной подложке h-BN эмпирический закон Амонтана-Кулона будет выполняться при длинах L < 250 нм и перестанет выполняться при L > 250 нм.

Заметим, что понижение трения между листами графена и h-BN при увеличении давления, т.е. прямое нарушение закона Амонтана-Кулона, было обнаружено в работе [30] при моделировании протаскивания листа графена по листу нитрида бора (при увеличении давления сила трения может уменьшится на 30 %). При протаскивании бесконечных листов краевое трение отсутствует, поэтому этот результат согласуется с понижением коэффициента внутреннего трения γ_1 при повышении внешней нагрузки. Здесь имеет место эффект «отрицательного коэффициента трения (OKT)» — уменьшение трения при увеличении нормальной нагрузки [36, 37]. Это парадоксальное поведение связано с тем, что нормальная нагрузка приводит к уменьшению амплитуды изгибных тепловых колебаний слоев (в силу этого уменьшается коэффициент внутреннего трения γ_1). Но нормальная нагрузка на конечный лист графена приводит к вдавливанию краев листа в подложку. Из-за этого краевое сопротивление (коэффициент краевого трения γ_2) увеличивается пропорционально увеличению нагрузки. Поэтому эффект ОКТ будет наблюдаться только для листов достаточно больших размеров, когда трение краев листа будет оказывать более слабое влияние, чем трение с подложкой внутренней поверхности листа.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование свободного движения графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) показало, что их движение на плоской многослойной подложке h-BN можно описать как движение частицы в вязкой среде с постоянным коэффициентом трения (коэффициентом релаксации скорости) γ . Торможение движения происходит из-за перекачки кинетической энергии наночаститцы в подложку. Величина коэффициента эффективного трения наночастицы с подложкой монотонно увеличивается с увеличением температуры T. При $T\leq 300{\rm K}$ уменьшение температуры приводит к линейному уменьшению γ до очень низких значений. Такое поведение объясняется волновой природой эффективного трения — причиной торможения движения наночастиц является их взаимодействие с тепловыми (в первую очередь изгибными) колебаниями листов подложки.

С увеличением размера наночастицы коэффициент эффективного трения монотонно уменьшается при всех значениях температуры. Анализ распределения вдоль движущейся наноленты сил торможения показывает, что трение разделяется на два типа: на внутреннее и краевое (на трение внутренней поверхности наноленты и ее краев с поверхностью подложки). Такое разделение сил трения объясняет зависимость значения коэффициента от длины наноленты. Коэффициент краевого трения γ_2 всегда значительно превышает коэффициент внутреннего трения γ_1 . Общий коэффициент $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2 a/L$, где *а* — продольный шаг наноленты, *L* — ее длина. При длинах L < 35 нм главную роль в торможении движения наноленты играет краевое, а при L > 35 нм внутреннее трение.

Моделирование подвижности наночастиц показало, что под действием постоянной продольной силы их динамика всегда выходит на режим движения с постоянной скоростью, значение которой прямо пропорционально значению силы и обратно пропорционально значению коэффициента трения γ . Это подтверждает, что динамика графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) на многослойной термализованной подложке выглядит как движения частицы в вязкой среде, вязкость которой увеличивается с ростом температуры. Возникающее эффективное трение имеет волновую природу, его значение обусловлено в первую очередь взаимодействием наночастицы с тепловыми поперечными колебаниями слоев подложки. Чем сильнее эти колебания (чем выше температура), тем сильнее это взаимодействие и тем сильнее происходит торможение движения частицы.

Моделирование движения наноленты при наличии нормальной (прижимающей к подложке) нагрузки показало, что рост нагрузки приводит к уменьшению внутреннего трения из-за уменьшения под нанолентой амплитуды тепловых изгибных колебаний слоев подложки и к увеличению краевого трения из-за вдавливания краев наноленты в подложку. Поэтому замеченный ранее в работах [30, 36, 37] эффект «отрицательного коэффициента трения» (уменьшение трения при увеличении нормальной нагрузки) может наблюдаться только для нанолент достаточно большого размера (L > 250 нм), когда главную роль играет внутреннее трение.

Финансирование. Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной Федеральным исследовательским центром химической физики Российской академии наук на выполнение государственного задания (тема 0082-2019-0005). Вычислительные ресурсы предоставлены межведомственным суперкомпьютерным центром Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

- K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**(5696), 666 (2004).
- A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- E. Koren, I. Leven, E. Lörtscher, A. Knoll, O. Hod, and U. Duerig, Nature Nanotech. 11, 752 (2016).
- J. C. Meyer, A. K. Geim, M. Katsnelson, K. Novoselov, T. Booth, and S. Roth, Nature 446, 60 (2007).
- C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, Science 321, 385 (2008).
- A. Falin, Q. Cai, E. J. G. Santos, D. Scullion, D. Qian, R. Zhang, Z. Yang, S. Huang, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. R. Barnett, Y. Chen, R. S. Ruoff, and L. H. Li, Nat. Commun. 8, 15815 (2017).
- E. Han, J. Yu, E. Annevelink, J. Son, D. A. Kang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Ertekin, P. Y. Huang, and A. M. van der Zande, Nature Materials 19, 305 (2020).
- P. E. Sheehan and C. M. Lieber, Science 272, 1158 (1996).
- M. Dienwiebel, G. S. Verhoeven, N. Pradeep, J. W. Frenken, J. A. Heimberg, and H. W. Zandbergen, Phys. Rev. Lett. 92, 126101 (2004).
- C. Lee, Q. Li, W. Kalb, X.-Z. Liu, H. Berger, R. W. Carpick, and J. Hone, Science **328**, 76 (2010).
- S. Cahangirov, C. Ataca, M. Topsakal, H. Sahin, and S. Ciraci, Phys. Rev. Lett. 108, 126103 (2012).
- Z. Liu, J. Yang, F. Grey, J. Z. Liu, Y. Liu, Y. Wang, Y. Yang, Y. Cheng, and Q. Zheng, Phys. Rev. Lett. 108, 205503 (2012).

- J. Yang, Z. Liu, F. Grey, Z. Xu, X. Li, Y. Liu, M. Urbakh, Y. Cheng, and Q. Zheng, Phys. Rev. Lett. 110, 255504 (2013).
- 14. E. Koren, E. Lörtscher, C. Rawlings, A. W. Knoll, and U. Duerig, Science 348, 679 (2015).
- I. Leven, D. Krepel, O. Shemesh, and O. Hod, J. Phys. Chem. Lett. 4, 115 (2013).
- 16. A. Geim and I. Grigorieva, Nature 499, 419 (2013).
- K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. Castro Neto, Science **353**(6298), 461 (2016).
- C. R. Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R. S. Ma, J. C. Lu, H. M. Guo, X. Lin, G. L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Y. N. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H. J. Gao, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, Nature Phys. 10, 451 (2014).
- G. J. Slotman, M. M. van Wijk, P. L. Zhao, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, and S. Yuan, Phys. Rev. Lett. 115, 186801 (2015).
- 20. D. Mandelli, I. Leven, O. Hod, and M. Urbakh, Sci. Rep. 7(1), 10851 (2017).
- J. A. Williams and H. R. Le, J. Phys. D: Appl. Phys. 39, R201 (2006).
- 22. K. Shinjo and M. Hirano, Surface Science 283, 473 (1993).
- 23. O. Hod, E. Meyer, Q. Zheng, and M. Urbakh, Nature (London) 563, 485 (2018).
- 24. J. M. Martin and A. Erdemir, Phys. Today 71, No. 4, 40 (2018).

- 25. M. Z. Baykara, M. R. Vazirisereshk, and A. Martini, Appl. Phys. Rev. 5, 041102 (2018).
- 26. D. Berman, A. Erdemir, and A. V. Sumant, ACS Nano 12, 2122 (2018).
- 27. Y. Song, D. Mandelli, O. Hod, M. Urbakh, M. Ma, and Q. Zheng, Nat. Mater. 17, 894 (2018).
- W. Ouyang, D. Mandelli, M. Urbakh, and O. Hod, Nano Lett. 18(9), 6009 (2018).
- A. Vanossi, N. Manini, M. Urbakh, S. Zapperi, and E. Tosatti, Rev. Mod. Phys. 85, 529 (2013).
- 30. D. Mandelli, W. Ouyang, O. Hod, and M. Urbakh, Phys. Rev. Lett. 122, 076102 (2019).
- 31. A. V. Savin, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, Phys. Rev. B 92, 035412 (2015).
- 32. А. В. Савин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев, ФТТ 57(11), 2278 (2015).
- 33. A. V. Savin, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, Phys. Rev. B 99, 235411 (2019).
- 34. J. H. Los, J. M. H. Kroes, K. Albe, R. M. Gordillo, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. B 96, 184108 (2017).
- 35. A. K. Rappé, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III, and W. M. Skiff, J. Amer. Chem, Soc. 114, 10024 (1992).
- 36. S.-W. Liu, H.-P. Wang, Q. Xu, T.-B. Ma, G. Yu, C. Zhang, D. Geng, Z. Yu, S. Zhang, W. Wang, Y.-Z. Hu, H. Wang, and J. Luo, Nat. Commun. 8, 14029 (2017).
- 37. Y. Liu, A. Song, Z. Xu, R. Zong, J. Zhang, W. Yang, R. Wang, Y. Hu, J. Luo, and T. Ma, ACS Nano 12, 7638 (2018).

НЕКЛАССИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В РЕЗКО КОНТРАСТНОЙ СРЕДЕ В ПРИСУТСТВИИ ОДИНОЧНОЙ КРУПНОМАСШТАБНОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ

П. С. Кондратенко^{*}, К. В. Леонов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук 115191, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 11 июля 2021 г., после переработки 11 июля 2021 г. Принята к публикации 12 июля 2021 г.

Проанализированы неклассические режимы переноса примеси в статистически однородной резко контрастной среде в присутствии одиночной крупномасштабной неоднородности в форме адвективного канала. В основной среде на пути от источника примеси к каналу реализуются различные режимы переноса (классические и неклассические), включая быструю и медленную адвекцию-диффузию, квазидиффузию и субдиффузию. Распределение концентрации в канале состоит из экспоненциально малого многоступенчатого предвестника и основного концентрационного сигнала, форма и длительность которого зависят от соотношения между характеристиками основной среды.

DOI: 10.31857/S0044451021120117

1. ВВЕДЕНИЕ

Уже давно неклассические процессы переноса примеси являются предметом интенсивных исследований (см. [1–9]). Одним из характерных признаков, которые их выделяют, является зависимость основной области локализации примеси от времени,

$$R(t) \propto t^{\gamma},\tag{1}$$

в которой, в отличие от классической диффузии, $\gamma \neq 1/2$. Физическими предпосылками для неклассических процессов могут быть дальнодействующие корреляции или долговременные релаксации характеристик среды, формирующих механизмы переноса. В первом случае возникает тенденция к супердиффузии, когда в соотношении (1) имеет место $\gamma > 1/2$, а во втором — к субдиффузии, когда $\gamma < 1/2$. Примером, относящимся ко второй категории сред, является резко контрастная двупористая среда, неравновесная модель переноса в которой была разработана в [10, 11].

Большинство исследований неклассических процессов переноса касаются сред, которые в среднем являются однородными. Между тем большой практический интерес представляет перенос в средах, содержащих резкие крупномасштабные неоднородности. Настоящая работа посвящена исследованию переноса примеси в резко контрастной двупористой среде в присутствии одиночной крупномасштабной неоднородности в форме адвективного канала. Задача актуальна для проведения оценок надежности захоронений радиоактивных отходов в геологических средах.

Дальнейшая структура статьи следующая. В разд. 2 сформулирована постановка задачи. Раздел 3 посвящен анализу режимов переноса в резко контрастной двупористой среде при наличии удаленного адвективного канала. В заключительном разделе кратко подведены итоги.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Начнем раздел с краткой формулировки модели резко контрастной двупористой среды. Среда в модели [10,11] представлена в виде совокупности двух подсистем: быстрой — набора проницаемых каналов, пронизывающих всю среду, и медленной — набора изолированных слабопроницаемых пористых блоков. И каналы, и блоки пропитаны влагой. Средняя ширина канала намного меньше, чем средний

^{*} E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

размер блока, $a \ll b$. Механизм переноса примеси — это адвекция и диффузия в каналах и диффузия внутри пористых блоков. На стенках каналов и порах в блоках происходит сорбция примеси. Прямой перенос между блоками отсутствует. Примесь, сконцентрированную в каналах, будем называть активной. Длина корреляции в распределении транспортных характеристик среды имеет порядок размера блока b. Уравнение переноса для концентрации активной примеси, усредненное по объему с характерным размером порядка корреляционной длины, и начальное условие имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} [c(\mathbf{r}, t) + \int_{0}^{t} dt' \varphi(t - t') c(\mathbf{r}, t')] + \mathbf{u} \nabla c(\mathbf{r}, t) - D \triangle c(\mathbf{r}, t) = 0,$$

$$c(\mathbf{r}, 0) = N \delta(\mathbf{r}).$$
(2)

Здесь и — средняя скорость адвекции, D — коэффициент диффузии, учитывающий вклад дисперсии $(\sim ub)$, возникающей из-за извилистости каналов, и молекулярную диффузию. Второй член в квадратных скобках в левой части уравнения (2) отвечает за обмен примесью между каналами и блоками. Концентрация $n(\mathbf{r}, t)$ обозначает количество частиц примеси в единице объема и имеет размерность обратного объема, N — полное число частиц примеси. Начало координат выбрано совпадающим с положением источника примеси, размер которого предполагается много меньше других линейных масштабов задачи, и потому он считается точечным; $\delta(\mathbf{r})$ — трехмерная функция Дирака. Скорость адвекции удовлетворяет условию несжимаемости: div $\mathbf{u} = 0$. Интегральное ядро зависит от распределения блоков по размеру и форме, поэтому при его поиске в общем виде возникают трудности. В пределе малых и больших значений аргумента оно может быть определено и согласно [10, 11] дается выражениями

$$\varphi(t) \cong \begin{cases} (\pi t t_a)^{-1/2}, & t \ll t_b, \\ \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} \delta(t-\varepsilon), \varepsilon \to +0, & t \gg t_b, \end{cases}$$
(3)

где d — коэффициент диффузии в блоках, $t_a \sim a^2/4d$ — характерное время, за которое примесь проникла в блоки на расстояние порядка размера канала $a; t_b \sim b^2/4d$ — характерное время, за которое примесь из каналов почти заполнила весь объем блоков и находится в обменном равновесном состоянии, $t_a \ll t_b$.

Адвективный канал расположен на значительном расстоянии от источника. По форме он представляет собой прямой цилиндр, вдоль оси которого течет жидкость (вода) с постоянной скоростью U, удовлетворяющей условию

$$U \gg u. \tag{4}$$

Обозначим зависящую от координаты x, направленной вдоль оси канала, и времени одномерную (проинтегрированную по поперечному сечению канала) концентрацию C(x,t) — отнесенное к единице длины вдоль оси x количество примеси в канале. Благодаря неравенству (4) перенос в канале оказывается значительно быстрее в сравнении с переносом в основной (двупористой) среде. Отсюда вытекают три следствия. Первое — это то, что характерный размер основной области локализации примеси в основной среде значительно меньше продольного размера концентрационного сигнала в канале. Второе — источник примеси для канала на его границе с основной средой можно считать точечным, и третье — задачу о переносе примеси в основной среде, как и в адвективном канале, можно считать одномерной с координатой ξ, направленной вдоль скорости и с нулевым граничным условием для концентрации в точке пересечения координаты ξ с каналом:

$$n(\xi, t)|_{\xi=h} = 0.$$
 (5)

Здесь

$$n(\xi, t) = \int d^2 r_{\perp} c(\mathbf{r}, t), \qquad (6)$$

 \mathbf{r}_{\perp} — двумерная координата в плоскости, перпендикулярной скорости \mathbf{u} , h — расстояние по координате ξ от источника примеси в основной среде до пересечения с адвективным каналом.

Таким образом, концентрация примеси в канале удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = q(t)\delta(x), \tag{7}$$

где

$$q(t) = \left(u - D\frac{d}{d\xi}\right) n(\xi, t)|_{\xi=h}$$
(8)

 полный поток частиц примеси из основной среды в адвективный канал.

Решение уравнения (7) имеет вид

$$C(x,t) = \frac{1}{U}q(\tilde{t})\theta(x), \quad \tilde{t} = t - \frac{x}{U}, \tag{9}$$

где $\theta(x) - \phi$ ункция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Геометрия задачи, сведенной нами к одномерной версии, схематически изображена на рисунке.



Геометрия задачи. S — источник примеси, **u** — средняя скорость адвекции в основной среде

3. РЕЖИМЫ ПЕРЕНОСА И КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ В АДВЕКТИВНОМ КАНАЛЕ

Одномерная версия уравнения (2) с начальным условием

$$n(\xi, t)|_{t=0} = N\delta(\xi) \tag{10}$$

в условно бесконечной среде в представлении Фурье – Лапласа

$$n_{pk} = \int_{0}^{\infty} dt e^{-pt} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-ik\xi} n(\xi, t)$$

имеет вид

$$(\Lambda(p) + iuk + Dk^2)n_{pk} = N.$$
(11)

Здесь $\Lambda(p) = p(1+\varphi_p), \varphi_p$ — образ Лапласа функции $\varphi(t)$ из (2). С учетом соотношений (3) имеем следующие предельные выражения для функции $\Lambda(p)$:

$$\Lambda(p) \cong \begin{cases} p, & p \gg t_a^{-1}, \\ \sqrt{\frac{p}{t_a}}, & t_b^{-1} \ll p \ll t_a^{-1}, \\ \sqrt{\frac{t_a}{t_b}}p, & p \ll t_b^{-1}. \end{cases}$$
(12)

Разрешая алгебраическое уравнение (11) относительно n_{pk} ,

$$n_{pk} = \frac{N}{\Lambda(p) + iuk + Dk^2}$$

и выполняя с помощью теории вычетов обратное преобразование Фурье

$$n_p(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik\xi} n_{pk}, \qquad (13)$$

ЖЭТФ, том **160**, вып. 6 (12), 2021

находим решение одномерной версии уравнения (2) в представлении Лапласа, справедливое в области $\xi \leq h$ и удовлетворяющее граничному условию (5):

$$n_p(\xi) = \frac{N}{2D\Pi(p)} e^{u\xi/2D} [e^{-|\xi|\Pi(p)} - e^{(\xi-2h)\Pi(p)}].$$
 (14)

Здесь

$$\Pi(p) = \sqrt{\frac{t_u^{-1} + \Lambda(p)}{D}}, \quad t_u = \frac{4D}{u^2}.$$
 (15)

Характерное время t_u определено таким образом, что на текущих временах $t \gg t_u$ перенос примеси в основной среде будет происходить главным образом за счет адвекции, а при $t \ll t_u$ — диффузии. Подставляя (14) в соотношение (8), находим выражение для потока частиц примеси из основной среды в адвективный канал в представлении Лапласа:

$$q_p = N \exp\left[h\left(\frac{u}{2D} - \Pi(p)\right)\right].$$
 (16)

Приступая к анализу распределения концентрации в адвективном канале, сделаем предположение, что расстояние от источника до канала удовлетворяет неравенству

$$h \gg u \sqrt{t_a t_b}.$$
 (17)

Это условие, с одной стороны, дает возможность проявиться всем режимам переноса, свойственным основной среде, а с другой — представляется практически наиболее реальным.

Дальнейшие вычисления потока частиц примеси в канал

$$q(t) = N \int_{m-i\infty}^{m+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp\left[h\left(\frac{u}{2D} - \Pi(p)\right) + pt\right],$$
(18)

 $\operatorname{Re} m > 0,$

зависят от соотношения между характерными временами t_a , t_b и t_u . Приведем результаты для каждого из возможных случаев отдельно, воспользовавшись методом стационарной фазы. Стационарная точка p_0 определяется из уравнения

$$-h \left. \frac{\partial \Pi}{\partial p} \right|_{p=p_0} + t = 0.$$
 (19)

После каждой формулы будем указывать режим переноса в основной среде, относящийся к соответствующему интервалу времени.

1. $t_u \ll t_a \ll t_b$.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi D t^3}} \exp\left(-\frac{(h-ut)^2}{4Dt}\right), \qquad (20)$$
$$t \ll \frac{h}{u}.$$

В этом интервале времен справедливо неравенство $p_0 \gg t_a^{-1}$, которое ведет к режиму быстрой адвекции–диффузии.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi D_u t^3}} \exp\left(-\frac{h^2}{4D_u t}\right),$$

$$\frac{h}{u} \ll t \ll \frac{h}{u} \sqrt{\frac{t_b}{t_a}},$$
(21)

где $D_u = u^2 t_a$. Здесь $t_b^{-1} \ll p_0 \ll t_a^{-1}$ и реализуется режим квазидиффузии.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi \tilde{D}t^3}} \exp\left(-\frac{(h - \tilde{u}t)^2}{4\tilde{D}t}\right),$$

$$t \gg \frac{h}{u}\sqrt{\frac{t_b}{t_a}},$$
(22)

где

$$\tilde{u} = u \sqrt{\frac{t_a}{t_b}}, \quad \tilde{D} = D \sqrt{\frac{t_a}{t_b}}, \quad \frac{t_a}{t_b} \ll 1.$$

В этом случае реализуется режим медленной адвекции–диффузии, который в отличие от (20) имеет перенормированные скорость адвекции и коэффициент диффузии.

2. $t_a \ll t_u \ll t_b$.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi D t^3}} \exp\left(-\frac{h^2}{4Dt}\right), \quad t \ll \frac{h}{u} \sqrt{\frac{t_a}{t_u}}.$$
 (23)

Здесь выполняется неравенство $p_0 \gg t_a^{-1} \gg t_u^{-1}$, которое ведет к режиму быстрой диффузии.

$$q(t) \simeq \frac{N}{t\sqrt{6\pi\eta(t)}} \exp\left(-\frac{3}{4}\eta(t)\right),$$

$$\frac{h}{u}\sqrt{\frac{t_a}{t_u}} \ll t \ll \frac{h}{u}\left(\frac{t_u}{t_a}\right)^{1/4},$$
(24)

где

$$\eta(t) = \left(\frac{h^4}{4D^2t_at}\right)^{1/3}.$$

Реализуется режим субдиффузии.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi D_u t^3}} \exp\left(-\frac{h^2}{4D_u t}\right),$$

$$\frac{h}{u} \left(\frac{t_u}{t_a}\right)^{1/4} \ll t \ll \frac{h}{u} \sqrt{\frac{t_b}{t_a}}.$$
(25)

Этот случай соответствует квазидиффузии.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi \tilde{D}t^3}} \exp\left(-\frac{(h - \tilde{u}t)^2}{4\tilde{D}t}\right),$$

$$t \gg \frac{h}{u}\sqrt{\frac{t_b}{t_a}}.$$
(26)

Аналогично (22), реализуется медленная адвекция-диффузия.

3. $t_a \ll t_b \ll t_u$.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi D t^3}} \exp\left(-\frac{h^2}{4Dt}\right), \quad t \ll \frac{h}{u} \sqrt{\frac{t_a}{t_u}}.$$
 (27)

Аналогично (23) — быстрая диффузия.

$$q(t) \cong \frac{N}{t\sqrt{6\pi\eta(t)}} \exp\left(-\frac{3}{4}\eta(t)\right),$$

$$\frac{h}{u}\sqrt{\frac{t_a}{t_u}} \ll t \ll \frac{h}{u}\left(\frac{t_b^3}{t_a t_u^2}\right)^{1/4}.$$
(28)

Аналогично (24) — субдиффузия.

$$q(t) \cong N \frac{h}{2\sqrt{\pi \tilde{D}t^3}} \exp\left(-\frac{(h-\tilde{u}t)^2}{4\tilde{D}t}\right),$$

$$t \gg \frac{h}{u} \left(\frac{t_b^3}{t_a t_u^2}\right)^{1/4}.$$
(29)

Аналогично (22) — медленная адвекция-диффузия.

Отметим, что согласно (15), (16) величина потока q(t) удовлетворяет естественному соотношению

$$\int_{0}^{\infty} dt \, q(t) = N,\tag{30}$$

представляющему собой закон сохранения числа частиц примеси.

Формулы для распределения концентрации в адвективном канале получаются подстановкой q(t) из (20)–(29) в выражение (9). Особенностью этого распределения при условии (17) является то, что на временах $t < h/\tilde{u}$ в канал приходит экспоненциально малый многоступенчатый предвестник и лишь при $t \sim t_N = h/\tilde{u}$ туда доходит основной концентрационный сигнал, определяемый режимом переноса медленной адвекции–диффузии. Длительность и пространственная протяженность основной части концентрационного сигнала в канале согласно выражениям (9), (22), (29) составляют, соответственно, величины порядка

$$\Delta t \sim \frac{1}{\tilde{u}} \sqrt{\tilde{D}t_N}, \quad \Delta x \sim U \Delta t.$$

Что касается ступеней предвестника, то в соответствии с (9) они определяются модификацией формул (20)–(29) и подчиняются известному [9] правилу: чем более удаленная ступень, тем более ранний режим переноса ее определяет.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты работы состоят в следующем.

Проанализированы свойства переноса примеси в резко контрастной среде в присутствии одиночной крупномасштабной неоднородности в форме удаленного адвективного канала. С учетом сильного превосходства скорости течения в канале по сравнению со скоростью просачивания жидкости в основной (резко контрастной двупористой) среде, $U \gg u$, задача в этой среде сведена к одномерной. Также одномерной оказалась и задача в адвективном канале, поскольку была сформулирована относительно концентрации как количества частиц примеси, отнесенного к единице длины вдоль канала. Передвигающееся со скоростью U распределение концентрации в канале состоит из экспоненциально малого многоступенчатого предвестника и основного концентрационного сигнала на поздних временах. Основной сигнал определяется самым поздним режимом медленной адвекции-диффузии. Между пространственной протяженностью и временной длительностью основного сигнала в канале имеет место соотношение

 $\triangle x \sim U \triangle t.$

Совокупность и последовательность режимов переноса в основной среде зависят от соотношения между тремя характерными временами задачи t_a , t_b и t_u . Выделены три случая: $t_u \ll t_a \ll t_b$, $t_a \ll t_u \ll t_b$, $t_a \ll t_b \ll t_u$. В первом случае реализуется последовательность трех режимов: быст-

рая адвекция–диффузия, квазидиффузия и медленная адвекция–диффузия. При $t_a \ll t_u \ll t_b$ последовательность режимов следующая: быстрая диффузия, субдиффузия, квазидиффузия и медленная адвекция–диффузия. В случае $t_a \ll t_b \ll t_u$ реализуются режимы: быстрая диффузия, субдиффузия и медленная адвекция–диффузия.

Таким образом, распределение концентрации на расстояниях, много больших размеров основной области локализации примеси, описывается многоступенчатыми экспоненциально убывающими асимптотиками. С увеличением расстояния характер убывания в асимптотиках диктуется все более ранними по времени режимами.

ЛИТЕРАТУРА

- Ю. А. Дрейзин, А. М. Дыхне, ЖЭТФ 63, 242 (1973).
- 2. H. Sher and M. Lax, Phys Rev. B 7, 4491 (1973).
- 3. S. P. Neuman, Water Resources Res. 26, 1749 (1990).
- J. P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. 195, 127 (1990).
- 5. M. Sahimi, Phys. Rep. 306, 213 (1998).
- Л. М. Зеленый, А. В. Милованов, УФН 174, 809 (2004).
- L. Bolshov, P. Kondratenko, K. Pruess, and V. Semenov, Vadose Zone J. 7, 1135 (2008).
- 8. О. Г. Бакунин, УФН 185, 271 (2015).
- 9. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН 189, 691 (2019).
- 10. Л. В. Матвеев, ЖЭТФ 142, 943 (2012).
- 11. L. V. Matveev, Physica A 406, 119 (2014).

МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ ВБЛИЗИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Е. А. Фадеев^{а*}, М. А. Шахов^b, Е. Лахдеранта^{а**}, А. Н. Талденков^c,

А. Л. Васильев ^{с,d}, А. В. Ситников ^е, В. В. Рыльков ^{с,f}, А. Б. Грановский ^{f,g}

^а Технологический университет Лаппеенранты 53850, Лаппеенранта, Финляндия

^b Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе 194021, Санкт-Петербург, Россия

^с Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» 123098, Москва, Россия

> ^d Московский физико-технический институт (МФТИ) 141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^е Воронежский государственный технический университет 394006, Воронеж, Россия

^f Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук 125412, Москва, Россия

⁹ Физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 15 июля 2021 г., после переработки 15 июля 2021 г. Принята к публикации 23 августа 2021 г.

Представлены результаты экспериментального исследования высокополевого магнитосопротивления (MC) нанокомпозитов $Co-SiO_2$, $Co-LiNbO_3$, $CoNbTa-SiO_2$ с концентрациями металлической фазы, близкими к порогу перколяции. Исследуемые нанокомпозиты выращены методом ионно-лучевого распыления на подложке ситалла при температуре, не превыщающей 80 °C. Намагниченность измерена с помощью сверхпроводящего квантового интерферометра в диапазоне 4.2-300 К. Поперечное MC измерено в диапазоне 4.2-300 К в импульсных магнитных полях до 20 Tл с длительностью импульса 11-12 мс. В сильных магнитных полях для нанокомпозитов с составами в непосредственной близости к порогу перколяции дополнительно к отрицательному MC обнаружено линейное положительное MC. Данный эффект объяснен влиянием эффекта Зеемана на высоту туннельного барьера. Показано, что необычная анизотропия MC нанокомпозита $Co-LiNbO_3$ связана с особенностями его структуры.

DOI: 10.31857/S0044451021120129

1. ВВЕДЕНИЕ

Обнаружение линейного положительного магнитосопротивления (ЛПМС) в сильных полях в целом ряде ферромагнитных металлов, соединений, композитов и манганитов (см. работы [1,2] и ссылки в них) вызвало значительный интерес, так как это явление не находило объяснения в рамках известных механизмов магнитосопротивления (МС) в магнитных материалах [1,2], которое, как правило, отрицательно и анизотропно в полях меньше поля насыщения. Обнаруженный эффект ЛПМС изотропен, не показывает признаков насыщения в полях до 60 Тл и выше, а значит, его можно использо-

^{*} E-mail: egor.fadeev@lut.fi

^{**} E. Lähderanta

вать для создания магнитных сенсоров сильных и сверхсильных полей. В химически однородных объемных магнетиках и тонких парамагнитных пленках эффект ЛПМС не был обнаружен [1], он присущ только неоднородным магнитным материалам, будь то напыленные поликристаллические тонкие пленки ферромагнитных металлов (Ni, Fe, Co) или магнитные нанокомпозиты [1,2]. Как правило, величина ЛПМС не превышает 0.001–0.01 % · Тл⁻¹, однако в плохо проводящих пленках Ni с добавлением SiO₂ может достигать 0.1 % · Тл⁻¹ [1].

Имеет ли ЛПМС универсальный характер, т.е. является ли следствием одного и того же механизма, проявляющегося в сильнонеупорядоченных магнетиках, остается неясным. В работе [1] ЛПМС связывается с влиянием эффекта Зеемана на квантовые добавки к сопротивлению, обусловленные электрон-электронным взаимодействием. Однако, как отмечают сами авторы, этот механизм не позволяет объяснить величину эффекта, и, кроме того, ЛПМС имеет место и в системах без каких-либо указаний на вклад квантовых добавок к сопротивлению. В работе [2] предложен другой механизм, который связывает ЛПМС с влиянием эффекта Зеемана на высоту туннельного барьера для спин-поляризованного туннелирования. Этот механизм достаточно универсален, так как туннелирование имеет место в островковых и поликристаллических пленках, в нанокомпозитах с составом вблизи порога перколяции, в двойниковых структурах и т.д. В работе [2] для этого механизма в рамках модели Инуе-Маекавы туннельного МС гранулированных сплавов [3] получено простое выражение для ЛПМС, которое позволило на качественном уровне объяснить полученные экспериментальные данные ЛПМС нанокомпозитов $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}$ и $(Co_{84}Nb_{14}Ta_2)_x(Al_2O_3)_{100-x}$ [2]. Однако модель Инуе-Маекавы справедлива для нанокомпозитов ниже перехода металл-диэлектрик (ПМД), у которых температурная зависимость сопротивления описывается активационным законом $\ln \rho \propto T^{-1/2}$ $(\ll T^{1/2})$, тогда как для изученных нанокомпозитов $\rho \propto \ln T (\ln T) [2]$. Как правило, закон $\ln T$ справедлив для составов выше ПМД ($x = x_c$), но ниже порога перколяции $(x = x_p)$ и соответствует режиму проводимости «грязного металла» при сильной туннельной связи между гранулами. Кроме того, эксперименты работы [2] были выполнены только при T > 65 K.

В настоящей работе продолжен поиск и изучение ЛПМС в нанокомпозитах, для чего изготовлены новые составы, в которых варьировался материал как магнитных гранул, так и диэлектрических матриц. В импульсных магнитных полях MC измерялось вплоть до температуры 4.2 К. Развитая в работе [2] теория модифицирована для случая составов на металлической стороне от ПМД с логарифмическим законом температурной зависимости сопротивления.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Пленки нанокомпозитов Co-SiO₂, Co-LiNbO₃, CoNbTa-SiO₂ толщиной 1.7 мкм были получены ионно-лучевым распылением составных мишеней на ситалловые подложки при температуре 80 °C. Детали изготовления, определение элементного состава и структурная аттестация не отличаются от подробно описанных в работах [3, 4]. Концентрация металлических гранул изменялась в широких пределах от металлической вплоть до концентраций, соответствующих ПМД. Намагниченность измерялась с помощью СКВИД-магнитометра («Quantum Design MPMS-XL7»). Температурные зависимости удельного сопротивления были измерены стандартным четырехзондовым методом в температурном диапазоне 50-300 К. МС измерялось в импульсных магнитных полях до 20 Тл с симметричным («полусинусоидальным») импульсом длительностью 11-12 мс. Для исключения паразитного сигнала, вызванного изменением магнитного поля (dB/dt), использовались специальные аппаратные и программные средства (см. детали в работе [5]).

Для исследования структурных особенностей были приготовлены поперечные сечения полученных структур с помощью фокусированного ионного пучка Ga⁺ в электронно-ионном микроскопе «Helios NanoLabTM 600i» (Thermo Fisher Scientific, CШA). Изображения высокого разрешения были получены с помощью просвечивающего/растрового электронного микроскопа «Tecnai Osiris» (Thermo Fisher Scientific, США) при ускоряющем напряжении 200 кэВ, снабженного энергодисперсионным рентгеновским спектрометром «Super-X» (Bruker, США) и высокоугловым кольцевым темнопольным детектором (Fischione, США).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Петли гистерезиса изученных образцов представлены на рис. 1. Смыкание петель гистерезиса происходит в магнитных полях $H \approx 2$ –3 кЭ, но при низких температурах, и в сильных полях




Рис. 1. (В цвете онлайн) Магнитные петли гистерезиса изученных образцов при разных температурах и ориентациях. На вставке те же кривые представлены в измененном масштабе

рост намагниченности продолжается за счет наличия суперпарамагнитных гранул и диспергированных в диэлектрической матрице магнитных ионов [3,6]. В магнитных полях меньше поля насыщения $(H_{sat} \approx 2-4 \text{ k}\Im)$ МС отрицательно и резко возрастает синхронно с полем, однако и при $H > H_{sat}$ оно продолжает возрастать, что типично для туннельного МС при наличии суперпарамагнитных гранул (рис. 2–4). ЛПМС было обнаружено только при низких температурах (рис. 2–4).



Рис. 2. (В цвете онлайн) Поперечное МС образца $(Co)_x(SiO_2)_{100-x}$ при x = 65 ат. %



Рис. 3. (В цвете онлайн) Поперечное МС образца $(CoNbTa)_x(SiO_2)_{100-x}$ при x = 58.5 ат. %

При T = 4.2 К ЛПМС образцов Co–SiO₂ и CoNbTa–SiO₂ составило соответственно 0.03 и 0.06 % · Tл⁻¹, что по порядку величины согласуется с результатами работ [1,2]. В пленках Co–LiNbO₃ при T = 50 К величина ЛПМС меньше примерно на порядок. Нам не удалось измерить MC образца Co–LiNbO₃ при T < 50 К в силу резкого возрастания сопротивления при понижении температуры. Для обсуждения и анализа полученных данных мы модифицировали теорию, разработанную в работе [2], и учли различия в структуре, магнитных свойствах и проводимости изученных нанокомпозитов.

Как уже отмечалось во Введении, для составов наногранулированых пленок вблизи ПМД ($x \approx x_c$)



Рис. 4. (В цвете онлайн) Поперечное МС образца $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$ при x = 49 ат. %

возможны два режима проводимости. Первый режим $(x \le x_c)$ имеет место, когда средний туннельный кондактанс между соседними гранулами (G_t) меньше кванта проводимости $(G_q = 2e^2/h)$, т.е. $g = G_t/G_q < 1$, и тогда проводимость туннельного типа описывается законом « $T^{1/2}$ »:

$$\ln \sigma \propto \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2}.$$
 (1)

Второй режим $(x_c \le x \le x_p)$ характерен для нанокомпозитов с $g = G_t/G_q \gg 1$, с сильной туннельной связью между гранулами и при несколько большей концентрации металла, чем в первом режиме. Второй режим описывается логарифмическим законом «ln T» [5,7]:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(1 - \frac{1}{2\pi Dg} \ln \frac{gE_C}{k_B T} \right), \qquad (2)$$

где σ_0 — проводимость нанокомпозита при достаточно высокой температуре, когда эффектами кулоновского взаимодействия можно пренебречь, D размерность системы. Энергия кулоновской блокады представлена в виде

$$E_C = \frac{e^2 s}{\epsilon_d a^2 \left(1/2 + s/a\right)},$$
 (3)

где a — диаметр гранул, s — ширина туннельного зазора, ϵ_d — диэлектрическая проницаемость матрицы [8].

Для первого режима в работе [2] в рамках модели Инуе–Маекавы получено выражение для ЛПМС, основанное на влиянии эффекта Зеемана на величину туннельного барьера, которое при низких температурах принимает вид

$$\frac{\Delta\rho(H)}{\rho(0)} = \frac{\rho(H) - \rho(H=0)}{\rho(H=0)} =$$
$$= \xi \frac{\mu_B H}{U - E_F(0)} \sqrt{\frac{\lambda C}{k_B T}}, \quad (4)$$

где $C = sE_C$, k_B — постоянная Больцмана, а энергия Ферми зависит от приложенного магнитного поля:

$$E_F(H) = E_F(0) - \xi \mu_B H. \tag{5}$$

Здесь ξ — параметр, характеризующий смещение уровня Ферми, по порядку величины равный спиновой поляризации P, а μ_B — магнетон Бора. Параметр

$$\lambda = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U - E_F(0))},$$

$$\lambda(H) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U - E_F(0) + \xi \mu_B H)}$$
(6)

характеризует затухание волновой функции туннелирующего электрона в барьере высотой $U-E_F(0)$.

Для второго режима кондактанс принимает вид

$$g(H) \propto (1 + P^2 m^2) e^{-2\lambda(H)s},$$
 (7)

где m — относительная намагниченность, которая в насыщении равна 1 [9]. Уровень Ферми смещается под влиянием эффекта Зеемана (5). Используя соотношения (2), (5)–(7), мы получаем выражение для ЛПМС при $H > H_{sat}$:

$$\frac{\Delta\rho(H)}{\rho(H)} = \xi \frac{\mu_B H}{U - E_F(0)} \frac{\lambda s}{2\pi Dg} \left[\ln\left(\frac{gE_C}{k_B T}\right) - 1 \right]. \quad (8)$$

Оба выражения, (4) и (8), дают примерно одну и ту же величину, но различающиеся температурные зависимости ЛПМС. Для $a \approx 3$ нм, $s \approx 1$ нм, D = 3 и $\epsilon_d \approx 3.75$ (для SiO₂) имеем $E_C \approx 51.5$ мэВ, и тогда при $U-E_F = 1.0$ эВ и g = 1.0 получаем, что при T = 4.2 К ЛПМС $\Delta \rho(H)/\rho(0) \approx 0.01 \% \cdot \text{Тл}^{-1}$. Стоит подчеркнуть, что при втором режиме это максимальная величина ЛПМС при $U-E_F = 1.0$ эВ и g = 1.0, так как мы положили $\xi = 1$, что подразумевает 100-процентную спиновую поляризацию. При $U-E_F = 0.1$ эВ и при тех же остальных параметрах ЛПМС увеличивается примерно в 3.3 раза, тогда как при $U-E_F = 0.1$ эВ и g = 10 получаем $\Delta \rho(H)/\rho(0) \approx 0.1\% \cdot \text{Тл}^{-1}$.

Представленные в работе [2] значения ЛПМС при T = 65 K для нанокомпозитов CoFeB–SiO₂



Рис. 5. Температурные зависимости удельного сопротивления нанокомпозита $Co_x(SiO_2)_{100-x}$. Данные описываются законом $\ln \rho \propto T^{-1/2}$ в левой колонке и законом $\rho \propto \ln T$ в правой. Черные сплошные линии — линейная аппроксимация

и CoNbTa–Al₂O₃ характеризуются логарифмическим законом температурной зависимости сопротивления «ln T» и лежат в диапазоне $\Delta \rho(H)/\rho(0) \approx$ $\approx 10^{-4}-10^{-3} \% \cdot T\pi^{-1}$. Эти значения также соответствуют расчетам, полученным с помощью выражения (8). Отметим, что никаких признаков наличия квантовых поправок для нанокомпозитов в работе [2] не было обнаружено, что исключает предложенный в работе [1] механизм ЛПМС.

3.1. $(Co)_x(SiO_2)_{100-x}$

ЛПМС было обнаружено только при x == 65 ат. %, его значение составило $0.03 \% \cdot T\pi^{-1}$ (см. рис. 2). Температурные зависимости удельного сопротивления изученных нанокомпозитов представлены на рис. 5–7. Для $(Co)_x(SiO_2)_{100-x}$ при x = 65ат. %, закон «ln T» описывает данные лучше, чем закон « $T^{1/2}$ » (рис. 5). Нетрудно увидеть из наклона кривых $1/2\pi Dq$ на рис. 5, что для этого состава $q \approx 1$ при D = 3, однако, как отмечалось в работе [3], для рассматриваемой модели величина 2D равна числу ближайших гранул (Z), между которыми возможно туннелирование, т.е. для неупорядоченного случая D < 3. Поэтому g > 1для состава с x = 65 ат. %, и можно использовать выражение (8), которое корректно описывает полученные результаты.

Данные, приведенные выше на рис. 2, свидетельствуют о том, что отрицательное MC больше при 300 К, чем при низких температурах. Для объяснения этой аномалии надо учесть, что вблизи ПМД возможно образование контактирующих гранул и агрегатов, для которых существенно не только туннельное МС, но и отрицательное МС за счет подавления магнитного беспорядка в гранулах. Последний вклад может быть сравним по величине с туннельным МС и растет с повышением температуры из-за роста спиновых флуктуаций. Данные электронной микроскопии нанокомпозитов подтверждают наличие таких агрегатов. Более того, в этом композите содержание металла больше, чем в других нанокомпозитах вблизи порога перколяции, что косвенно подтверждает наличие агрегатов. Также в полях, меньших поля насыщения при низких температурах, возможен и положительный вклад в МС за счет эффекта магнитной блокады [9], который уменьшает отрицательное МС при низких температурах.

3.2. $(CoNbTa)_x(SiO_2)_{100-x}$

Для нанокомпозита $(\text{CoNbTa})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ при x = 58.5 ат. % содержание металла меньше, чем в предыдущем образце, и проводимость хорошо описывается законом «ln T» (рис. 6). Изменение концентрации диспергированных в диэлектрической матрице ионов и материала ферромагнитных гранул могло изменить величину туннельного барьера и спиновую поляризацию, что и привело к увеличе-



Рис. 6. То же, что на рис. 5, но для $(CoNbTa)_x(SiO_2)_{100-x}$



Рис. 7. То же, что на рис. 5, но для $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$

нию ЛПМС до $\Delta \rho(H)/\rho(0) \approx 0.06 \% \cdot \text{Tr}^{-1}$. Эта величина является наибольшей из всех для исследованных нанокомпозитов.

Следует отметить, что ЛПМС, согласно предложенному механизму, чрезвычайно чувствительно к концентрации диспергированных магнитных и немагнитных ионов в туннельных зазорах, так как, с одной стороны, они могут уменьшать высоту туннельного барьера, но, с другой стороны, изменяя диэлектрическую проницаемость матрицы, понижать энергию кулоновской блокады, а также приводить к отсутствию насыщения намагниченности и МС в сильных полях. По-видимому, это и является причиной того, что ЛПМС в $(Co)_x(SiO_2)_{100-x}$ и $(CoNbTa)_x(SiO_2)_{100-x}$ имеет место только при T =

= 4.2 К и не наблюдается уже при T = 10 К, хотя выражения (3) и (8) не предсказывают такой сильной температурной зависимости. Действительно, изучаемые нанокомпозиты изготовлены при повышенной температуре подложки (80 °C), что отличает их микроструктуру, а следовательно, и магнитные свойства от исследованных ранее в работе [2]. Например, намагниченность нанокомпозита (Co)_x(SiO₂)_{100-x} насыщается при T = 2 К в поле $H \approx 4$ кЭ, но при бо́льших значениях поля намагниченность продолжает расти (см. рис. 1), что указывает на возрастание отрицательного туннельного вклада в МС. На фоне этого увеличения положительный вклад в МС становится неразличим. Таким образом, основной причиной, из-за которой ЛПМС неразличимо при T > 4.2 K, является сильный конкурирующий отрицательный наклон кривых МС в сильных полях за счет наличия суперпарамагнитных гранул и диспергированных ионов.

3.3. $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$

Проводимость нанокомпозита Co-LiNbO₃ не подчиняется ни логарифмическому закону, ни закону « $T^{1/2}$ » (рис. 7), тем не менее на рис. 4 видны признаки положительного МС в сильных полях. ЛПМС при 50 K составляет порядка $10^{-3} \% \cdot T\pi^{-1}$, что сравнимо со значениями ЛПМС в нанокомпозитах CoFeB-SiO₂ и CoNbTa-Al₂O₃, но ЛПМС нанокомпозита Co-LiNbO₃, в отличие от ранее исследованных образцов, анизотропно. Продольное МС (магнитное поле ориентировано вдоль плоскости пленки) больше по величине, когда магнитное поле ориентировано перпендикулярно направлению тока. Кроме того, когда магнитное поле перпендикулярно направлению тока, продольное МС отличается от поперечного (рис. 8). Оба факта не наблюдались в рассмотренных выше нанокомпозитах и в работе [1]. Будет логично связать эти факты с особенностями микроструктуры нанокомпозита Co–LiNbO₃, рассмотренными ниже.

Результаты исследования нанокомпозита Со-LiNbO3 методами ПЭМ/ПРЭМ (просвечивающий электронный микроскоп/просвечивающий растровый электронный микроскоп) представлены на рис. 9. Вблизи границы раздела $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$ с подложкой ситалла формируется нанокомпозит с колоннообразной структурой. Структура состоит из гранул кобальта, вытянутых преимущественно в направлении роста нанокомпозита с латеральным размером в плоскости пленки до 5-8 мкм (рис. 9*в*). Вертикальный рост гранул продолжается примерно до 20 нм, после чего колоннообразные гранулы начинают загибаться (рис. 9). Выше слоя нанокомпозита с колоннообразной структурой (толщиной около 100 нм) формируется аморфно-кристаллический нанокомпозит, состоящий из округлых наночастиц размерами 5-30 нм, разделенных аморфной прослойкой. Как показали исследования методом ПЭМ высокого разрешения вместе с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром (спектры не представлены здесь), кристаллические частицы состоят в основном из Со, а прослойка из аморфного LiNbO₃. Необходимо отметить высокую дефектность частиц Со, содержащих дефекты упаковки и двойники, что типично для наночастиц Со. Надо сказать, что подобная колоннообразная



MC Рис. 8. (В цвете онлайн) нанокомпозита $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$ при x = 49.4 ат. % и разных ориентациях магнитного поля относительно плоскости образца и направления тока: кривые 1 и 1' — магнитное поле параллельно как плоскости образца, так и направлению тока; 2 и 2' — поле параллельно плоскости образца и перпендикулярно току; 3 и 3' — поле перпендикулярно как плоскости образца, так и току. Кривые без штриха

для T = 300 K, со штрихом — для T = 50 K



Рис. 9. Светлопольное ПРЭМ-изображение поперечного среза пленки $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$ (x = 49 ат. %) на подложке ситалла (слева). Справа вверху (А) представлено темнопольное ПЭМ-изображение, полученное в режиме конусного освещения с диафрагмой, установленной в области диффузного фона, поэтому аморфная прослойка между кристаллическими частицами Со выглядит светлой. Справа внизу (В) — светлопольное ПРЭМ-изображение области границы раздела. Отчетливо видны удлиненные зер-

на, формирующиеся от границы раздела

структура в нанокомпозитах не является исключением и наблюдалась нами и ранее в случае нанокомпозита (CoFeB)_x(LiNbO₃)_{100-x} с гранулами СоFe, вытянутыми в направлении роста нанокомпозита до 10-15 нм и с латеральным размером 2-4 нм [10, 11]. Однако стоит отметить, что пленки нанокомпозита (CoFeB)_x(LiNbO₃)_{100-x} однородны по толщине и подчиняются логарифмическому закону температурной зависимости сопротивления [10, 11]. Анизотропия роста, по-видимому, связана с образованием дополнительной равновесной фазы кобальтита лития LiCoO₂ и, как следствие, с проявлением необычных эффектов нуклеации. Изображения высокого разрешения с последующим анализом с помощью быстрого преобразования Фурье показали, что гранулы Со в нижней части пленки не соответствуют кубическому Со.

Наличие плотноупакованных гранул в нижней части пленки $(Co)_x(LiNbO_3)_{100-x}$ и крупных частиц в верхней ее части определяет ферромагнетизм структуры и анизотропию МС. Как видно на рис. 9, межгранульные зазоры в верхней части пленки довольно большие (примерно 5 нм), так что заведомо не выполняется сильная туннельная связь между гранулами. В этих условиях в проводимости будет доминировать прыжковый перенос по локализованным дефектам аморфной матрицы, определяемый обычно законом Мотта «T^{1/4}». Для нижней части нанокомпозита с вытянутыми гранулами существенным оказывается так называемое косое туннелирование с последующим транспортом электронов вдоль цепочек вытянутых гранул [7]. Проводимость этой относительно небольшой прослойки может быть сравнима или даже выше проводимости изотропной части нанокомпозита. Поэтому суммарная проводимость структуры не описывается ни законом « $T^{1/2}$ », ни логарифмическим законом. Наличие большой диэлектрической проницаемости аморфного LiNbO₃ ($\epsilon_d \approx 50$ [12]) уменьшает энергию кулоновской блокады и, как следствие, уменьшает возможную величину ЛПМС при туннелировании между гранулами в нижнем слое, в том числе за счет шунтирующего действия верхнего слоя. Таким образом, наблюдаемые особенности поведения МС в данном нанокомпозите в значительной степени определяются особенностями его структуры.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наряду с отрицательным МС, связанным со спин-зависящим туннелированием, в наноком-

позитах вблизи порога перколяции при низких температурах и в полях выше поля насыщения наблюдается линейное положительное МС. В нанокомпозитах $(Co)_x(SiO_2)_{100-x}$ (x = 65 ат. %) и $(CoNbTa)_x(SiO_2)_{100-x}$ (x = 58.5 ат. %) с сильной туннельной связью между гранулами, приводящей к логарифмической зависимости сопротивления от температуры, ЛПМС при T = 4.2 K составило соответственно $0.03\% \cdot T\pi^{-1}$ и $0.06\% \cdot T\pi^{-1}$. Развитая теория ЛПМС для таких нанокомпозитов, основанная на влиянии эффекта Зеемана на высоту туннельного барьера при спин-зависящем туннелировании, позволяет на качественном уровне объяснить экспериментальные данные. МС нанокомпозита (Co)_x(LiNbO₃)_{100-x} (x = 49 ат. %) анизотропно, а ЛПМС при T = 50 К составило порядка $10^{-3}\% \cdot T\pi^{-1}$, что связано с образованием колоннообразной структуры на начальной стадии роста этих пленок.

Финансирование. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-07-00471) и Академии Финляндии (гранты № 333805, 318405).

ЛИТЕРАТУРА

- A. Gerber, I. Kishon, I.Y. Korenblit, O. Riss, A. Segal, M. Karpovski, and B. Raquet, Phys. Rev. Lett. 99, 027201 (2007).
- M. Blinov, M. Shakhov, V. Rylkov, E. Lähderanta, V. Prudnikov, S. Nikolaev, A. Sitnikov, and A. Granovsky, J. Magn. Magn. Mater. 469, 155 (2019).
- V. V. Rylkov, S. N. Nikolaev, K. Yu. Chernoglazov, V. A. Demin, A. V. Sitnikov, M. Yu. Presnyakov, A. L. Vasiliev, N. S. Perov, A. S. Vedeneev, Yu. E. Kalinin, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, Phys. Rev. B 95, 144202 (2017).
- 4. V. V. Rylkov, V. A. Demin, A. V. Emelyanov, A. V. Sitnikov, Yu. E. Kalinin, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, in *Novel Magnetic Nanostructures*, Elsevier (2018), pp. 427–464.
- E. Lähderanta, M. Guc, M. Shakhov, E. Arushanov, and K. Lisunov, J. Appl. Phys. **120**, 035704 (2016).
- В. В. Рыльков, А. В. Емельянов, С. Н. Николаев, К. Э. Никируй, А. В. Ситников, Е. А. Фадеев, В. А. Демин, А. Б. Грановский, ЖЭТФ 158, 164 (2020) [JETP 131, 160 (2020)].

- I. Beloborodov, A. Lopatin, V. Vinokur, and K. Efetov, Rev. Mod. Phys. **79**, 469 (2007).
- B. Abeles, P. Sheng, M. Coutts, and Y. Arie, Adv. Phys. 24, 407 (1975).
- J. Inoue and S. Maekawa, Phys. Rev. B 53, R11927 (1996).
- V. Rylkov, A. Sitnikov, S. Nikolaev, V. Demin, A. Taldenkov, M. Y. Presnyakov, A. Emelyanov, A. Vasiliev, Y. E. Kalinin, A. Bugaev et al., J. Magn. Magn. Mater. 459, 197 (2018).
- В. В. Рыльков, С. Н. Николаев, В. А. Демин, А. В. Емельянов, А. В. Ситников, К. Э. Никируй, В. А. Леванов, М. Ю. Пресняков, А. Н. Талденков, А. Л. Васильев, К. Ю. Черноглазов, А. С. Веденеев, Ю. Е. Калинин, А. Б. Грановский, В. В. Тугушев, А. С. Бугаев, ЖЭТФ 153, 424 (2018) [JETP 126, 353 (2018)].
- 12. T. Mitsuyu and K. Wasa, Jpn. J. Appl. Phys. 20, L48 (1981).

ПУЗЫРИ С ПРИСОЕДИНЕННЫМИ КВАНТОВЫМИ ВИХРЯМИ В ЗАХВАЧЕННЫХ БИНАРНЫХ БОЗЕ-КОНДЕНСАТАХ

В. П. Рубан*

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> Поступила в редакцию 4 августа 2021 г., после переработки 4 августа 2021 г. Принята к публикации 4 августа 2021 г.

Специфические топологические возбуждения энергетически устойчивых конфигураций типа «ядро»-«мантия» для двухкомпонентных несмешивающихся бозе-конденсатов, захваченных ловушкой, исследуются численно в рамках связанных уравнений Гросса – Питаевского. В численном моделировании впервые наблюдаются нестационарные долгоживущие когерентные структуры, которые состоят из нескольких квантованных вихревых нитей, пронизывающих мантию снаружи вовнутрь и обратно, и при этом демонстрируют весьма нетривиальную динамику. Концы вихревых нитей способны надолго оставаться присоединенными к границе раздела между мантией и ядром, если последнее достаточно велико, а поверхностное натяжение не мало. Форма таких «пузырей» подвержена сильному влиянию вихрей и иногда далека от сферической.

DOI: 10.31857/S0044451021120130

1. ВВЕДЕНИЕ

Многокомпонентные смеси ультрахолодных бозе-конденсированных атомных газов активно изучаются вот уже на протяжении четверти века [1-5]. Такие системы состоят либо из разных химических элементов, либо из разных изотопов одного и того же элемента, либо из одного изотопа в различных внутренних (сверхтонких) квантовых состояниях. Взаимодействия между различными видами атомов приводят к богатому разнообразию уникальных эффектов, которые не существуют для однокомпонентного бозе-конденсата. Что очень важно, параметры нелинейных взаимодействий для волн материи, будучи пропорциональными длинам рассеяния, могут во многих случаях произвольно настраиваться путем привлечения резонансов Фешбаха [6-10]. В частности, при достаточно сильном перекрестном отталкивании между двумя компонентами происходит разделение фаз [11, 12]. Оно лежит в основе многих весьма интересных конфигураций и явлений, таких как доменные стенки и поверхностное натяжение между сегрегированными конденсатами [4,13], нетривиальная геометрия основного со-

Квантовые вихри давно признаны объектами первостепенного интереса и важности среди остальных когерентных структур. Уже для однокомпонентных конденсатов было получено множество выразительных результатов о вихревых конфигурациях и их динамике (см., например, [44–55] и ссылки там). Что касается вихрей в многокомпонентных конденсатах, данная научная область даже еще более велика и содержит обширные неизведанные территории. Многие интересные находки все еще возможны там для исследователя. В данной работе как раз представлен новый вид довольно изящных долгоживущих структур, составленных из пузырей и вихрей и демонстрирующих нетривиальную дина-

стояния бинарных несмешивающихся конденсатов в ловушках [14–16] (включая оптические решетки [17–19]), динамика пузырей [20], квантовые аналоги классических гидродинамических неустойчивостей (Кельвина – Гельмгольца [21, 22], Рэлея – Тейлора [23–25], Плато – Рэлея [26], параметрическая неустойчивость капиллярных волн на границе раздела [27, 28]), сложные текстуры во вращающихся бинарных конденсатах [29–31], вихри с заполненными сердцевинами [3, 32–37], трехмерные топологические структуры [38–42], капиллярная плавучесть плотных капель в захваченных несмешивающихся бозе-конденсатах [43] и т. д.

^{*} E-mail: ruban@itp.ac.ru

мику. Чтобы объяснить, что они собой представляют в общих чертах, следует вспомнить, что в двухкомпонентных несмешивающихся конденсатах возможны доменные стенки с присоединенными к ним квантовыми вихрями [41]. По сути, это сильно деформированные вихревые листы особой формы. Авторы работы [41] исследовали подобные комплексы в случае равных коэффициентов самоотталкивания. Численные решения были там получены для бинарных конденсатов в продолговатых ловушках, где равновесная граница раздела между компонентами представляла собой диск с краем на поверхности Томаса – Ферми. Квантовые вихри присутствовали в обеих компонентах и были направлены примерно вдоль оси ловушки.

Здесь будет показано, что существенно новое и интересное свойство возникает в случае, когда имеется неравенство (асимметрия) между коэффициентами. В приблизительно сферической гармонической ловушке это приводит к образованию устойчивой и компактной фоновой равновесной конфигураци типа «ядро»-«мантия». Присутствие устойчиво захваченного безвихревого ядра в центре, в сочетании с поверхностным натяжением межлу компонентами, стремится стабилизировать возможные вихревые нити, присоединенные к подобному пузырю снаружи и пронизывающие мантию (см. ниже рис. 1 в качестве примера). Конечно же, число (выходящих) вихрей всегда равно числу (входящих) антивихрей. Плотность внешней компоненты при этом настолько пренебрежимо мала внутри ядра, что практически не имеет значения, какой из вихрей является продолжением данного антивихря. Лишь суммарный баланс обычно существенен. Каждый вихрь или антивихрь типично сохраняет свою индивидуальность и направлен приблизительно вдоль локального радиуса. Благодаря взаимодействиям вихри находятся в поперечном движении, простом или сложном. Но иногда два присоединенных вихря (один входящий и один выходящий) могут динамически спариться, затем оторваться от пузыря и, наконец, образовать отдельную вихревую нить. Однако при таком сценарии вихревая пара должна преодолеть «потенциальный барьер», обусловленный поверхностным натяжением. Для относительно больших пузырей и малого числа вихрей такие процессы случаются весьма редко. Поэтому структуры данного типа способны существовать на протяжении тысяч временных единиц ловушки, как показывают наши численные эксперименты. Мы также увидим далее, что динамика становится все более сложной при увеличении числа присоединенных вихрей.

Насколько известно автору, такие трехмерные комплексы в захваченных несмешивающихся бозе-конденсатах до сих пор не обсуждались в литературе. Однако известны их отдаленные аналоги, такие как квантовые вихри в коре нейтронных звезд (см., например, обзор [56]), или топологические структуры ${}^{3}\text{He}{-}^{4}\text{He}$, предложенные в работе [57] (капелька ⁴He, погруженная в жидкость ³He). Цель данной работы — ввести в рассмотрение пузыри с присоединенными квантовыми вихрями теоретически в контексте ультрахолодных газов и проиллюстрировать на нескольких представительных численных примерах их основные свойства. Научная значимость этих новых структур обусловлена их теоретическим существованием (и, хочется надеяться, экспериментальной реализуемостью) в широких и реалистических диапазонах параметров, а также их достаточно нетривиальной динамикой.

2. МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Основная математическая модель в нашем исследовании — хорошо известные и широко применяемые связанные уравнения Гросса-Питаевского для двух комплексных волновых функций, $A(\mathbf{r}, t)$ (первая компонента — мантия) и $B(\mathbf{r},t)$ (вторая компонента — ядро). Эта консервативная модель применима в пределе нулевой температуры для достаточно разреженных бозе-газов. Для простоты здесь рассматриваются равные массы $m_1 = m_2 = m$ атомов обоих видов (либо близкие по массе изотопы, как, например, ⁸⁵Rb и ⁸⁷Rb, и тогда небольшой разницей в массах можно пренебречь [8]). Пусть осесимметричная ловушка с гармоническим потенциалом характеризуется поперечной частотой ω_{\perp} и анизотропией $\lambda = \omega_{\parallel}/\omega_{\perp}$. С использованием характерных для ловушки единиц времени $\tau = 1/\omega_{\perp}$, длины $l_{tr} =$ $= \sqrt{\hbar/\omega_{\perp}m}$ и энергии $\varepsilon = \hbar\omega_{\perp}$ уравнения движения записываются в безразмерном виде:

$$i\dot{A} = -\frac{1}{2}\nabla^2 A + \left[V(x, y, z) + g_{11}|A|^2 + g_{12}|B|^2\right]A, \quad (1)$$

$$i\dot{B} = -\frac{1}{2}\nabla^2 B + \left[V(x, y, z) + g_{21}|A|^2 + g_{22}|B|^2\right]B, \quad (2)$$

где $V = (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2)/2$ — потенциал ловушки, а $g_{\alpha\beta}$ — симметричная 2 × 2-матрица нелинейных взаимодействий. Физически взаимодействия определяются длинами рассеяния $a_{\alpha\beta}$ [2]:

$$g_{\alpha\beta}^{phys} = 2\pi\hbar^2 a_{\alpha\beta} (m_{\alpha}^{-1} + m_{\beta}^{-1}).$$
(3)

Нас интересует случай всех положительных $g_{\alpha\beta}$. Без потери общности первый коэффициент самооттал-

кивания может быть нормирован на единицу, $g_{11} = 1$, поскольку в данной работе величины $g_{\alpha\beta}$ рассматриваются как постоянные во времени параметры. При таком выборе сохраняющиеся числа захваченных атомов даются формулами

$$N_1 = \frac{l_{tr}}{4\pi a_{11}} \int |A|^2 d\mathbf{r} = \frac{l_{tr}}{a_{11}} n_1, \qquad (4)$$

$$N_2 = \frac{l_{tr}}{4\pi a_{11}} \int |B|^2 d\mathbf{r} = \frac{l_{tr}}{a_{11}} n_2.$$
 (5)

В реальных экспериментах отношение l_{tr}/a_{11} находится в диапазоне примерно от нескольких сотен до нескольких тысяч.

Хорошо известно, что система (1), (2) в режиме разделения фаз подобна потенциальным течениям в классической гидродинамике двух несмешивающихся сжимаемых жидкостей, за исключением окрестности доменных стенок и сердцевин вихрей, где «квантовые давления» вступают в игру. Гидродинамические давления первой и второй «жидкостей» волн материи есть соответственно $g_{11}|A|^4/2$ и $g_{22}|B|^4/2$, причем по обе стороны от границы раздела они приблизительно равны (разница, вызванная поверхностным натяжением и медленными течениями, относительно невелика). При равных давлениях более плотной оказывается та компонента, у которой коэффициент самоотталкивания меньше. Поэтому, чтобы обеспечить относительно более плотное устойчивое ядро, необходимо выполнение неравенства $q_{22} < q_{11} = 1$.

Равновесные состояния, как известно, характеризуются двумя химическими потенциалами, μ_1 и μ_2 . В рассматриваемых нами условиях $\mu_1 \gg 1$ и $\mu_2 \gg 1$, так что фоновые профили плотности даются приближением Томаса – Ферми:

$$|A_0|^2 \approx [\mu_1 - V(x, y, z)] \equiv \mu_1 \rho_{1eq}(\mathbf{r}), \tag{6}$$

$$|B_0|^2 \approx [\mu_2 - V(x, y, z)]/g_{22} \equiv \mu_1 \rho_{2eq}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где мы ввели нормированные плотности $\rho_1 = |A|^2/\mu_1$ и $\rho_2 = |B|^2/\mu_1$. Первая формула верна внутри мантии, а вторая — внутри ядра. Эффективный поперечный размер конденсата, таким образом, есть $R_{\perp} = \sqrt{2\mu_1}$, тогда как для характерной толщины вихревых линий в мантии справедлива оценка $\xi \sim 1/\sqrt{\mu_1}$.

Предполагается выполненным условие

$$g = (g_{12}^2 - g_{11}g_{22}) > 0$$

разделения фаз [11, 12]. Важно, что имеются узкий переходный слой между сегрегированными конденсатами (его пирина примерно пропорциональна величине $1/\sqrt{g}$; он также виден на рис. 1) и связанное с

этим слоем поверхностное натяжение, грубо пропорциональное величине \sqrt{g} [11,13]. Проведенные здесь численные эксперименты были ориентированы на экспериментально реализуемые смеси ⁸⁵Rb–⁸⁷Rb [8], где $a_{12}/a_{22} \approx 2$, тогда как величина a_{11} может задаваться достаточно произвольно с помощью резонанса Фешбаха. Поэтому во всех наших прогонах (runs) $g_{12} = 2g_{22}$. С другой стороны, оптимальное значение отношения g_{22}/g_{11} должно обеспечивать большое поверхностное натяжение и одновременно быть не близким к единице для надежной устойчивости ядра в потенциале ловушки. В этой работе мы полагали обычно $g_{22} = 0.5$ либо $g_{22} = 0.6$, но в некоторых прогонах, с целью сравнения, брали $g_{22} = 0.3$ или $g_{22} = 0.8$.

Связанные уравнения Гросса – Питаевского (1), (2) решались численно с использованием стандартного метода Фурье с расщепленным шагом по времени второго порядка точности. Пространственное и временное разрешения были достаточными для сохранения соответствующего функционала Гамильтона и чисел частиц n_1 и n_2 до пятого десятичного знака на протяжении интервала времени $T_{run} =$ = 2000.

Начальные состояния, содержащие лишь мягкие возбуждения, были приготовлены с применением процедуры градиентного спуска, что в данном случае эквивалентно распространению в мнимом времени (imaginary-time propagation) на некотором отрезке вспомогательной квазивременной переменной. На вход этой диссипативной процедуры подавалась «затравочная» конфигурация первой компоненты в виде $A_{inp} = \tilde{A}_0(\mathbf{r})C_0(\mathbf{r})$ с действительной величиной $\tilde{A}_0(\mathbf{r})$. Несколько вихревых нитей вводились путем использования комплексного множителя

$$C_0(\mathbf{r}) = \prod_j \frac{w_j}{\sqrt{|w_j|^2 + \epsilon}},\tag{8}$$

где явный вид $w_j(\mathbf{r})$ зависел от желаемой «входной» формы нити. В частности, ориентированная близко к *z*-направлению нить вводилась выражением вида

$$w_j = [x - X_j(z)] \pm i[y - Y_j(z)]$$
(9)

с относительно малыми произвольными функциями $X_j(z)$ и $Y_j(z)$. Соответственно, переменная x либо y параметризовала вихревые нити, ориентированные близко к направлению соответственно x либо y. Малая положительная величина ϵ применялась, чтобы избежать нуля в знаменателях. Выбор знака «±» определял направление вращения j-го вихря. Каждая такая нить на выходе диссипативной процеду-



Рис. 1. Численный пример долгоживущего захваченного конденсатного пузыря с одной парой присоединенных вихревых нитей. Показаны отнормированные плотности обеих компонент конденсата в сечении y = 0 (заметьте разницу в диапазонах цветной шкалы): a — мантия; δ — ядро. Переходный слой между облаками довольно резкий. Конфигурация медленно вращается вокруг оси z, с наложенными колебаниями поверхности раздела, и показана в тот момент времени, когда оба вихря лежат в плоскости y = 0. В этом численном эксперименте $\lambda = 1.1$, $g_{11} = 1.0$, $g_{22} = 0.6$, $g_{12} = 1.2$, $n_1 = 1521.8$, $n_2 = 175.8$ и $\mu_1 = 30$

ры давала один вихрь и один антивихрь в указанном ранее смысле. «Затравка» второй компоненты $B_{inp} = \tilde{B}_0(\mathbf{r})$ не содержала вихрей.

Данная диссипативная процедура «отфильтровывала» быстрые потенциальные возбуждения и приводила систему близко к ее фоновой равновесной конфигурации (6), (7), включая специфический узкий профиль стенки между мантией и ядром. При этом также формировались правильные поперечные сечения вихрей в соответствии с фоновой плотностью. Медленные же возбуждения — позиции вихрей — не успевали достичь минимума своей энергии за относительно короткое распространение в мнимом времени, и этот факт обеспечивал последующую нетривиальную вихревую динамику на основной — консервативной — стадии численного эксперимента. Выбирая различные значения для μ_1 и μ_2 , различные вихревые конфигурации $X_i(z)$ и $Y_i(z)$ на входе диссипативной процедуры и различные периоды для распространения в мнимом времени, можно получить различные значения для n_1 и n_2 , а также различные начальные расположения присоединенных вихрей.

Анизотропия ловушки выбиралась близкой к единице, типично $\lambda = 1.1$. Это делалось, чтобы нарушить сферическую симметрию, но лишь слегка.

Необходимо также сказать, что никакие короткомасштабные неустойчивости не наблюдались в нашем моделировании. Структуры никогда не распадались при наличии малого возмущения. На данный факт можно смотреть как на косвенное свидетельство их динамической устойчивости. Некоторые из полученных численных результатов представлены и обсуждаются в следующем разделе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Простейший случай захваченного пузыря всего лишь с одной парой присоединенных вихревых нитей представлен на рис. 1. Там ясно видно, что ядро далеко не сферическое по форме, поскольку концы вихрей оттягивают поверхность раздела. В частности, граница ядра имеет резкие конические особенности вблизи концов вихрей. В данном примере начальная вихревая конфигурация была приблизительно симметричной относительно экваториальной плоскости z = 0, так что движение представляет собой медленное вращение вокруг оси z, сопровождаемое колебаниями пузыря из-за «несовершенства» начальных условий (см. видео [58]). В другом прогоне, без экваториальной симметрии, движение было несколько менее монотонным, поскольку мгно-



Рис. 2. Долгоживущий нестационарный пузырь с двумя парами присоединенных вихрей. Цветная шкала соответствует *x*-координате тех точек численной решетки, которые являются ближайшими к поверхности, определяемой уравнением $\rho_1(\mathbf{r},t) = 0.5\rho_{1eq}(\mathbf{r})$. Показаны только точки внутри области $\rho_{1eq}(\mathbf{r}) > 0.2$, и поэтому внешние концы нитей «отсечены». В этом численном эксперименте структура не просто вращается вокруг зависящей от времени мгновенной оси (не сонаправленной с осью *z*), но также подвержена медленным деформациям. В целом, это напоминает кувырки. Параметры: $\lambda = 1.1, g_{11} = 1.0, g_{22} = 0.6, g_{12} = 1.2, n_1 = 1552.2, n_2 = 117.9, \mu_1 = 30$

венная ось вращения зависела от времени (не показано).

Поведение становится нетривиальным, начиная с двух пар присоединенных вихрей. Пример показан на рис. 2, где форма эффективной (внутренней) границы первой компоненты представлена для нескольких моментов времени. В данном случае движение напоминает какое-то гимнастическое представление с кувырками либо вращающегося в воздухе парашютиста-скайдайвера (см. видео [59]). Разумеется, более «спокойные» режимы также возможны, когда приблизительно стационарная конфигурация вращается вокруг оси *z* аналогично предыдущему примеру.

В проведенных вычислениях наблюдалось, что, в зависимости от параметров и начальных условий, три и более пары присоединенных вихрей демонстрируют как регулярную динамику, так и весьма драматичную и неустойчивую. Регулярная динамика соответствует простейшему случаю, когда симметричный пучок из нескольких вихрей находится в примерно стационарном вращении вокруг оси z,



Рис. 3. Регулярно вращающийся пузырь с тремя парами присоединенных вихрей. Параметры: $\lambda = 1.1$, $g_{11} = 1.0$, $g_{22} = 0.8$, $g_{12} = 1.6$, $n_1 = 1503.3$, $n_2 = 141.7$, $\mu_1 = 30$. Изначально вихри были ориентированы примерно вдоль трех декартовых осей. Мгновенная ось вращения медленно прецессирует вокруг *z*-направления

а также чуть более нетривиальному случаю, когда вращение происходит вокруг прецессирующей мгновенной оси (см. рис. 3 и видео [60] как пример). Такие спокойные режимы характерны для достаточно больших значений поверхностного натяжения, например при $g_{22} = 0.8$. Напротив, при $g_{22} = 0.5$, 0.6 пузырь-вихревые комплексы часто ведут себя нерегулярно, так что взаимное расположение вихрей изменяется во времени сложным и, по-видимому, непредсказуемым образом. Используя опять сравнение с атлетическими упражнениями, можно сказать, что подобное представление мог бы дать лишь какой-то фантастический, идеально гибкий клоун, обладающий более чем двумя парами конечностей. И в самом деле, движения выглядят иногда весьма забавно (см. видео [61]). Пример последовательности изменений для пузыря с тремя парами присоединенных вихрей представлен на рис. 4 (взято из видео [61]). Данный численный эксперимент также показывает, что требующиеся для возможности рассматриваемого явления числа захваченных атомов могут быть относительно небольшими. Так, при реалистичной длине ловушки $l_{tr}/a_{11} \approx 100$ имеем $N_1 \approx 3.3 \cdot 10^4$ и $N_2 \approx 1.5 \cdot 10^4$.

Здесь надо снова сказать, что при неустойчивой динамике концы двух вихрей с противоположными знаками часто приближаются друг к другу, и в некоторых случаях они способны соединиться и



Рис. 4. Нестационарный пузырь с тремя парами присоединенных вихрей. Параметры: $\lambda = 1.1$, $g_{11} = 1.0$, $g_{22} = 0.5$, $g_{12} = 1.0$, $n_1 = 332.5$, $n_2 = 145.7$, $\mu_1 = 18$. В этом примере динамика вихрей довольно быстрая и драматичная, тогда как числа частиц относительно невелики

оторваться от пузыря, формируя таким образом отдельную нить (два примера отрыва имеются на видео [61, 62]). Весьма легко отрыв происходит в случае слабого поверхностного натяжения (в частности, когда $g_{22} = 0.3$). Если же поверхностное натяжение достаточно сильное, то подобное поведение типично главным образом для систем с относительно малыми ядрами. Вихревые нити в мантии тогда довольно энергонасыщенны и находятся в полностью трехмерном режиме, и потому они имеют возможность быть наклоненными под большими углами к локальной нормали пузыря, инициируя таким образом процесс отделения.

Напротив, относительно большое тяжелое ядро и тонкая мантия делают вихри короткими (а течения первой компоненты — приблизительно двумерными на сфероиде) и направленными почти строго перпендикулярно к равновесной поверхности пузыря, и тогда их динамика качественно похожа на движение точечных вихрей на сфероидальной поверхности. Однако вопрос о количественной применимости этой аналогии требует дальнейшего тщательного исследования, поскольку взаимодействия вихрей с потенциальными осцилляциями мантии могут оставаться все еще важными. В целом, эта ситуация напоминает физику вихрей и антивихрей в обычных бозе-конденсатах, имеющих форму тонкой оболочки [55]. Рисунок 4 соответствует промежуточному режиму между полностью трехмерным и эффективно двумерным режимами.

Из всех приведенных выше примеров становится ясно, что динамика присоединенных вихрей может быть приблизительно конечномерной в том смысле, что в нее эффективно вовлечено лишь конечное число мягких степеней свободы. Очевидно, что движение присоединенных вихрей сильно зависит от их начального расположения. Численно нетрудно приготовить практически любое начальное состояние. Однако здесь необходимо подчеркнуть, что наша численная процедура инициализации не имеет ничего общего с требуемой реальной экспериментальной процедурой приготовления пузырей с присоединенными вихрями в бинарных конденсатах. Но в этом месте можно вспомнить, что «вращающиеся» потенциалы ловушки



Рис. 5. Пузырь с тремя парами присоединенных вихрей, сформированных вращающейся ловушкой, у которой угол поворота $\phi(t) = 0.08 \cdot 2\pi (\sqrt{t^2 + 400^2} - 400)$, а поперечная анизотропия $\nu(t) = 0.05t^2/(t^2 + 400^2)$. Остальные параметры: $\lambda = 1.0, g_{11} = 1.0, g_{22} = 0.6, g_{12} = 1.2, n_1 = 894.7, n_2 = 182.5, \mu_1 = 24$. На этом рисунке внешние концы вихрей «отсечены» условием $\rho_{1eq}(\mathbf{r}) > 0.3$

$$V({\bf r},t) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2) + \nu(t) \operatorname{Re}\left[(x + iy)^2 e^{-2i\phi(t)}\right],$$

как известно, «тянут» вихревые нити от периферии к оси конденсата. Здесь $\phi(t)$ — угол поворота ловушки, а $\nu(t)$ — параметр ее анизотропии в плоскости *xy*. Предположим, что вначале мы имеем близкое к равновесному состояние с короткой вихревой нитью вблизи внешней поверхности мантии. Когда ловушка начинает вращаться, нить приближается к ядру, присоединяется к нему и затем формирует пару вихрь–антивихрь. Ядро остается безвихревым в этом процессе. По меньшей мере несколько проведенных дополнительных численных экспериментов (не проиллюстрированных здесь) показали действенность подобного сценария для приготовления конфигураций, подобных представленной выше на рис. 1, включая асимметрию относительно оси z. Угловая скорость вращения ловушки — важный параметр в таких ситуациях. Если сделать вращение достаточно быстрым, то в результате сложного и существенно неравновесного переходного процесса к пузырю могут присоединиться две, три и большее число пар вихрей, ориентированных под не слишком большими углами к осси z (см. пример на рис. 5). Таким образом, вращающаяся ловушка представляется одним из возможных экспериментальных способов. Что до более общей задачи, как произвести в лаборатории пузырь с несколькими произвольно расположенными присоединенными вихрями, то тут требуется отдельное и глубокое исследование, включающее усилия высококвалифицированных экспериментаторов. Поэтому такая задача выходит за рамки данного чисто теоретического рассмотрения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем итоги. В этой работе впервые теоретически указана возможность специфических комплексов типа стенка-вихри в двухкомпонентном бозе-конденсате, обусловленных его компактной, устойчиво стратифицированной конфигурацией. Эти комплексы представляют собой долгоживущие пузыри с присоединенными вихрями, существующие в широких параметрических диапазонах и демонстрирующие в численных экспериментах весьма интересное динамическое поведение. Нами наблюдались как регулярные, так и нерегулярные режимы. Поскольку здесь налицо новый пример богатой физики, содержащейся в относительно простой (по крайней мере для численного исследования) структуре, необходимы дальнейшие теоретические усилия в этом направлении, включая развитие аналитических подходов.

Параметры наших симуляций вполне реалистичны, так что будущее экспериментальное воплощение таких систем представляется вполне возможным. Трудностью для экспериментаторов, возможно, окажется приготовить бинарный конденсат без мелких капель и разбиения на множество областей, а только лишь с одним ядром в центре. После этого нужно будет внедрить в оболочку несколько вихрей. Возможная методика для этого — вращающаяся ловушка.

ЛИТЕРАТУРА

- Tin-Lun Ho and V. B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. 77, 3276 (1996).
- H. Pu and N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. 80, 1130 (1998).
- B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. 85, 2857 (2000).
- S. Coen and M. Haelterman, Phys. Rev. Lett. 87, 140401 (2001).

- G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 89, 190404 (2002).
- J. P. Burke, Jr., J. L. Bohn, B. D. Esry, and C. H. Greene, Phys. Rev. Lett. 80, 2097 (1998).
- G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 100, 210402 (2008).
- S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. 101, 040402 (2008).
- S. Tojo, Y. Taguchi, Y. Masuyama, T. Hayashi, H. Saito, and T. Hirano, Phys. Rev. A 82, 033609 (2010).
- C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. 82, 1225 (2010).
- 11. E. Timmermans, Phys. Rev. Lett. 81, 5718 (1998).
- 12. P. Ao and S. T. Chui, Phys. Rev. A 58, 4836 (1998).
- B. Van Schaeybroeck, Phys. Rev. A 78, 023624 (2008).
- 14. A. A. Svidzinsky and S. T. Chui, Phys. Rev. A 68, 013612 (2003).
- 15. S. Gautam and D. Angom, J. Phys. B 43, 095302 (2010).
- 16. R. W. Pattinson, T. P. Billam, S. A. Gardiner, D. J. McCarron, H. W. Cho, S. L. Cornish, N. G. Parker, and N. P. Proukakis, Phys. Rev. A 87, 013625 (2013).
- 17. K. Suthar, Arko Roy, and D. Angom, Phys. Rev. A 91, 043615 (2015).
- 18. K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A 93, 063608 (2016).
- 19. K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A 95, 043602 (2017).
- 20. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A 83, 033602 (2011).
- H. Takeuchi, N. Suzuki, K. Kasamatsu, H. Saito, and M. Tsubota, Phys. Rev. B 81, 094517 (2010).
- 22. N. Suzuki, H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Saito, Phys. Rev. A 82, 063604 (2010).
- 23. K. Sasaki, N. Suzuki, D. Akamatsu, and H. Saito, Phys. Rev. A 80, 063611 (2009).
- 24. S. Gautam and D. Angom, Phys. Rev. A 81, 053616 (2010).

- 25. T. Kadokura, T. Aioi, K. Sasaki, T. Kishimoto, and H. Saito, Phys. Rev. A 85, 013602 (2012).
- 26. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A 83, 053606 (2011).
- 27. D. Kobyakov, V. Bychkov, E. Lundh, A. Bezett, and M. Marklund, Phys. Rev. A 86, 023614 (2012).
- 28. D. K. Maity, K. Mukherjee, S. I. Mistakidis, S. Das, P. G. Kevrekidis, S. Majumder, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A 102, 033320 (2020).
- 29. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. 91, 150406 (2003).
- 30. K. Kasamatsu and M. Tsubota, Phys. Rev. A 79, 023606 (2009).
- 31. P. Mason and A. Aftalion, Phys. Rev. A 84, 033611 (2011).
- K. J. H. Law, P. G. Kevrekidis, and L. S. Tuckerman, Phys. Rev. Lett. **105**, 160405 (2010); *Erratum*, Phys. Rev. Lett. **106**, 199903 (2011).
- 33. M. Pola, J. Stockhofe, P. Schmelcher, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A 86, 053601 (2012).
- 34. S. Hayashi, M. Tsubota, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A 87, 063628 (2013).
- 35. A. Richaud, V. Penna, R. Mayol, and M. Guilleumas, Phys. Rev. A 101, 013630 (2020).
- 36. A. Richaud, V. Penna, and A. L. Fetter, Phys. Rev. A 103, 023311 (2021).
- **37**. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **113**, 539 (2021).
- 38. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. 93, 250406 (2004).
- 39. H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Nitta, Phys. Rev. Lett. 109, 245301 (2012).
- 40. M. Nitta, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A 85, 053639 (2012).
- 41. K. Kasamatsu, H. Takeuchi, M. Tsubota, and M. Nitta, Phys. Rev. A 88, 013620 (2013).
- 42. S. B. Gudnason and M. Nitta, Phys. Rev. D 98, 125002 (2018).

- **43**. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **113**, 848 (2021).
- 44. C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Con*densation in Dilute Gases, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2002).
- 45. L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose–Einstein Con*densation, Oxford Univ. Press, Oxford (2003).
- 46. A. L. Fetter, Rev. Mod. Phys. 81, 647 (2009).
- 47. A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, Phys. Rev. A 62, 063617 (2000).
- 48. V. P. Ruban, Phys. Rev. E 64, 036305 (2001).
- 49. A. Aftalion and I. Danaila, Phys. Rev. A 68, 023603 (2003).
- 50. T.-L. Horng, S.-C. Gou, and T.-C. Lin, Phys. Rev. A 74, 041603(R) (2006).
- 51. S. Serafini, L. Galantucci, E. Iseni, T. Bienaime, R. N. Bisset, C. F. Barenghi, F. Dalfovo, G. Lamporesi, and G. Ferrari, Phys. Rev. X 7, 021031 (2017).
- 52. C. Ticknor, W. Wang, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A 98, 033609 (2018).
- **53**. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **108**, 638 (2018).
- 54. C. Ticknor, V. P. Ruban, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A 99, 063604 (2019).
- 55. K. Padavić, K. Sun, C. Lannert, and S. Vishveshwara, Phys. Rev. A 102, 043305 (2020).
- 56. N. Chamel and P. Haensel, Liv. Rev. Relat. 11, 10 (2008).
- 57. G. E. Volovik, Proc. Natl. Ac. Sci. USA 97, 2431 (2000).
- 58. http://home.itp.ac.ru/~ruban/12APR2021/v1.avi
- 59. http://home.itp.ac.ru/~ruban/12APR2021/v2.avi
- 60. http://home.itp.ac.ru/~ruban/12APR2021/v3.avi
- 61. http://home.itp.ac.ru/~ruban/12APR2021/v4.avi
- 62. http://home.itp.ac.ru/~ruban/12APR2021/v5.avi

ПРЕДКРИТИЧЕСКАЯ ТЕРМОАКУСТИКА В ГЕЛИИ

К. О. Кешишев, В. И. Марченко^{*}, Е. Р. Подоляк

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук 117334, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 10 сентября 2021 г., после переработки 10 сентября 2021 г. Принята к публикации 10 сентября 2021 г.

Исследована эволюция основной моды акустических колебаний в резонаторе, заполненном газообразным гелием, при погружении его в транспортный дьюар. Обнаружено критическое поведение параметра затухания при приближении к уровню, ниже которого возникает термоакустическая неустойчивость.

DOI: 10.31857/S0044451021120142

1. ВВЕДЕНИЕ

В различных установках, где существует значительный перепад температуры в газе, при соответствующей геометрии может возникать термоакустическая неустойчивость [1, 2], приводящая зачастую к большим спонтанным колебаниям давления [3–5].

Обычно экспериментальные исследования термоакустики сводятся к наблюдению самого факта наличия или отсутствия спонтанных колебаний в тех или иных условиях [6–11]. Однако, согласно существующим теоретическим представлениям об этой неустойчивости [12], имеется принципиальная возможность исследования особенности поведения устойчивого состояния системы при приближении к точке возникновения колебаний.

Термоакустическая неустойчивость по сути ничем не отличается от турбулентной неустойчивости в гидродинамике. Действительно, ламинарное течение жидкости является решением уравнений гидродинамики в конкретной заданной геометрии границ. Стационарное состояние какой-либо тепловой или низкотемпературной установки также должно являться решением уравнений теплопереноса и газодинамики. В простейшей постановке задачи речь может идти, например, о решении уравнения теплопроводности в покоящемся газе. Стационарные решения остаются формально верными при произвольных значениях потока массы J и потока тепловой энергии Q. Они, однако, могут потерять устойчивость по мере изменения внешних условий, и тогда будет реализоваться другое решение, в общем случае — нестационарное.

Известно лишь одно точное решение задачи о потере устойчивости ламинарного течения в щели [13]. Во всех остальных случаях, как в турбулентности, так и в термоакустике, граница устойчивости стационарного состояния определяется лишь в том или ином приближении¹⁾. Обычно даже подлежащее исследованию на устойчивость состояние невозможно представить как результат последовательного решения уравнений гидродинамики. Единственное исключение — задача о бенаровской конвекционной неустойчивости неподвижной жидкости (см. § 57 в [14]).

Согласно Ландау [15], общий сценарий возникновения неустойчивости стационарного состояния жидкости сводится к следующему: любая мода колебаний плотности, скорости (и температуры) при сколь угодно малой амплитуде характеризуется зависимостью от времени вида $\exp(i\omega t - \gamma t)$, причем параметр затухания γ у всех мод положителен. Если при изменении внешних условий у какой-то из мод параметр γ уменьшается и меняет знак, то возникает спонтанное колебание. При этом возможны два случая развития неустойчивости мягкое самовозбуждение или жесткое самовозбуждение (supercritical and subcritical bifurcations). В первом случае возникает колебание на частоте критической моды с амплитудой, нарастающей от нуля

¹⁾ Отметим, впрочем, что и решение в [13] получено при существенных упрощениях — не учитывались обусловленные вязкостью тепловые эффекты и градиент плотности, возникающий из-за необходимого для обеспечения ламинарного течения перепада давления.

^{*} E-mail: mar@kapitza.ras.ru

по мере удаления от точки потери устойчивости. Во втором случае колебание возникает скачком — сразу с конечной амплитудой и на частоте, не обязательно близкой к критической.

Такие переходы являются кинетическими аналогами фазовых переходов. Но здесь имеются существенные отличия. В частности, поскольку смена картины потоков происходит на задаваемых размерами установки макроскопических масштабах и локально все процессы в обоих состояниях описываются одними и теми же уравнениями гидродинамики, то нет причин для роста термодинамических флуктуаций в окрестности перехода. Поэтому, как и полагал Ландау, вблизи точки потери устойчивости можно ожидать линейную зависимость частоты критической моды²⁾ от меры близости к бифуркации и линейное же стремление параметра затухания к нулю.

В термоакустике теряющая устойчивость мода в случае замкнутого сосуда принадлежит к дискретному спектру системы. Тогда возможно наблюдение за поведением ее частоты и затухания при приближении к точке бифуркации со стороны стационарного состояния с помощью измерения резонанса. Этому исследованию посвящена настоящая работа.

2. СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА

Измерения проводились в стандартном транспортном гелиевом сосуде СТГ-40. Принципиальная схема эксперимента представлена на рис. 1. Основной гелиевый объем 1 (емкость 40 л) подвешен на тонкостенной горловине 2 (трубка из нержавеющей стали, диаметр 25 мм, толщина стенки 0.3 мм, длина 400 мм). Нижний конец горловины расположен на высоте h = 390 мм. Здесь и далее высота h отсчитывается от дна основного объема. Между верхним и нижним ее концами стрелкой отмечено место теплового контакта горловины с азотным экраном, h = 625 мм. Испаряющийся гелий поступает в централизованную сеть и далее в газгольдер, давление в котором автоматически поддерживается на уровне, превышающем атмосферное давление на 19 мбар. Верхний торец горловины герметично уплотнен эластичной резиновой мембраной 3. Сквозь отверстия в мембране с небольшим натягом пропущены термометрическая штанга 4 и U-образный акустический резонатор 5. Благодаря упругости резины штангу и резонатор можно независимо



Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 — гелиевый объем СТГ-40; 2 — горловина; 3 — резиновая мембрана; 4 — термометрическая штанга; 5 — акустический резонатор; 6 — датчик давления; 7 — микрофоны; 8 — динамик; 9 — дроссель

перемещать вдоль вертикали без нарушения герметичности гелиевого объема дьюара.

Термометрическая штанга представляет собой тонкостенную трубку из нержавеющей стали (диаметр 3 мм, толщина стенки 0.2 мм) с заглушенными верхним и нижним концами, в которой с шагом 100 мм прорезаны пять овальных отверстий. Внутри трубки смонтированы подводящие провода и строго напротив отверстий — термометры.

U-образный резонатор изготовлен из тонкостенной нержавеющей трубки (диаметр 4 мм, толщина стенки 0.3 мм, длина 1.3 м). На концах резонатора, находящихся вне гелиевого объема, смонтированы датчик давления 6, микрофоны 7 и динамик 8.

При изменении глубины погружения замкнутого резонатора в нем, очевидным образом, изменяется давление. Для проведения измерений при строго постоянном давлении в схеме (см. рис. 1) предусмотрен дроссель 9, обеспечивающий выравнивание перепада давлений между резонатором и дьюаром с характерным временем порядка 100 с. В то же время при всех наблюдаемых частотах резонатор оказывается акустически изолированным от основного объема гелия.

²⁾ При возникновении конвекции частота не меняется и остается равной нулю [16].



Рис. 2. Градуировка платиновых датчиков

3. ТЕРМОМЕТРИЯ

При измерении температуры использовались миниатюрные платиновые термометры Heraeus 420 с номинальным сопротивлением 1000 Ом при температуре T = 0°С. Производителем предусмотрен стандартный диапазон 77-423 К, для которого известны зависимость сопротивления R от температуры Т и другие параметры датчиков. Чтобы использовать такие термометры при значительно более низких температурах, были измерены зависимости R(T) для всех пяти датчиков в интервале 4.2 K < T < 300 K; при этом в качестве репера использовался калиброванный термометр сопротивления Cernox CX-1010-SD-0.1L. Эти результаты представлены на рис. 2. На верхней вставке для примера продемонстрировано поведение одного из пяти датчиков в интервале 4.2-8 К. Очевидно, что определяющий вклад в зависимость R(T) в этой области вносит величина остаточного сопротивления. Значения $R_i(4.2 \text{ K})$ находятся в диапазоне 11.75–12.19 Ом. Здесь же (рис. 2) на нижней вставке показана температурная зависимость чувствительности dR/dTплатиновых термометров. По сравнению с высокотемпературной областью при температуре 4.2 К чувствительность падает в 250 раз. Тем не менее даже в этом случае при достаточной точности измерения сопротивления ($\Delta R/R \sim 10^{-4}$) можно фиксировать изменение температуры с погрешностью примерно 1 К.



Рис. 3. Распределение температуры в дьюаре

На рис. 3 представлена зависимость T(h), характеризующая распределение температуры в горловине дьюара. Напомним, что ее нижний конец находится на отметке h = 390 мм. Измерения проводились с помощью рассмотренных выше платиновых термометров, смонтированных на штанге. В ходе измерений штанга поэтапно с шагом 10 мм погружалась в горловину. После очередного погружения температура устанавливалась за время около 5 мин, и далее регистрировались показания всех пяти термометров. Таким образом, многие из точек на рис. 3 являются результатом измерения температуры поочередно несколькими термометрами.

4. АКУСТИЧЕСКАЯ АППАРАТУРА

Для акустических измерений использовался U-образный резонатор на основной моде — половина длины волны. В ходе экспериментов измерялось статическое давление с помощью тензометрического датчика абсолютного давления МИДА-ДА-13П с диапазоном 0–1.6 бар. Чувствительность датчика (3.1 В/бар) оказалась достаточной для наблюдения акустических колебаний большой амплитуды. При изучении колебаний с малой амплитудой ($\tilde{p} < 0.4$ мбар) использовались два электретных микрофона Panasonic WM-52 с чувствительностью примерно 0.6 В/мбар. Наличие двух микрофонов позволяло контролировать разность фаз сигналов на двух концах резонатора. Для возбуждения вынужденных колебаний в схеме резонатора предусмотрен динамик диаметром 16 мм.

5. НАБЛЮДЕНИЕ РЕЗОНАНСОВ

Одна из целей эксперимента заключалась в наблюдении эволюции основной моды колебаний с понижением температуры. При исследовании резонансов термометрическая штанга находилась в неизменном положении и температура непрерывно контролировалась в пяти точках, отмеченных квадратами на рис. 3. После того как возмущение температурного поля, вызванное очередным опусканием резонатора, релаксировало, проводилось измерение³⁾ амплитуды А вынужденных колебаний давления в зависимости от частоты f генератора, возбуждающего динамик. Одновременно частота измерялась частотомером на выходе микрофона. При этом, как и следовало ожидать, показания частотомера совпадали с частотой генератора. Кроме того, непрерывно контролировалось статическое давление р внутри резонатора. Таким образом, представленные ниже данные являются результатом последовательного циклического опроса восьми датчиков. Время одного цикла (примерно 17 с) обусловлено компромиссом между точностью измерений и быстродействием измерительной схемы.

По изложенному сценарию, начиная с высоты h = 507 мм (положение резонатора определяем по координате его нижней точки), за время около восьми часов были получены 9 резонансных кривых A(f) на девяти высотах. На рис. 4 представлены хронологические зависимости h(t), f(t), A(t), p(t) и показания четырех термометров $T_1(t), \ldots, T_4(t)$ (см. рис. 1) в течение последних 100 минут эксперимента. Данные нижнего термометра T_5 не приведены, поскольку с точностью до измерительных шумов его температура оставалась постоянной и равной 4.2 К.

На второй минуте в очередной раз резонатор был опущен с высоты 405 мм до 400 мм. Одновременно зафиксированы возмущение и релаксация давления и четырех термометров. Далее, между 9-й и 32-й минутами, проведена запись резонансной кривой.

На 34-й минуте, при выключенном генераторе, резонатор был опущен на глубину 398 мм. По сравнению со всеми предыдущими измерениями резонансов здесь наблюдается существенное отличие, обусловленное, очевидно, предельной близостью системы к критической точке. Как и ранее, возникают возмущение и релаксация термометров, и одновременно (чего не было раньше) происходит всплеск спонтанных колебаний на частоте около 80 Гц продолжительностью около минуты.

После релаксации системы и включения генератора, начиная с 42-й минуты, измерялся последний резонанс. На 56-й минуте, после прохождения максимума резонансной кривой A(f) и переключения генератора на следующую частоту 81.5 Гц, эта частота была зафиксирована, и далее отслеживалось поведение системы в режиме вынужденных колебаний при слабом дрейфе температуры.

На 64-й минуте система потеряла устойчивость и возникли спонтанные колебания. Измеряемая частота оторвалась от частоты генератора и понизилась до величины $f = 80, 2 \Gamma$ ц, а амплитуда выросла в 5 раз⁴). Одновременно произошли кратковременные изменения в показаниях датчиков давления и температуры. Спустя приблизительно 10 минут генератор был выключен, что никак не сказалось на поведении системы, которая оставалась в режиме автоколебаний. Вплоть до окончания эксперимента наблюдался лишь слабый немонотонный дрейф температуры, амплитуды и частоты колебаний.

На рис. 5 представлены пять резонансных кривых A(f), ближайших к точке потери устойчивости стационарного состояния. Экспериментальные точки аппроксимируются формулой, естественной для уединенной слабозатухающей моды гармонических колебаний любой механической системы (см. §26 в [17]),

$$A = \frac{A_r}{\sqrt{(2\pi(f - f_r)\tau)^2 + 1}},$$
 (1)

со следующими тремя параметрами: A_r — максимальная амплитуда вынужденных колебаний, пропорциональная амплитуде возбуждения; f_r — резонансная частота; $\tau = 1/\gamma$ — время затухания.

На рис. 6 представлены зависимости параметров формулы резонансной кривой (1) от координа-

³⁾ Предварительно контролировалась линейность колебаний при изменении амплитуды возбуждения. При этом разность фаз на концах резонатора составляла 180°.

⁴⁾ Такое поведение указывает на то, что бифуркация происходит по жесткому (но близкому к мягкому) режиму самовозбуждения. Для окончательного вывода, очевидно, необходимо проведение наблюдений за динамикой развития бифуркации с лучшим временным разрешением.



Рис. 4. Вынужденные и спонтанные колебания в резонаторе. Подробнее см. текст



Рис. 5. Ближайшие к критической точке резонансные кривые



Рис. 6. Поведение параметров резонансных кривых вблизи точки бифуркации

ты h резонатора. Амплитуда растет по закону $A_r \propto (h - h_c)^{-1}$, где $h_c = 397.5$ мм, а частота f_r и параметр затухания γ демонстрируют линейное поведение.

Таким образом, на примере термоакустики сценарий Ландау потери устойчивости в гидродинамике находит экспериментальное подтверждение.

Благодарности. Благодарим А. Ф. Андреева, С. Т. Болдарева, Е. А. Бренера, И. К. Буткевича, Р. Б. Гусева, В. В. Дмитриева, Л. А. Мельниковского, В. В. Сиренева, А. И. Смирнова и И. Н. Хлюстикова за полезные обсуждения, помощь и советы.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. C. Sondhauss, Ann. der Phys. Chem. 79, 1 (1850).
- W. H. Keesom, *Helium*, Elsevier, Amsterdam (1942), p. 174.
- C. J. Lawn and G. Peneelet, Int. J. Spray Combust. Dyn. 10, 3 (2018).
- N. Dittmar, S. Kloeppel, Ch. Haberstroh et al., Phys. Proc. 67, 348 (2015).
- W. Stautner, R. Chen, M. Xu et al., IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 101, 012038 (2015).
- J. R. Clement and J. Gaffney, Adv. Cryog. Eng. 1, 302 (1954).
- J. Gaffney and J. R. Clement, Rev. Sci. Instr. 26, 620 (1955).
- T. von Hoffmann, U. Lienert, and H. Quack, Cryogenics 13, 400 (1973).
- T. Yazaki, A. Tominaga, and Y. Narahara, Cryogenics 19, 393 (1979).
- T. Yazaki, A. Tominaga, and Y. Narahara, J. Low Temp. Phys. 41, 45 (1980).
- Y. Gu and K. D. Timmerhaus, Adv. Cryog. Eng. 39, 1733 (1994).
- 12. N. Rott, Adv. Appl. Mech. 20, 135 (1980).
- **13.** C. C. Lin, *The Theory of Hydrodynamic Stability*, Cambridge Univ. Press (1955).
- **14**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Наука, Москва (1986).
- 15. Л. Д. Ландау, ДАН 44, 339 (1944).
- **16**. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **33**, 402 (1957).
- **17**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1973).

НЕЛИНЕЙНЫЙ ПЛАНАРНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В КИРАЛЬНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ПОЛУМЕТАЛЛЕ CoSi

В. Д. Есин, А. В. Тимонина, Н. Н. Колесников, Э. В. Девятов*

Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипъяна Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> Поступила в редакцию 31 августа 2021 г., после переработки 31 августа 2021 г. Принята к публикации 1 сентября 2021 г.

Для кирального топологического полуметалла CoSi экспериментально исследуется отклик поперечной составляющей переменного напряжения на второй гармонике на переменный электрический ток для двух, параллельной и перпендикулярной плоскости образца, ориентаций магнитного поля. В отсутствие магнитного поля наблюдается квадратичная зависимость от продольного электрического тока, как и следовало ожидать для нелинейного эффекта Холла в топологических полуметаллах. При наличии внешнего магнитного поля холловское напряжение на второй гармонике демонстрирует зависимость нечетного типа для любой ориентации магнитного поля относительно плоскости образца. Для перпендикулярного магнитного поля такая чувствительность к направлению позволяет исключить возможный вклад термо-электрических эффектов, поэтому отклик поперечной составляющей напряжения на второй гармонике действительно возникает из-за нелинейного эффекта Холла. Для параллельного магнитного поля, наоборот, зависимость нечетного типа является наглядной демонстрацией планарного нелинейного эффекта Холла в киральном полуметалле.

DOI: 10.31857/S0044451021120154

1. ВВЕДЕНИЕ

Возникший в последнее время интерес к топологическим полуметаллам является частью научного интереса к топологическим материалам, см. недавний обзор [1]. По сравнению с дираковскими материалами и системами с узловой линией полуметаллы Вейля характеризуются разделенными в пространстве парами узлов Вейля с противоположными киральностями, что приводит к ряду интересных физических явлений. Наиболее важно то, что нетривиальная топология приводит к поверхностным состояниям ферми-арок, которые соединяют проекции объемных возбуждений на боковой поверхности [1], например, для нецентросимметричных кристаллов [2, 3] типа TaAs, WTe₂ и MoTe₂. Концепция кирального топологического полуметалла [4, 5] является естественным обобщением концепции вейлевского полуметалла посредством одновременного нарушения зеркальной симметрии и симметрии относительно к инверсии. В таком слу-

луметаллов Вейля и Дирака [26,27]. В эксперименте НЭХ проявляется как квадратичный отклик поперечной составляющей напряжения холловского типа на переменный ток, который может быть измерен как поперечное холловское напряжение на второй

кристаллов CoSi [6–9].

чае существует только одна пара киральных узлов с противоположными числами Черна и с боль-

шим разделением в импульсном пространстве. Это приводит к очень длинным поверхностным ферми-

аркам [6], что сильно отличается от полуметаллов

Вейля, которые характеризуются множественным

количеством пар вейлевских узлов с малым рассто-

янием между ними [1]. Объемная зонная структу-

ра и длинные поверхностные ферми-арки подтвер-

ждены экспериментально, например, для семейства

ни нелинейный эффект Холла (НЭХ) [10-23], как из-

вестно, является следствием топологического спект-

ра из-за ненулевой кривизны Берри в импульс-

ном пространстве. НЭХ был экспериментально про-

демонстрирован для однослойных дихалькогенидов

переходных металлов [24, 25] и для трехмерных по-

гармонике в отсутствие внешнего магнитного поля.

Инвариантный относительно обращения време-

^{*} E-mail: dev@issp.ac.ru

В дополнение к известным экспериментальным реализациям НЭХ [24-27], киральные полуметаллы должны демонстрировать значительный сигнал эффекта НЭХ из-за большого разделения киральных узлов в импульсном пространстве. Более того, в магнитном поле можно ожидать сильный нелинейный планарный эффект Холла [28]. Последний является нелинейным аналогом обычного планарного эффекта Холла [29–32] в топологических системах [33–35]. Этот новый нелинейный планарный эффект Холла возникает в результате одновременного действия связи спина и импульса (spin-momentum locking) и нарушения симметрии относительно обращения времени, поэтому его можно ожидать для широкого класса нецентросимметричных материалов [28]. Таким образом, целесообразно изучить оба нелинейных эффекта Холла для различной ориентации магнитного поля для известных киральных полуметаллов, таких как CoSi.

В настоящей работе проведено экспериментальное исследование отклика поперечной составляющей переменного напряжения на второй гармонике на переменный электрический ток для кирального топологического полуметалла CoSi для двух ориентаций внешнего магнитного поля — параллельной и перпендикулярной плоскости образца. В отсутствие магнитного поля наблюдаемый отклик зависит от продольного электрического тока квадратично. Это соответствует проявлению нелинейного эффекта Холла в топологических полуметаллах. При наличии внешнего магнитного поля, независимо от его ориентации, для холловского напряжения на второй гармонике наблюдается зависимость нечетного типа. Если магнитное поле ориентировано перпендикулярно плоскости образца, то подобная чувствительность к направлению позволяет исключить возможный вклад термоэлектрических эффектов. Это позволяет сделать вывод о том, что отклик поперечной составляющей напряжения на второй гармонике действительно появляется вследствие нелинейного эффекта Холла. Если же магнитное поле ориентировано параллельно плоскости образца, то зависимость нечетного типа указывает на то, что в киральном полуметалле CoSi наблюдается планарный нелинейный эффект Холла.

2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА

Исходный материал CoSi был синтезирован из порошков кобальта и кремния путем нагревания в вакуумированных кварцевых ампулах до 950 °C со



Рис. 1. (В цвете онлайн) Оптическое изображение образца. Монокристалл CoSi с продольным размером около 100 мкм и толщиной 1 мкм помещается на изолирующую подложку SiO₂. Контакты из Au толщиной 100 нм разделены промежутками в 5 мкм. Электрическая схема демонстрирует четырехточечный метод измерения компонент напряжения Холла 1ω и 2ω с помощью фазочувствительного усилителя. Датчики напряжения расположены симметрично относительно линии тока, что также защищает сигнал 2ω от возможной примеси термоэдс [26]

скростью 10 °C/ч. Ампулы выдерживались при этой температуре в течение двух недель, а затем охлаждались до комнатной температуры со скоростью 6°С/ч. Полученный материал с помощью рентгеноструктурного анализа был идентифицирован как CoSi с некоторыми следами SiO₂. Затем методом йодного транспорта в вакуумированных кварцевых ампулах при температуре 1000 °C были выращены монокристаллы CoSi. Рентгеновская дифрактометрия показывает, что кристаллы имеют кубическую структуру, а рентгеноспектральный анализ подтверждает эквиатомное соотношение Со и Si без какихлибо следов SiO₂. Небольшие пластинки CoSi можно легко получить из исходного монокристалла методом механического скалывания [36, 37]. С помощью стандартных измерений магнитосопротивления кристаллографическая ориентация пластинок определяется как (001) [38].

Топологические полуметаллы являются трехмерными кристаллами [1], поэтому необходимо использовать толстые (около 1 мкм) пластинки CoSi. Стандартный процесс литографии невозможен изза разницы в высоте 1 мкм между подложкой и верхней поверхностью чешуйки, поэтому стандартная методики подготовки образцов с тонкими пластинками [36,37,39–41] была модифицирована. Первоначально шаблон контакта задается на изолирующей подложке SiO₂ методом взрывной литографии после термического напыления 100 нм золота, как показано на рис. 1. Золотые дорожки имеют ширину 10 мкм, при этом дорожки разделены интервалами в 5 мкм. Небольшая пластинка CoSi слегка прижимается к Au-контактам с помощью другой окисленной кремниевой подложки, см. рис. 1, поэтому контакт Au–CoSi формируется на нижней поверхности пластинки CoSi. Данная процедура обеспечивает надежные контакты Au–CoSi, которые защищены от любого окисления (загрязнения) и являются стабильными в различных циклах охлаждения [36, 37, 39–41].

Для исследования НЭХ в киральном топологическом полуметалле CoSi были выполнены измерения первой (1ω) и второй (2ω) гармоник с помощью стандартного четырехточечного метода для *хх*- (продольной) и *ху*- (поперечной) составляющих напряжения Холла. Конфигурация, соответствующая поперечной составляющей напряжения, изображена на рис. 1. Датчики напряжения расположены симметрично относительно линии тока, что также исключает из сигнала 2 возможную примесь термоэдс [26]. Составляющие напряжения 1ω и 2ω измерялись с помощью фазочувствительного усилителя на частоте *f* = 7.7 кГц. Измерения проводились при температурах жидкого гелия ((1.2–4.2) К) для двух различных ориентаций магнитного поля. Аналогичные результаты были получены для различных образцов для нескольких циклов охлаждения.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Рисунок 2 демонстрирует ярко выраженное омическое поведение для продольной составляющей напряжения первой гармоники V₁^{xx} в отсутствие магнитного поля. При увеличении амплитуды переменного тока I_{ac} от 0 до 0.1 мА зависимость $V_{1\omega}^{xx}(I_{ac})$ остается строго линейной для двух разных образцов. Наклоны зависимостей $V^{xx}_{1\omega}(I_{ac})$ соответствуют сопротивлению объема 0.15 Ом и 0.05 Ом для синей и красной кривых, соответственно. Напротив, типичное сопротивление одиночного контакта Au-CoSi намного выше (≈ 10 Ом при низкой температуре), что соответствует стандартному туннелированию через потенциальный барьер на границе раздела. Это видно из трехточечной кривой $dV/dI(I_{dc})$ на вставке к рис. 2. Таким образом, наша установка позволяет проводить правильные четырехточечные измерения даже для контактов Au-CoSi с относительно высоким сопротивлением.

На рис. 3 показаны xx- и xy-компоненты напряжения второй гармоники в отсутствие магнитного поля. Как и следовало ожидать для строго линейных омических кривых на рис. 2, продольное зна-



Рис. 2. (В цвете онлайн) Примеры низкотемпературных кривых $V_{1\omega}(I_{ac})$, полученных четырехточечным методом, для двух разных образцов в отсутствие магнитного поля (основной график). Строго линейные омические зависимости (с сопротивлениями менее ≈ 0.2 Ом) подтверждают правильность наших четырехточечных измерений даже для контактов Au-CoSi с относительно высоким сопротивлением. На вставке показана типичная трехточечная кривая $dV/dI(I_{dc})$ для одиночного контакта Au-CoSi, демонстрирующая более высокое сопротивление контакта. Таким образом, для четырехточечных измерений на второй гармонике джоулев нагрев происходит, в основном, в контактах исток-сток, что позволяет полностью компенсировать температурные градиенты в холловской (xy) конфигурации 2ω на рис. 1

чение $V_{2\omega}^{xx}$ пренебрежимо мало: оно не превышает 0.1 мкВ для диапазона переменного тока 0.5 мкА. Напротив, мы наблюдаем хорошо выраженный, до 1 мкВ, поперечный (холловский) сигнал $V_{2\omega}^{xy}$, который нелинейно зависит от переменного тока Iac. Зависимости являются квадратичными, $V^{xy}_{2\omega} \propto I^2_{ac}$, как это показано на правой вставке к рис. 3 для одного из образцов. Также мы не наблюдаем значительной температурной зависимости для $V^{xy}_{2\omega}$ в интервале температур (1.2-4.2) К, см. верхнюю вставку на рис. 3. Такое поведение (слабая зависимость $V_{2\omega}^{xx}$ и квадратичная зависимость $V^{xy}_{2\omega}$) было получено для разных образцов в разных циклах охлаждения, например, две кривые на основном графике рис. 3 получены для тех же двух образцов, что и кривые на рис. 2, а квадратичные кривые на верхней вставке к рис. 3 — для другого образца.

В принципе, квадратичная зависимость сигнала второй гармоники также может возникать из-за термоэлектрических эффектов [42,43]. Джоулев нагрев пропорционален квадрату продольного тока, $\propto I^2$, что приводит к отклику на второй гармонике при



Рис. 3. (В цвете онлайн) Компоненты xx и xy напряжения на второй гармонике в отсутствие магнитного поля для трех различных образцов. Продольное напряжение $V_{2\omega}^{xy}$ пренебрежимо мало, а поперечное (холловское) $V_{2\omega}^{xy}(I_{ac})$ составляет до 1 мкВ в одном и том же диапазоне переменного тока для двух разных образцов. Нижняя вставка подтверждает строго квадратичную зависимость $V_{2\omega}^{xy} \propto I^2$ для одной из кривых основного графика. На верхней вставке приведены температурные зависимости величины $V_{2\omega}^{xy}$ в интервале температур (1.2–4.2) К для другого (третьего) образца, видно, что зависимости также являются квадратичными ($\propto I^2$)

нагреве переменным током. В геометрии эксперимента градиент температуры между датчиками напряжения на рис. 1 сильно подавлен. Поскольку для наших образцов джоулев нагрев происходит, в основном, на контактах исток-сток, не следует ожидать какой-либо значительной примеси от эффекта Зеебека. С другой стороны, наличие перпендикулярного магнитного поля в данной экспериментальной геометрии приводит к появлению квадратичной поправки к коэффициенту Зеебека [44, 45], в то же время напряжение НЭХ на второй гармонике демонстрирует зависимость нечетного типа от перпендикулярного магнитного поля [26]. Таким образом, измерения в присутствии магнитного поля позволяют отличить эффект НЭХ от термоэлектрического отклика [26]. Мы хотим отметить, что эффект Нернста также не может вносить вклад в отклик поперечной составляющей напряжения, так как в данной геометрии эксперимента он должен измеряться вдоль линии тока.

Из вида зависимости от магнитного поля следует, что сигнал $V_{2\omega}^{xy}$ действительно свидетельствует о проявлении нелинейного эффекта Холла. На рис. 4



Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости $V^{xy}_{2\omega}(B)$ с явно выраженным нечетным поведением относительно знака магнитного поля для случаев параллельной и перпендикулярной ориентации магнитного поля. Кривые состоят из двух линейных ветвей в сильных положительных и отрицательных магнитных полях и плоской области вокруг нулевого значения поля. Для перпендикулярного магнитного поля сигнал $V^{xy}_{2\omega}(B)$ подтверждает нелинейное происхождение эффекта Холла $V^{xy}_{2\omega}$. Удивляет, что качественно аналогичная явно нечетная зависимость $V^{xy}_{2\omega}(B)$ имеет место и для параллельного магнитного поля, в случае которого, по-видимому, наблюдается планарный нелинейный эффект Холла

показана сильная нечетная зависимость $V_{2\omega}^{xy}(B)$ в перпендикулярном магнитном поле. Кривая состоит из двух линейных ветвей для сильных положительных и отрицательных магнитных полей и плоской области вблизи нулевого значения поля. Таким образом, сигнал $V_{2\omega}^{xy}$ чувствителен к знаку магнитного поля — он пересекает нуль при положительном значении B = 1.5 Тл. Это поведение очень похоже на поведение вейлевского полуметалла WTe₂ [26] и подтверждает происхождение эффекта НЭХ для сигнала $V_{2\omega}^{xy}$. Кроме того, численные значения сигнала $V_{2\omega}^{xy}$ на рис. 3 и 4 намного выше (на один порядок), чем это было продемонстрировано для полуметаллов Вейля и Дирака [26] в той же экспериментальной геометрии.

Удивительно, что для магнитных полей параллельной ориентации наблюдается качественно аналогичная сильная нечетная зависимость сигнала $V_{2\omega}^{xy}$. Несмотря на то, что красная кривая на рис. 4 не меняет полярности, она также состоит из двух сублинейных ветвей с широкой плоской областью между ними. Для этого случая экспериментально наблюдаемый планарный эффект Холла [29–32] может быть связан только со спектром в топологических системах [33–35].

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, для кирального топологического полуметалла CoSi продемонстрировано проявление сигнала HЭХ, по крайней мере, на порядок более высокого, чем для полуметаллов Вейля и Дирака [26] для той же геометрии эксперимента. Зависимость от магнитного поля позволяет не только исключить возможную примесь термоэлектрического отклика, но и свидетельствует о проявлении нового планарного нелинейного эффекта Холла.

При наличии симметрии относительно обращения времени в линейном отклике холловский ток отсутствует. Это подтверждается в работах [10–23], в которых говорится, что нелинейный холловский ток может возникать из кривизны Берри в импульсном пространстве. В упрощенном виде, переменный ток вызывает намагничивание образца, что в отсутствие внешнего магнитного поля приводит к аномальному эффекту Холла [46]. Последний проявляется как напряжение Холла на второй гармонике, амплитуда которого пропорциональна квадрату тока смещения. Поскольку кривизна Берри действует аналогично магнитному полю в импульсном пространстве, напряжение НЭХ линейно в перпендикулярном внешнем магнитном поле [26]. Другой возможный вклад в нелинейный эффект Холла — это рассеяние на немагнитных примесях в нецентросимметричных материалах [47], инвариантных к обращению времени, однако эти механизмы едва ли можно различить экспериментально.

По сравнению с измерениями НЭХ для полуметаллов Вейля и Дирака [24–27], мы наблюдаем на порядок более высокие значения поперечной составляющей напряжения на второй гармонике для образцов аналогичных размеров, см. рис. 2. Это должно отражать особенности спектра в топологическом киральном полуметалле CoSi со значительной кривизной Берри из-за большого разделения киральных узлов в импульсном пространстве [4,5]. Последний факт также может быть ответственным за широкую плоскую область в зависимости $V_{2\omega}^{xy}(B)$ на рис. 4: чтобы можно было наблюдать отклик образца, внешнее поле должно превышать эффективное (индуцируемое кривизной Берри).

Приведенные выше соображения очевидны только в магнитных полях, ориентированных перпендикулярно плоскости образца. Для магнитного поля, ориентированного параллельно плоскости образца, наоборот, нельзя ожидать простого холловского вклада.

Для полей, ориентированных параллельно плоскости образца, экспериментально наблюдаемый планарный эффект Холла [29-32] может проявляться только в топологических системах [33–35]. Для отклика на второй гармонике в параллельном поле киральная аномалия также вносит вклад в холловские токи [48], в дополнение к ранее обсуждавшемуся вкладу кривизны Берри. Другими словами, планарный НЭХ можно рассматривать как комбинацию аномальной скорости (из-за конечной кривизны Берри) и киральной аномалии в параллельных электрическом и магнитном полях. Вклад киральной аномалии в генерацию второй гармоники в низшем порядке линейно зависит от приложенного магнитного поля [48], поэтому для параллельного поля можно ожидать появления поправки к зависимости $V_{2\omega}^{xy}(B)$, пропорциональной первой степени В. Подобно обычному НЭХ [47], этот результат может быть получен для искаженной (перекошенной, skewed) дисперсии энергии вокруг пар узлов Вейля [49], т. е. он не обязательно связан с наличием конечной кривизны Берри [49]. Кроме того, можно предсказать, что нелинейный планарный эффект Холла возникает из-за генерации поперечного чистого спинового тока, возникающего во втором порядке электрического поля из-за симметричного искажения 2D-контура Ферми, который может быть преобразован в нелинейный ток Холла путем приложения магнитного поля, параллельного плоскости образца и сонаправленного с ориентацией спина поперечного нелинейного спинового тока [28].

Таким образом, наши результаты, представленные на рис. 4, следует рассматривать как экспериментальное подтверждение наличия сильного планарного НЭХ в киральном топологическом полуметалле CoSi, при этом различить возможные механизмы [28, 48, 49] эффекта мы не можем.

5. ВЫВОДЫ

Таким образом, проведенное экспериментальное исследование зависимости поперечной составляющей переменного напряжения на второй гармонике от переменного электрического тока для кирального топологического полуметалла CoSi для различных ориентаций магнитного поля позволяет сделать следующие выводы. 1. В отсутствие магнитного поля наблюдаемый отклик квадратично зависит от продольного электрического тока, что характерно для нелинейного эффекта Холла в топологических полуметаллах.

2. При наличии внешнего магнитного поля, независимо от его ориентации относительно плоскости образца, холловское напряжение на второй гармонике демонстрирует зависимость нечетного типа. Если магнитное поле перпендикулярно плоскости образца, то возможный вклад термоэлектрических эффектов можно исключить, тогда отклик поперечной составляющей напряжения на второй гармонике действительно возникает из-за нелинейного эффекта Холла. Если внешнее магнитное поле параллельно плоскости образца, то наблюдается зависимость нечетного типа, что свидетельствует о наличии планарного нелинейного эффекта Холла.

Благодарности. Авторы выражают благодарность В. Т. Долгополову за плодотворные обсуждения и С. С. Хасанову за исследование рентгеновских характеристик образцов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках Государственного задания РФ.

ЛИТЕРАТУРА

- N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, Rev. Mod. Phys. 90, 015001 (2018).
- P. K. Das, D. D. Sante, I. Vobornik, J. Fujii, T. Okuda, E. Bruyer, A. Gyenis, B. E. Feldman, J. Tao, R. Ciancio, G. Rossi, M. N. Ali, S. Picozzi, A. Yadzani, G. Panaccione, and R. J. Cava, Nature Comm. 7, 10847 (2016).
- B. Feng, Y.-H. Chan, Y. Feng, R.-Y. Liu, M.-Y. Chou, K. Kuroda, K. Yaji, A. Harasawa, P. Moras, A. Barinov, W. Malaeb, C. Bareille, T. Kondo, S. Shin, F. Komori, T.-C. Chiang, Y. Shi, and I. Matsuda, Phys. Rev. B 94, 195134 (2016).
- B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M. G. Vergniory, C. Felser, R. J. Cava, and B. A. Bernevig, Science 353, aaf5037 (2016).
- Peizhe Tang, Quan Zhou, and Shou-Cheng Zhang, Phys. Rev. Lett. **119**, 206402 (2017).
- N. B. Schröter, D. Pei, M. G. Vergniory, Y. Sun, K. Manna, F. de Juan, J. A. Krieger, V. Süss, M. Schmidt, P. Dudin, B. Bradlyn, T. K. Kim, Th. Schmitt, C. Cacho, C. Felser, V. N. Strocov, and Y. Chen, Nature Phys. 15, 759 (2019).

- 7. Zhicheng Rao, Hang Li, Tiantian Zhang, Shangjie Tian, Chenghe Li, Binbin Fu, Cenyao Tang, Le Wang, Zhilin Li, Wenhui Fan, Jiajun Li, Yaobo Huang, Zhehong Liu, Youwen Long, Chen Fang, Hongming Weng, Youguo Shi, Hechang Lei, Yujie Sun, Tian Qian and Hong Ding, Nature 567, 496 (2019).
- Daichi Takane, Zhiwei Wang, Seigo Souma, Kosuke Nakayama, Takechika Nakamura, Hikaru Oinuma, Yuki Nakata, Hideaki Iwasawa, Cephise Cacho, Timur Kim, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Takashi Takahashi, Yoichi Ando, and Takafumi Sato, Phys. Rev. Lett. **122**, 076402 (2019).
- N. B. M. Schröter, S. Stolz, K. Manna, F. de Juan, M. G. Vergniory, J. A. Krieger, D. Pei, Th. Schmitt, P. Dudin, T. K. Kim, C. Cacho, B. Bradlyn, H. Borrmann, M. Schmidt, R. Widmer, V. N. Strocov, and C. Felser, Science **369**, 179 (2020).
- I. Sodemann and L. Fu, Phys. Rev. Lett. 115, 216806 (2015).
- T. Low, Y. Jiang, and F. Guinea, Phys. Rev. B 92, 235447 (2015).
- Y. Zhang, J. van den Brink, C. Felser, and B. Yan, 2D Materials 5, 044001 (2018).
- Z. Z. Du, C. M. Wang, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, Phys. Rev. Lett. 121, 266601 (2018).
- 14. Z. Z. Du, C. M. Wang, S. Li, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, Nature Commun. 10, 3047 (2019).
- 15. C. Xiao, Z. Z. Du, and Q. Niu, Phys. Rev. B 100, 165422 (2019).
- 16. S. Nandy and I. Sodemann, Phys. Rev. B 100, 195117 (2019).
- 17. H. Wang and X. Qian, npj Comput. Mater. 55, 1 (2019).
- 18. B. T. Zhou, C.-P. Zhang, and K. T. Law, Phys. Rev. App. 13, 024053 (2020).
- 19. H. Rostami and V. Jurićić, Phys. Rev. Res. 2, 013069 (2020).
- 20. D.-F. Shao, S.-H. Zhang, G. Gurung, W. Yang, and E. Y. Tsymbal, Phys. Rev. Lett. 124, 067203 (2020).
- 21. S. Singh, J. Kim, K. M. Rabe, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. 125, 046402 (2020); https://doi.org/ 10.1103/PhysRevLett.125.046402.
- 22. M. W.-Y. Tu, C. Li, H. Yu, and W. Yao, 2D Mater. (2020); https://doi.org/10.1088/2053-1583/ab89e8.
- 23. Z. Z. Du, C. M. Wang, Hai-Peng Sun, Hai-Zhou Lu, and X. C. Xie, arXiv:2004.09742 (2020).

- 24. Q. Ma, S.-Y. Xu, H. Shen, D. MacNeill, V. Fatemi, T.-R. Chang et al., Nature 565, 337 (2019).
- 25. K. Kang, T. Li, E. Sohn, J. Shan, and K. F. Mak, Nature Mater. 18, 324 (2019).
- 26. O. O. Shvetsov, V. D. Esin, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, JETP Lett. 109, 715 (2019); https://doi.org/10.1134/ S0021364019110018.
- 27. A. Tiwari, F. Chen, Sh. Zhong, E. Drueke, J. Koo, A. Kaczmarek, C. Xiao, J. Gao, X. Luo, Q. Niu, Y. Sun, B. Yan, L. Zhao, and A. W. Tsen, Nat. Commun. 12, 2049 (2021); https://doi.org/10.1038/ s41467-021-22343-5.
- 28. Pan He, S. S.-L. Zhang, Dapeng Zhu, Shuyuan Shi, O. G. Heinonen, G. Vignale, and Hyunsoo Yang, Phys. Rev. Lett. 123, 016801 (2019).
- 29. N. Kumar, S. N. Guin, C. Felser, and C. Shekhar, Phys. Rev. B 98, 041103 (2018).
- 30. F. C. Chen, X. Luo, J. Yan, Y. Sun, H. Y. Lv, W. J. Lu, C. Y. Xi, P. Tong, Z. G. Sheng, X. B. Zhu, W. H. Song, and Y. P. Sun, Phys. Rev. B 98, 041114 (2018).
- 31. D. D. Liang, Y. J. Wang, W. L. Zhen, J. Yang, S. R. Weng, X. Yan, Y. Y. Han, W. Tong, W. K. Zhu, L. Pi, and C. J. Zhang, AIP Adv. 9, 055015 (2019).
- 32. P. Li, C. Zhang, Y. Wen, L. Cheng, G. Nichols, D. G. Cory, G.-X. Miao, and X.-X. Zhang, Phys. Rev. B 100, 205128 (2019).
- 33. A. A. Burkov, Phys. Rev. B 96, 041110 (2017).
- 34. S. Nandy, G. Sharma, A. Taraphder, and S. Tewari, Phys. Rev. Lett. 119, 176804 (2017).
- 35. D. Ma, H. Jiang, H. Liu, and X. C. Xie, Phys. Rev. B 99, 115121 (2019).
- 36. O. O. Shvetsov, V. D. Esin, Yu. S. Barash, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, Phys. Rev. B 101, 035304 (2020); https://doi.org/10.1103/ PhysRevB.101.035304.
- 37. O. O. Shvetsov, V. D. Esin, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, Phys. Rev. B 99, 125305 (2019); https://doi.org/10.1103/ PhysRevB.99.125305.

- 38. D. S. Wu, Z. Y. Mi, Y. J. Li, W. Wu, P. L. Li, Y. T. Song, G. T. Liu, G. Li, and J. L. Luo, Chinese Phys. Lett. 36, 077102 (2019).
- 39. O. O. Shvetsov, A. Kononov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, JETP Lett. 107, 774 (2018); https://doi.org/10.1134/ S0021364018120020.
- 40. O. O. Shvetsov, A. Kononov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, Eur. Phys. Lett. **124**, 47003 (2018); https://doi.org/10.1209/ 0295-5075/124/47003.
- 41. A. Kononov, O. O. Shvetsov, S. V. Egorov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, Eur. Phys. Lett. **122**, 27004 (2018); https://doi.org/ 10.1209/0295-5075/122/27004.
- 42. C. Fu, Th. Scaffidi, J. Waissman, Y. Sun, R. Saha, S. J. Watzman, A. K. Srivastava, G. Li, W. Schnelle, P. Werner, M. E. Kamminga, S. Sachdev, S. S. P. Parkin, S. A. Hartnoll, C. Felser, and J. Gooth, arXiv: 1802.09468.
- 43. Tong Zhou, Cheng Zhang, Huisheng Zhang, Faxian Xiu, and Zhongqin Yang, Inorg. Chem. Front. 3, 1637 (2016).
- 44. R. Lundgren, P. Laurell, and G. A. Fiete, Phys. Rev. B 90, 165115 (2014); https://doi.org/10.1103/ PhysRevB.90.165115.
- 45. K. Das and A. Agarwal, Phys. Rev. B 100, 085406 (2019); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100. 085406.
- 46. N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, Revi. Mod. Phys. 82, 1539 (2010).
- 47. Hiroki Isobe, Su-Yang Xu, and Liang Fu, Sci. Adv.
 6, eaay2497 (2020); https://doi.org/10.1126/sciadv. aay2497.
- 48. A. A. Zyuzin and A. Yu. Zyuzin, Phys. Rev. B 95, 085127 (2017); https://doi.org/10.1103/PhysRevB. 95.085127.
- 49. Rui-Hao Li, O. G. Heinonen, A. A. Burkov, and S. S.-L. Zhang, Phys. Rev. B 103, 045105 (2021).

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 160 ЗА 2021 г.

Вып. Стр.

\mathbf{A}

Антипов М. В. (см. Огородников В. А.)	11	621
Арапова И. Ю. (см. Оглобличев В. В.)	11	661
Аринин В. А. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Астапенко В. А., Розми Ф. Б.,		
Сахно Е. В. Динамика временной эволю-		
ции возбуждения квантового осциллятора		
электромагнитными импульсами	8	155

Б

Бабенко П. Ю. (см. Михайлов В. С.)	12	794
Бакулин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е. Изучение диффузионных свойств кислорода в TiO ₂	8	206
Балакин Д. А., Белинский А. В. Ди- фракционная структура квантовых фан- томных изображений	7	35
Бао-Чхэн Хоу (см. Хуа-Цзюнь Чен)	11	631
Баранцев К. А., Курапцев А. С., Лит- винов А. Н. Особенности совместного влияния движения атомов и сверхтонко- го расщепления возбужденного состояния на форму резонанса когерентного плене- ния населенностей в разреженном газе.	11	611
Башаров А. М., Трубилко А. И. Ко- оперативное излучение как субординиро- ванный случайный процесс	8	175
Башаров А. М., Трубилко А. И. О воз- можности сохранения возбуждения в ан- самбле одинаковых осцилляторов	12	865
Башаров А. М., Трубилко А. И. Про- цессы второго порядка в излучении ан- самбля квантовых осцилляторов	10	498
Беленков Е. А. (см. Грешняков В. А.) .	12	873
Белик А. А. (см. Соболев А. В.)	7	62
Белинский А. В. (см. Балакин Д. А.) .	7	35

Вып. Стр.

Беляев В. С., Загреев Б. В., Кедров А. Ю., Кольчугин А. Г., Крайнов В. П., Матафонов А. П. Экспериментальное и теоретическое исследование распространения пучков протонов под действием лазерного излучения с учетом		
нересоединения магнитных силовых ли-	10	474
Бликов А. О. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Бликов А. О. (см. Огородников В. А.) .	11	621
Блинов И. А. (см. Огородников В. А.) .	11	621
Бобров Н. Л. Восстановление функ- ции электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводниках с помощью неодно- родных микроконтактов и коррекция фо- на в сцектрах Янсона	7	73
Бражников Л В (см. Михайнов А М.)	' 12	818
Будо Р. (см. Михайлов А. М.)	12	818
Будылин А. М., Коптелов Я. Ю., Ле- вин С. Б. О реакции развала в трехчас- тичных кулоновских системах с приложе- нием к описанию процессов диссоциатив- ной рекомбинации и перезарядки в анти-		
протонной физике	9	372
Бузлуков А. Л. (см. Оглобличев В. В.)	11	661
Буравлёв А. Д. (см. Герчиков Л. Г.)	8	197
Быченков В. Ю. (см. Метельский И. И.)	8	283

В

Варнаков С. Н. (см. Максимова О. А.)	11	678
Васильев А. Л. (см. Фадеев Е. А.)	12	903
Васундхара М. (см. Шредер Е. И.)	10	546
Вещунов М. С. К теории двумерного		
гомогенного зарождения зародышей на		
плотноупакованных гранях кристаллов,		
растущих из паровой фазы	10	520
Воротилин В. П. О механизме турбулент-		
ных течений со сдвигом. Турбулентный		
пограничный слой	10	587

Воротынов А. М., Панкрац А. И.,		Долбак А. Е., Жачук Р. А. Деформа-		
Колков М. И. Исследование одноион-		ция межатомных связей в верхних сло-		
ной магнитной анизотропии иона Fe ³⁺ ме-		ях поверхности $Ge(111)$ со структурами	7	
тодом 911Р в диамагнитном кристалле PbGaBO ₄ 11	670	$c(2 \times 8), t \times t \text{ if } 5 \times 5 \dots$	(00
Вронский М. А., Косяков Б. П., По-		Долгов А. (см. Чаудхури А.)	11	643
пов Е. Ю. Как обнаружить легчайший		Дынников И. А., Мальцев А. Я. Осо-		
глюбол 8	188	мов в квазипериодических потенциалах	12	835
Γ		${f E}$		
Гейвандов А. Р. (см. Палто С. П.) 8	223			
Георгиевская А. Б. (см. Огородни-		Егоров М. В., Постников В. И. Элект-	7	49
ков В. А.) 11	621	EDVHOR C B (cm MONATOR M A)	' 11	735
Герчиков Л. Г., Дашков А. С., Го-		Ерунов С. В. (см. Огородников В. А.)	11	621
ботка дизайна сверхмногопериодных из-		Есин В. Л., Тимонина А. В., Колес-		0-1
лучающих структур терагерцевого диапа-		ников Н. Н., Девятов Э. В. Нелиней-		
зона, выращиваемых методом молекуляр-	107	ный планарный эффект Холла в кираль-	10	
$\mathbf{F}_{\mathbf{H}_{2},\mathbf{K}_{2$	197 62	ном топологическом полуметалле CoSi .	12	928
Гончарова Е. В. (см. Макаров А. С.)	213	Ж		
Горай Л. И. (см. Герчиков Л. Г.)	197		-	
Грановский А. Б. (см. Фадеев Е. А.) 12	903	Жачук Р. А. (см. Долоак А. Е.)	1	55
Грешняков В. А., Беленков Е. А.		Жиляев Д. А., Смирнов Б. М. Закон Кирхгофа в излучении смеси молекуляр-		
Структура, электронные свойства и устой-		ных газов	12	807
чивость углеродных бислоев из атомов в	873	Жиляева Е. И. (см. Любовский Р. Б.) .	7	126
\mathbf{F} риценко В А (см. Новиков Ю Н.) 10	565	n		
Грязнов В. К. (см. Мочалов М. А.) 11	735	3		
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		Загреев Б. В. (см. Беляев В. С.)	10	474
Д		Замыслов Д. Н. (см. Огородников В. А.)	11	621
Давыдов Н. Б. (см. Огородников В. А.) 11	621	Зверев В. Н. (см. Любовский Р. Б.)	7	126
Даш Шубра (см. Шредер Е. И.) 10	546	Зиновьев А. Н. (см. Михайлов В. С.)	12	794
Дашков А. С. (см. Герчиков Л. Г.) 8	197	И		
Девятов Э. В. (см. Есин В. Д.) 12	928	¥1		
Делибашич Х. С. (см. Петрович В. М.) 7	5	И В. (см. Соболев А. В.)	7	62
Джавед Ф. (см. Шариф М.) 10	508	Илькаев Р. И. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Дзебисашвили Д. М. (см. Кома-	415	Иосилевский И. Л. (см. Мочалов М. А.)	11	735
	419	Ипатов А. Н., Паршин Д. А., Ко-		
лецкий А. М. Исследование процессов		нюх Д. А. Дисперсия изгибных мод в		

936

426

9

формирования наноконтактов Pt-Cu при

погружении иглы сканирующего туннель-

ного микроскопа в поверхностный сплав Pt-Cu методом компьютерного моделиро-

вания

\mathbf{K}

Казей З. А., Снегирев В. В., Столя-		
ренко М. С. Фазовые переходы в фруст-		
рированных кобальтитах $ErBaCo_4O_{7+x}$		
(x = 0-0.06) при небольшом отклонении		
от стехиометрии	11	689
Кассан-Оглы Ф. А. (см. Цуварев Е. С.)	8	232
Кедров А. Ю. (см. Беляев В. С.)	10	474
Кешишев К. О., Марченко В. И., По-		
доляк Е. Р. Предкритическая термоаку-		
стика в гелии	12	922
Клавсюк А. Л. (см. Сыромятни-		
ков А. Г.)	9	410
Князев В. Н. (см. Огородников В. А.) .	11	621
Кобелев Н. П. (см. Макаров А. С.)	8	213
Ковалев А. Е. (см. Огородников В. А.)	11	621
Ковалев В. Ф. (см. Метельский И. И.) .	8	283
Козловский А. В. Соотношения неопре-		
деленностей для тригонометрических опе-		
раторов разности фаз квантовых электро-	10	
магнитных полей	12	774
Колесников Н. Н. (см. Есин В. Д.)	12	928
Колесников С. В. (см. Докукин С. А.)	9	426
Колков М. И. (см. Воротынов А. М.)	11	670
Кольчугин А. Г. (см. Беляев В. С.)	10	474
Комаров К. К., Дзебисашвили Д. М.		
Происхождение точки перегиба на темпе-		
ратурной зависимости лондоновской глу-		
бины в дырочно-легированных купратных	0	41 8
высокотемпературных сверхпроводниках	9	415
Комраков В. А. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Кондратенко П. С., Леонов К. В.		
Неклассические процессы переноса приме-		
си в резко контрастнои среде в присут-		
ствии одиночной крупномасштаоной неод-	12	898
KOHOV Π A (CM ИПЕТОР A H)	10	534
KORTOROB S IO (CM EVELUTION A M)	0	379
Koncersi O B Zavous werenew vo	3	512
поритонного типа иля четыреууровневых		
атомов с неэквилистантным энергетичес-		
ким спектром, взаимолействующих с тре-		
мя импульсами лазерного излучения	9	307
Котин А. В. (см. Огородников В. А.)	11	621
Кочубей С. А. (см. Рубцова Н. Н.)	10	466
Крайнов В. П. (см. Беляев В. С.)	10	474

Кудряшов С. А. (см. Сыромятни- ков А. Г.)	9	410
Кузьмин Ю. И. (см. Шредер Е. И.)	10	546
Кулаков Е. В. (см. Огородников В. А.)	11	621
Кулеева Н. А. (см. Кучинский Э. З.)	9	434
Кулькова С. Е. (см. Бакулин А. В.)	8	206
Курапцев А. С. (см. Баранцев К. А.)	11	611
Кучинский Э. З., Кулеева Н. А. Электрон-фононная перенормировка мас- сы в металле за пределами адиабатическо-		
го приближения	9	434

Л

Лавриненко Я. С. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Лазарев В. В. (см. Палто С. П.)	8	223
Лахдеранта Е. (см. Фадеев Е. А.)	12	903
Лебедева М. В. (см. Метелкин Е. В.)	8	167
Левашов П. Р. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Левин С. Б. (см. Будылин А. М.)	9	372
Леонов К. В. (см. Кондратенко П. С.) .	12	898
Литвинов А. Н. (см. Баранцев К. А.)	11	611
Лобанов А. Е., Чухнова А. В. Асим- метрия распространения левополяризо- ванных нейтрино в неоднородном магнит- ном поле	10	595
Лукоянов А. В. (см. Шредер Е. И.)	10	546
Любовская Р. Н. (см. Любов- ский Р. Б.)	7	126
Любовский Р. Б., Песоцкий С. И., Зверев В. Н., Жиляева Е. И., Флаки- на А. М., Любовская Р. Н. Влияние давления на межслоевой перенос заряда и электронную структуру металлических		
слоев в двухслоином двумерном органиче- ском металле (BETS) ₄ CoBr ₄ (DCB)	7	126
Лященко С. А. (см. Максимова О. А.) .	11	678

\mathbf{M}

Макаров А. С., Гончарова Е. В.,		
Цзиао Ц. Ч., Кобелев Н. П., Хо-		
ник В. А. Энергетические измене-		
ния релаксационной природы в высоко-		
энтропийных объемных аморфных спла-		
вах	8	213

Макаров Г. Н. Схемы и параметры резонансного двухфотонного возбуждения колебательных состояний 2 ν_3 молекул UF ₆ бихроматическим лазерным ИК-излучением 12 786	Молотков С. Н. Побочные каналы утеч- ки информации в квантовой криптогра- фии: не строго однофотонные состояния, разные квантовые эффективности детек- торов, конечные передаваемые последова-
Максимкин И. П. (см. Мочалов М. А.) 11 735	тельности
Максимова О. А., Лященко С. А., Варнаков С. Н., Овчинников С. Г.	Момье Р. (см. Саргсян А.) 10 483 Морозов И. В. (см. Мочалов М. А.) 11 735
Магнитооптический параметр <i>Q</i> для структур с одноосной оптической анизот- ропией	Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Ерунов С. В., Ари- нин В. А., Бликов А. О., Комра- ков В. А. Максимкин И. П. Ого-
Мальцев А. Я. (см. Дынников И. А.) 12 835	родников В. А., Рыжков А. В., Гряз-
Мальцев А. Я. Особенности осцилляци- онных явлений при перестройках тополо- гической структуры электронных траек- торий на сложных поверхностях Ферми 11 699	нов В. К., Иосилевский И. Л., Лева- шов П. Р., Лавриненко Я. С., Моро- зов И. В., Минаков Д. В., Парамо- нов М. А., Шутов А. В. Сжимаемость неидеальной плазмы дейтерия и гелия до
Марченко В. И. (см. Кешишев К. О.) . 12 922	20 TПа 11 735
Матафонов А. П. (см. Беляев В. С.) 10 474	Муртазаев А. К. (см. Мутайламов В. А.) 7 119
Матухин В. Л. (см. Оглобличев В. В.) 11 661	Фазовая диаграмма и основное состояние
Махнев А. А. (см. Шредер Е. И.) 10 546	декорированной модели Изинга на куби- ческой решетке
	1
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой 7 95	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой 7 95 Метелкин Е. В., Лебедева М. В.	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем-
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы-
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях
Меньшенин В. В. Распространение зву- ка в области фазового перехода в магни- тоупорядоченную фазу в средах с тетра- гональной структурой	Н Новиков М. Г. (см. Огородников В. А.) 11 621 Новиков Ю. Н., Гриценко В. А. Транс- порт заряда в аморфном нитриде крем- ния 10 565 О Овчинников С. Г. (см. Максимова О. А.) 11 678 Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М. Электронные свойства NiO при сверхвы- соких давлениях

Огородников В. А. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Огородников В. А., Ерунов С. В.,		
Бликов А. О., Кулаков Е. В., Чу-		
даков Е. А., Антипов М. В., Па-		
нов К. Н., Сырунин М. А., Кня-		
зев В. Н., Давыдов Н. Б., Георги-		
евская А. Б., Яговкин А. О., Юр-		
тов И. В., Замыслов Д. Н., Ко-		
валев А. Е., Котин А. В., Бли-		
нов И. А., Новиков М. Г. Эф-		
фект ударно-индуцированного «пыления»		
и способы его подавления	11	621
Огородников И. Н. Влияние флукту-		
ационного разупорядочения решетки на		
термостимулированный перенос энергии		
электронных возбуждений	9	393
Орешко А. П. Компоненты нового ти-		
па в сечении рассеяния рентгеновского		
излучения веществом	10	459

Π

Палто С. П., Лазарев В. В., Гей-		
вандов А. Р., Юдин С. Г. Биста-		
бильность фотоэлектрического эффекта		
в пленках сегнетоэлектрического фул-		
лерен-фталоцианинового композиционно-	_	
го материала	8	223
Панкрац А. И. (см. Воротынов А. М.) .	11	670
Панов К. Н. (см. Огородников В. А.)	11	621
Папоян А. (см. Саргсян А.)	10	483
Парамонов М. А. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Паршин Д. А. (см. Ипатов А. Н.)	10	534
Патра Аджит К. (см. Шредер Е. И.)	10	546
Перов А. А., Пикунов П. В. Попереч-		
ный термомагнитный эффект в двумер-		
ном электронном газе поверхностной по-		
лупроводниковой сверхрешетки	8	275
Песоцкий С. И. (см. Любовский Р. Б.)	7	126
Петрович В. М., Делибашич Х. С.,		
Петрович И. Д. Скорость туннельной		
ионизации в сильном поле в теории пере-		
ходов Ландау–Дыхне	7	5
Петрович И. Д. (см. Петрович В. М.) .	7	5
Пех П. Л., Ратников П. В., Си-		
лин А. П. Фазовая диаграмма электрон-		
но-дырочной жидкости в монослойных ге-		
тероструктурах на основе дихалькогени-		
дов переходных металлов	10	572

Пикунов П. В. (см. Перов А. А.)	8	275
Пискунов Ю. В. (см. Оглобличев В. В.)	11	661
Подоляк Е. Р. (см. Кешишев К. О.)	12	922
Полетаев Г. М. Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al: молеку-		
лярно-динамическое моделирование	10	527
Попов Е. Ю. (см. Вронский М. А.)	8	188
Постников В. И. (см. Егоров М. В.)	7	42
Потылицын А. П., Шкитов Д. А. Цир-		
кулярно поляризованная компонента в из-		
лучении Смита-Парселла	12	763
Пресняков И. А. (см. Соболев А. В.)	7	62
Пхэн-Цзие Чжу (см. Хуа-Цзюнь Чен) .	11	631

\mathbf{P}

Ратников П. В. (см. Пех П. Л.)	10	572
Решетов В. А. (см. Рубцова Н. Н.)	10	466
Розми Ф. Б. (см. Астапенко В. А.)	8	155
Рубан В. П. Пузыри с присоединенными квантовыми вихрями в захваченных би- нарных бозе-конденсатах Рубцова Н. Н., Кочубей С. А., Хворо- стов Е. Б., Решетов В. А. Деполяри-	12	912
зующие столкновения атомов иттербия с атомами инертных газов	10	466
Рыжков А. В. (см. Мочалов М. А.)	11	735
Рыльков В. В. (см. Фадеев Е. А.)	12	903

\mathbf{C}

Савин А. В. Эффективное трение и по- движность графеновых наночастиц (нано- лент и нанотрубок) на плоской многослой- ной подложке h-BN	12	885
Савицкая Н. Е., Федорова Т. А. Дина- мические свойства модели формирования мнения в мультиагентной системе с изме- няющейся структурой связей в условиях		
информационного давления	11	714
Садыков А. Ф. (см. Оглобличев В. В.)	11	661
Саламатов Е. И., Таранов А. В., Ха- занов Е. Н. О возможности равновесия в системе фононы–низкоэнергетические возбуждения в условиях нестационарного процесса распространения теплового им- пульса в твердых диэлектриках при гелие-		
вых температурах	9	403

Салецкий А. М. (см. Докукин С. А.) 9	426	Трубилко А. И. (см. Башаров А. М.)	10	498
Салецкий А. М. (см. Сыромятни-		Трубилко А. И. (см. Башаров А. М.)	12	865
ков А. Г.)	410	Трубилко А. И. (см. Башаров А. М.)	8	175
Саргсян А., Момье Р., Папоян А.,		Ф		
скопия атомарных паров Сs в наноячейке		Ψ		
толщиной 400 нм при комнатной темпера-		Фадеев Е. А., Шахов М. А., Лах-		
туре 10	483	деранта Е., Талденков А. Н., Васи-		
Саргсян А., Тоноян А., Саркисян Д.		льев А. Л., Ситников А. В., Рыль-		
Применение магнито-индуцированных пе-		ков В. В., Грановский А. Б. Маг-		
реходов атомов ⁸⁹ Rb, D_2 -линии, в коге-	0.4	нитосопротивление магнитных наноком-		
рентных процессах (24	ных магнитных полях	12	903
Саркисян Д. (см. Саргсян А.) 10	483	Фелорова Т. А. (см. Савишкая Н. Е.)	11	714
Саркисян Д. (см. Саргсян А.) \dots (24	Фелосеев А. Л. Усновия реализации и		
Сахно Е. В. (см. Астапенко В. А.) 8	155	магнитополевая зависимость угловых воз-		
Силин А. П. (см. пех п. л.) $\dots 10$	572 002	буждений в топологическом изоляторе		
CUTHUKOB A. B. (CM. Ψ ageeb E. A.) 12	903 190	со сверхпроводящим спариванием на тре-	-	0.0
Скряюин Ю. Н. (см. Ирхин В. Ю.) 7	139	угольной решетке	7	88
Смирнов Б. М. (см. Жиляев Д. А.) 12	807	Флакина А. М. (см. Любовский Р. Б.) .	7	126
Смирнов І. В. Интерференция гамма-из-		Фортов В. Е. (см. Мочалов М. А.)	11	735
ядерном резонансном рассеянии 7	13	v		
Смольников А. Г. (см. Оглобли-		\mathbf{A}		
чев В. В.) 11	661	Хазанов Е. Н. (см. Саламатов Е. И.)	9	403
Снегирев В. В. (см. Казей З. А.) 11	689	Хворостов Е. Б. (см. Рубцова Н. Н.)	10	466
Соболев А. В., И В., Белик А. А.,		Хоник В. А. (см. Макаров А. С.)	8	213
Глазкова Я. С., Пресняков И. А. Ло-		Хуа-Цзюнь Чен, Юн-Лэй Чен, Пхэн-		
ные взаимолействия зонловых ялер ⁵⁷ Fe в		Цзие Чжу, Бао-Чхэн Хоу. Устойчивая		
хромите $TlCr_{0.95}^{57}Fe_{0.05}O_3$ 7	62	генерация боковой полосы второго поряд-		
Стегайлов В. В. (см. Шутикова М. И.) 8	249	ка в оптомеханической фотон-молекуляр-	11	621
Столяренко М. С. (см. Казей З. А.) . 11	689	ной системе с накачкой фононами	11	051
Суровцев Е. В. Потенциальное протека-		Ц		
ние сверхтекучего ³ Не через нематический			0	010
аэрогель сферической формы 10	553	Цзиао Ц. Ч. (см. Макаров А. С.)	8	213
Сыромятников А. Г., Кудряшов С. А.,		Цуварев Е. С., Кассан-Оглы Ф. А.		
Салецкии А. М., Клавсюк А. Л. Вли-		поле	8	232
ллины олномерных атомных структур 9	410		0	202
Сырунин М. А. (см. Огородников В. А.) 11	621	Ч		
T		Чаудхури А., Долгов А. Испадение пер-		
T		вичных черных дыр, барионная асиммет-		
Талденков А. Н. (см. Фадеев Е. А.) 12	903	рия и темная материя	11	643
Таранов А. В. (см. Саламатов Е. И.) 9	403	Чудаков Е. А. (см. Огородников В. А.)	11	621

Тоноян	А.	(см.	Саргсян	A.)	 	 	7	7

Тимонина А. В. (см. Есин В. Д.)

12 928

24

940

Чумакова Л. С. (см. Бакулин А. В.) ...

Чухнова А. В. (см. Лобанов А. Е.) 10 595

8

206
Ш		Ю			
Шариф М., Джавед Ф. Динамическая устойчивость гравастаров для случая ЧД ABG 10	508	Юдин С. Г. (см. Палто С. П.) Юн-Лэй Чен (см. Хуа-Цзюнь Чен) 1 Юртов И. В. (см. Огородников В. А.) 1	8 .1 .1	223 631 621	
Шахов М. А. (см. Фадеев Е. А.) 12	903	R			
Шергин А. П. (см. Михайлов В. С.) 12	794	Яговкин А. О. (см. Огородников В. А.) 1	.1	621	
Шкилев В. П. Транспортное уравнение для субдиффузии смешанного происхож- дения	107 763	B Benderskii V. A., Kats E. I. Non-trivial dynamic regimes of small (nano-scale) quan- tum systems	9	491 366	
даш Шуора, Патра Аджит К., Ба- сундхара М. Электронная структура и оптические свойства сплава Гейслера Mn _{1.5} Fe _{1.5} Al	546	К Каts E. I. (see Benderskii V. A.) 1 Косяков Б. П. (см. Вронский М. А.)	.0 8	491 188	
Шутикова М. И., Стегайлов В. В. Энергии образования вакансий кубичес-		Ν			
кой фазы магнетита в рамках DFT+U . 8 Шутов А. В. (см. Мочалов М. А.) 11	249 735	Neronov A., Gatelet Y. Gamma-rays and neutrinos from proton–proton interactions in gamma-ray bursts	9	366	

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 160 ЗА 2021 г.

Вып. Стр.

1. Атомы, молекулы, оптика	Предкритическая термоакустика в гелии.
1.1 Общие вопросы квантовой меха- ники	ляк Е. Р 12 922
Динамика временной эволюции возбужде- ния квантового осциллятора электромаг- нитными импульсами. Астапенко В. А.,	1.5 Столкновения атомов и молекул, источники излучения
<i>Розми Ф. Б., Сахно Е. В.</i>	Циркулярно поляризованная компонента в излучении Смита–Парселла. Потыли- цын А. П., Шкитов Д. А 12 763
шаров А. М., Грубилко А. И 12 865	Оже-переходы в квазимолекуле при столк- новении атомов неона в кэВ-диапазоне энергий Митайлов В. С. Бабенко П. Ю.
1.2 Квантовая информация и физика квантовых компьютеров	Шергин А. П., Зиновьев А. Н 12 794
Дифракционная структура квантовых фантомных изображений. Балакин Д. А., Белинский А. В	1.6 Взаимодействие фотонов, элект- ронов, атомов и молекул с конденси- рованными телами и поверхностями
квантовой криптографии: не строго од- нофотонные состояния, разные квантовые эффективности детекторов, конечные пе-	Интерференция гамма-излучения в спино- вом пространстве при ядерном резонанс- ном рассеянии. Смирнов Г. В 7 13
ков С. Н	Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энер- гии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. <i>Метелкин Е. В.</i> ,
фаз квантовых электромагнитных полеи. Козловский А. В 12 774	Лебедева М. В 8 167 Компоненты нового типа в сечении
1.3 Коллективные свойства холодных атомов и молекул (включая БЕК)	рассезния рентгеновского излучения ве- ществом. Орешко А. П 10 459 Экспериментальное и теоретическое иссле-
Особенности движения ультрахолодных атомов в квазипериодических потенциа- лах. Дынников И. А., Мальцев А. Я 12 835	дование распространения пучков прото- нов под действием лазерного излучения с учетом пересоединения магнитных сило- вых линий. Беляев В. С., Загреев Б. В., Кедров А. Ю., Кольчугин А. Г., Край-
1.4 Структура и динамика атомов и молекул	нов В. П., Матафонов А. П 10 474 Субдоплеровская спектроскопия атомар- ных паров Сs в наноячейке толшиной
Non-trivial dynamic regimes of small (na- no-scale) quantum systems. Bender- skii V. A., Kats E. I	400 нм при комнатной температуре. <i>Сарг</i> - сян А., Момъе Р., Папоян А., Сарки- сян Д 10 483

Вып. Стр.

Особенности совместного влияния движе- ния атомов и сверхтонкого расщепления возбужденного состояния на форму резо- нанса когерентного пленения населеннос- тей в разреженном газе. Баранцев К. А., <i>Курапцев А. С., Литвинов А. Н.</i> 11 611	Схемы и параметры резонансного двухфо- тонного возбуждения колебательных со- стояний 2 ν_3 молекул UF ₆ бихроматичес- ким лазерным ИК-излучением. <i>Мака- ров Г. Н.</i>
Эффект ударно-индуцированного «пыле- ния» и способы его подавления. Огород- ников В. А., Ерунов С. В., Бликов А. О., Кулаков Е. В., Чудаков Е. А., Анти- пов М. В., Панов К. Н., Сырунин М. А., Киагов В. Н. Ластидов Н. Б. Гарринов	в газе атомов щелочных металлов в по- ле встречных бихроматических лазерных пучков. Михайлов А. М., Будо Р., Браж- ников Д. В 12 818
ская А. Б., Яговкин А. О., Юртов И. В., Замыслов Д. Н., Ковалев А. Е., Ко-	1.8 Классическая электродинамика Линамика временной эволюции возбужле-
тин А. В., Блинов И. А., Новиков М. Г. 11 621 Устойчивая генерация боковой полосы вто- рого порядка в оптомеханической фо- тон-молекулярной системе с накачкой фо-	ния квантового осциллятора электромаг- нитными импульсами. Астапенко В. А., Розми Ф. Б., Сахно Е. В
нонами. Хуа-Цзюнь Чен, Юн-Лэй Чен, Пхэн-Цзие Чжу, Бао-Чхэн Хоу 11 631	самбля квантовых осцилляторов. Баша- ров А. М., Трубилко А. И 10 498
Закон Кирхгофа в излучении смеси моле- кулярных газов. Жиляев Д. А., Смир- нов Б. М 12 807	Магнитооптический параметр Q для струк- тур с одноосной оптической анизотропией. Максимова О. А., Лященко С. А., Варна- ков С. Н., Овчинников С. Г 11 678
1.7 Взаимодействие атомов и моле-	
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика	2. Ядра, частицы, поля, гравита- ция и астрофизика
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика Скорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. <i>Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет</i> -	 2. Ядра, частицы, поля, гравита- ция и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика Скорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. <i>Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет-</i> <i>рович И. Д.</i>	 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энергии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. Метелкин Е. В., Лебедева М. В
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика Скорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. <i>Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет-</i> <i>рович И. Д.</i>	 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энергии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. Метелкин Е. В., Лебедева М. В
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптикаСкорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. <i>Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет- рович И. Д.</i> 775Применение магнито-индуцированных пе- реходов атомов ⁸⁵ Rb, D2-линии, в ко- герентных процессах. Саргсян А., Тоно- ян А., Саркисян Д.724Кооперативное излучение как суборди- нированный случайный процесс. Баша- ров А. М., Трубилко А. И.83аконы дисперсии поляритонного типа для четырехуровневых атомов с неэквидис- тантным энергетическим спектром, взаи-	 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энергии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. Метелкин Е. В., Лебедева М. В
Кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптикаСкорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет- рович И. Д.775Применение магнито-индуцированных пе- реходов атомов 85 Rb, D2-линии, в ко- герентных процессах. Саргсян А., Тоно- ян А., Саркисян Д.724Кооперативное излучение как суборди- нированный случайный процесс. Баша- ров А. М., Трубилко А. И.83аконы дисперсии поляритонного типа для четырехуровневых атомов с неэквидис- тантным энергетическим спектром, взаи- модействующих с тремя импульсами ла- зерного излучения. Коровай О. В.9	 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энергии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. Метелкин Е. В., Лебедева М. В
кул с электромагнитным полем, кван- товая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптикаСкорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау – Дыхне. <i>Петрович В. М., Делибашич Х. С., Пет- рович И. Д.</i> 75Применение магнито-индуцированных пе- реходов атомов ⁸⁵ Rb, D2-линии, в ко- герентных процессах. Саргсян А., Тоно- ян А., Саркисян Д.724Кооперативное излучение как суборди- нированный случайный процесс. Баша- ров А. М., Трубилко А. И.8175Законы дисперсии поляритонного типа для четырехуровневых атомов с неэквидис- тантным энергетическим спектром, взаи- модействующих с тремя импульсами ла- зерного излучения. Коровай О. В.9307Деполяризующие столкновения атомов ит- тербия с атомами инертных газов. Рубцо-9	 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции Использование модельного уравнения Больцмана для анализа влияния энергии связи на развитие каскада выбитых атомов в твердом теле. Метелкин Е. В., Лебедева М. В

Энергетические изменения релакса- ционной природы в высокоэнтропий- ных объемных аморфных сплавах. Ма- каров А. С., Гончарова Е. В., Цзиао Ц. Ч., Кобелев Н. П., Хоник В. А 8 213 К теории двумерного гомогенного зарож- дения зародышей на плотноупакованных
гранях кристаллов, растущих из паровой фазы. Вещунов М. С 10 520
Самодиффузия в жидких и твердых спла- вах системы Ti–Al: молекулярно-динами- ческое моделирование. Полетаев Г. М 10 527
Структура, электронные свойства и устой- чивость углеродных бислоев из ато- мов в <i>sp</i> ³ -гибридизированных состояниях.
Грешняков В. А., Беленков Е. А 12 873 Эффективное трение и подвижность гра- феновых наночастиц (нанолент и нанотру- бок) на плоской многослойной подложке b BN <i>Сасии А. В.</i> 12 885
II-DIV. Cubur A. D 12 000
3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей
Влияние флуктуационного разупорядоче- ния решетки на термостимулированный перенос энергии электронных возбужде- ний Озоподиатов И. Н
О возможности равновесия в системе фо- ноны-низкоэнергетические возбуждения в
условиях нестационарного процесса рас- пространения теплового импульса в твер- дых диэлектриках при гелиевых темпера- турах. <i>Саламатов Е. И., Таранов А. В.</i> ,
Хазанов Е. Н
3.4 Квантовые жидкости и кристаллы
Потенциальное протекание сверхтекучего ³ Не через нематический аэрогель сфери- ческой формы. <i>Суровцев Е. В.</i> 10 553
3.5 Низкоразмерные системы (струк-
тура и т. д.)
Разработка дизайна сверхмногопериод- ных излучающих структур терагерцево- го диапазона, выращиваемых методом
молекулярно-пучковой эпитаксии. Герчи-

ский А. Б. 12 903

Влияние процесса нагрева и охлаждения на длины одномерных атомных структур. Сыромятников А. Г., Кудряшов С. А., Салецкий А. М., Клавсюк А. Л	Распространение звука в области фазово- го перехода в магнитоупорядоченную фа- зу в средах с тетрагональной структурой. <i>Меньшенин В. В.</i>	7	95
Non-trivial dynamic regimes of small (na- no-scale) quantum systems. Bender- skii V. A., Kats E. I. Дисперсия изгибных мод в графене. Ипа-	Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на куби- ческой решетке. Мутайламов В. А., Мур- тазаев А. К.	7	119
тов А. Н., Паршин Д. А., Конюх Д. А. 10 534 Эффективное трение и подвижность гра- феновых наночастиц (нанолент и нанотру- бок) на плоской многослойной подложке	Бистабильность фотоэлектрического эф- фекта в пленках сегнетоэлектрическо- го фуллерен-фталоцианинового компози-		
h-BN. <i>Савин А. В.</i> 12 885	ционного материала. Палто С. П., Лаза- рев В. В., Гейвандов А. Р., Юдин С. Г	8	223
4. Порядок, беспорядок и фазо-	Обобщенная модель Изинга в магнитном поле. Цуварев Е. С., Кассан-Оглы Ф. А.	8	232
вые переходы в конденсирован- ных средах	Энергии образования вакансий кубической фазы магнетита в рамках DFT+U. Шути- кова М. И., Стегайлов В. В	8	249
4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы	Электронная структура и оптические свой- ства сплава Гейслера Mn _{1.5} Fe _{1.5} Al. Шре-		
Транспортное уравнение для субдиффу- зии смешанного происхождения. Шки- лев В. П 7 107	дер Е. И., Лукоянов А. В., Махнев А. А., Кузъмин Ю. И., Даш Шубра, Пат- ра Аджит К., Васундхара М	10	546
Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на куби- ческой решетке. <i>Мутайламов В. А., Мур-</i> <i>тазаев А. К.</i>	Низкочастотная динамика носителей в по- лупроводнике CuAlO ₂ по данным ЯМР. Оглобличев В. В., Смольников А. Г., Буз- луков А. Л., Пискунов Ю. В., Арапо- ва И. Ю., Садыков А. Ф., Матухин В. Л.	11	661
да в TiO ₂ . Бакулин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е	Исследование одноионной магнитной ани- зотропии иона Fe ³⁺ методом ЭПР в диа- магнитном кристалле PbGaBO ₄ . Вороты- нов А. М., Панкрац А. И., Колков М. И.	11	670
ческое моделирование. <i>Полетиев 1. М.</i> 10 527 Неклассические процессы переноса приме- си в резко контрастной среде в присутст- вии одиночной крупномасштабной неод- нородности. <i>Кондратенко П. С., Лео</i> -	Магнитооптический параметр Q для струк- тур с одноосной оптической анизотропией. Максимова О. А., Лященко С. А., Варна- ков С. Н., Овчинников С. Г	11	678
нов К. В	Фазовые переходы в фрустрированных ко- бальтитах $ErBaCo_4O_{7+x}$ ($x = 0-0.06$) при небольшом отклонении от стехиометрии. <i>Казей З. А., Снегирев В. В., Столярен</i> - ко $M_{-}C$	11	680
4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлект-	Магнитосопротивление магнитных нано-	11	003
ричество	композитов вблизи порога перколяции в		
Локальная структура и сверхтонкие маг- нитные взаимодействия зондовых ядер ⁵⁷ Fe в хромите TlCr _{0.95} ⁵⁷ Fe _{0.05} O ₃ . Собо- лев А. В., И В., Белик А. А., Глазко-	сильных магнитных полях. Фадеев Е. А., Шахов М. А., Лахдеранта Е., Тал- денков А. Н., Васильев А. Л., Сит- ников А. В., Рыльков В. В., Гранов-		

62

7

ва Я. С., Пресняков И. А.

4.3 Сверхпроводимость и сверхтеку- честь	Электрон-фононная перенормировка мас- сы в металле за пределами адиабатическо- го приближения. Кучинский Э. З., Кулее-		
Восстановление функции электрон-фонон- ного взаимодействия в сверхпроводниках с помощью неоднородных микроконтак- тов и коррекция фона в спектрах Янсона.	ва Н. А	9 9	434 443
Бобров Н. Л 7 73 Условия реализации и магнитополевая за- висимость угловых возбуждений в тополо-	Транспорт заряда в аморфном нитриде кремния. Новиков Ю. Н., Гриценко В. А.	10	565
гическом изоляторе со сверхпроводящим спариванием на треугольной решетке. Фе- досеев А. Д 7 88	Фазовая диаграмма электронно-дырочной жидкости в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переход-		
Происхождение точки перегиба на температурной зависимости лондоновской глубины в лырочно-перированных купратных	ных металлов. Пех П. Л., Ратников П. В., Силин А. П Особенности осцилляционных явлений при	10	572
высокотемпературных сверхпроводниках. Комаров К. К., Дзебисашвили Д. М 9 415	перестройках топологической структуры электронных траекторий на сложных по-	11	699
Потенциальное протекание сверхтекучего ³ Не через нематический аэрогель сфери- ческой формы. <i>Суровцев Е. В.</i> 10 553	Структура, электронные свойства и устой- чивость углеродных бислоев из ато-	11	000
Пузыри с присоединенными квантовыми вихрями в захваченных бинарных бо-	мов в <i>sp</i> ³ -гибридизированных состояниях. Грешняков В. А., Беленков Е. А Нелинейный планарный эффект Холла в	12	873
зе-конденсатах. <i>Руоцн Б. П.</i> 12 912	киральном топологическом полуметалле CoSi. Ecun B. Д., Тимонина А. В., Колес- ников Н. Н., Девятов Э. В	12	928
5. Электронные свойства твер-			
дых тел	5.2 Сильно коррелированные элект-		
5.1 Электронные свойства металлов	ронные системы		
и диэлектриков	Восстановление функции электрон-фонон-		
Влияние давления на межслоевой пе- ренос заряда и электронную струк-	ного взаимодействия в сверхпроводниках с помощью неоднородных микроконтак- тов и коррекция фона в спектрах Янсона.		
туру металлических слоев в двух- слойном двумерном органическом ме- талле (BETS) ₄ CoBr ₄ (DCB). Любоо-	Бобров Н. Л Условия реализации и магнитополевая за-	7	73
ский Р. Б., Песоцкий С. И., Зве- рев В. Н., Жиляева Е. И., Флакина А. М., Любовская Р. Н.]	висимость угловых возоуждении в тополо- гическом изоляторе со сверхпроводящим спариванием на треугольной решетке. Фе-		
Поперечный термомагнитный эффект в двумерном электронном газе поверхност-	<i>досеев А. Д.</i> Влияние давления на межслоевой перенос заряда и электронную струк-	7	88
нои полупроводниковои сверхрешетки. Перов А. А., Пикунов П. В	туру металлических слоев в двух- слойном двумерном органическом ме- талле (BETS) ₄ CoBr ₄ (DCB). Любов-		
ния решетки на термостимулированный перенос энергии электронных возбужде-	ский Р. Б., Песоцкий С. И., Зве- рев В. Н., Жиляева Е. И., Флакина А. М., Побосстав Р. Н	7	196
инп. <i>Осорооникоо н. 11</i> 9 595	v110000cnun 1. 11.	1	120

Электронные состояния и аномальный эф- фект Холла в сильнокоррелированных то- пологических системах. <i>Ирхин В. Ю.</i> ,		
Скрябин Ю. Н	7	139
Поперечный термомагнитный эффект в двумерном электронном газе поверхност- ной полупроводниковой сверхрешетки. Перов А. А., Пикунов П. В	8	275
Происхождение точки перегиба на температурной зависимости лондоновской глубины в дырочно-легированных купратных высокотемпературных сверхпроводниках. Комаров К. К., Дзебисашвили Д. М	9	415
Электрон-фононная перенормировка мас- сы в металле за пределами адиабатическо- го приближения. Кучинский Э. З., Кулее- ва Н. А	9	434
Электронные свойства NiO при сверхвысо- ких давлениях. Осчинников С. Г., Осчин- никова Т. М	9	443

5.3 Физика полупроводников

Влияние давления на межслоевой пе-		
ренос заряда и электронную струк-		
туру металлических слоев в двух-		
слойном двумерном органическом ме-		
талле $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$. Любов-		
ский Р. Б., Песоцкий С. И., Зве-		
<u>рев В. Н., Жиляев</u> а Е. И., Флакина А. М.,		
Любовская Р. Н.	7	126
Поперечный термомагнитный эффект в		
двумерном электронном газе поверхност-		
ной полупроводниковой сверхрешетки.		
Перов А. А., Пикунов П. В	8	275
Транспорт заряда в аморфном нитриде		
кремния. Новиков Ю. Н., Гриценко В. А.	10	565
Нелинейный планарный эффект Холла в		
киральном топологическом полуметалле		
СоSi. Есин В. Д., Тимонина А. В., Колес-		
ников Н. Н., Девятов Э. В	12	928

5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)

Транспортное уравнение для субдиффу-		
зии смешанного происхождения. Шки-		
лев В. П	7	107

Разработка дизайна сверхмногопериод-		
ных излучающих структур терагерцево-		
го диапазона, выращиваемых методом		
молекулярно-пучковой эпитаксии. Герчи-		
ков Л. Г., Дашков А. С., Горай Л. И.,		
Буравлёв А. Д	8	197
Исследование процессов формирования на-		
ноконтактов Pt-Cu при погружении иг-		
лы сканирующего туннельного микроско-		
па в поверхностный сплав Pt-Cu мето-		
дом компьютерного моделирования. До-		
кукин С. А., Колесников С. Б., Салец-	0	100
кии А. М	9	420
Транспорт заряда в аморфном нитриде		
кремния. Новиков Ю. Н., Гриценко В. А.	10	565
Фазовая диаграмма электронно-дырочной		
жидкости в монослойных гетерострукту-		
рах на основе дихалькогенидов переход-		
ных металлов. Пех П. Л., Ратников П. В.,		
Силин А. П	10	572

6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи

6.1 Статистическая физика

Асимметрия распространения левополяри-	
зованных нейтрино в неоднородном маг-	
нитном поле. Лобанов А. Е., Чухно-	
ва А. В 10	595
Динамические свойства модели формиро-	
вания мнения в мультиагентной системе с	
изменяющейся структурой связей в усло-	
виях информационного давления. Савиц-	
кая Н. Е., Федорова Т. А 11	714

6.2 Полимеры, жидкие кристаллы

Бистабильность фотоэлектрического эффекта в пленках сегнетоэлектрического фуллерен-фталоцианинового композиционного материала. Палто С. П., Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Юдин С. Г. 8 223

6.4 Xaoc

Особенности	движения	ультра	ахолодных		
атомов в кв	азипериодич	еских	потенциа-		
лах. Дынник	ов И. А., Ме	альцев	А. Я	12	835

6.5 Динамика жидкостей	6.7 Вычислительная физика, сложные
О механизме турбулентных течений со	системы
сдвигом. Турбулентный пограничный слой. Воротилин В. П 10 587	Исследование процессов формирования на- ноконтактов Pt-Cu при погружении иг- лы сканирующего туннельного микроско-
6.6 Физика плазмы, термоядерный	па в поверхностный сплав Pt-Cu мето-
синтез	дом компьютерного моделирования. До-
Нелинейное поглощение лазерного излу-	кукин С. А., Колсеников С. Б., Самец- кий А. М
чения при релятивистском плазменном резонансе в неоднородной плазме. <i>Ме</i> -	Пузыри с присоединенными квантовыми вихрями в захваченных бинарных бо-
тельский И. И., Ковалев В. Ф., Бычен- ков В. Ю	зе-конденсатах. Рубан В. П 12 912
Эффект ударно-индуцированного «пыле-	
ния» и способы его подавления. Огород-	6.8 Общие вопросы физики нелиней-
ников В. А., Ерунов С. В., Бликов А. О.,	ных систем
Кулаков Е. В., Чудаков Е. А., Анти- пов М. В., Панов К. Н., Сырунин М. А.,	Связь величин простых чисел с их номера- ми. Обчинников Ю. Н
Князев В. Н., Давыдов Н. Б., Георгиев- ская А. Б. Яговкин А. О. Юртов И. В.	Большие числа, порождаемые дзета-функ-
Замыслов Д. Н., Ковалев А. Е., Ко-	цией Римана. Овчинников Ю. Н 11 730
тин А. В., Блинов И. А., Новиков М. Г. 11 621	О возможности сохранения возбуждения в
Сжимаемость неидеальной плазмы дейте-	ансамбле одинаковых осцилляторов. <i>Ба</i> -
рия и гелия до 20 ТПа. Мочалов М. А.,	шаров А. М., Трубилко А. И 12 865
илькаев Р. И., $\Psi opmob B. E.$, $Epy-$	
Комраков В. А., Максимкин И. П., Ого-	Οδρομι
родников В. А., Рыжсков А. В., Гряз-	Оозоры
нов В. К., Иосилевский И. Л., Лева-	Электронные состояния и аномальный эф-
шов П. Р., Лавриненко Я. С., Моро-	фект Холла в сильнокоррелированных то-
зов И. В., Минаков Д. В., Парамо-	пологических системах. Ирхин В. Ю.,
нов М. А., Шутов А. В 11 735	Скрябин Ю. Н 7 139

к сведению авторов

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала http://jetp.ac.ru/

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

к сведению авторов

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

a) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);

 в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате IATEX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате рѕ или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны листа не у́же 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать $P_{\text{орt}}$, а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

- В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифпиц, Л. П. Питаевский, Квантовая электродинамика, Наука, Москва (1984), с. 1.
- А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
- R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A 18, 1632 (1978).
- A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
- К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких темпеpamyp (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
- M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

- 7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
- 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
- A. Fang and C. Howald, E-print archives, condmat/0404452.

7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.

8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.

9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего. Главный редактор А. Ф. АНДРЕЕВ

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,

д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН,
канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании), акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук В. Т. ДОЛГОПОЛОВ, член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова