РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА *ТОМ 160, ВЫПУСК 3 (9)*

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД *СЕНТЯБРЬ 2021*

М О С К В А Р А Н

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Законы дисперсии поляритонного типа для четырехуровневых атомов с неэквидистантным энергетическим спектром, взаимодействующих с тремя импульсами лазерного излучения ..... **Коровай О. В.** 307

Побочные каналы утечки информации в квантовой криптографии: не строго однофотонные состояния, разные квантовые эффективности детекторов, конечные передаваемые последовательности ..... **Молотков С. Н.** 327

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Gamma-rays and neutrinos from proton–proton interactions in gamma-ray bursts ..... **Neronov A., Gatelet Y.** 366

О реакции развала в трехчастичных кулоновских системах с приложением к описанию процессов диссоциативной рекомбинации и перезарядки в антипротонной физике ..... **Будылин А. М., Коптелов Я. Ю., Левин С. Б.** 372

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Влияние флуктуационного разупорядочения решетки на термостимулированный перенос энергии электронных возбуждений ..... **Огородников И. Н.** 393

© Российская академия наук, 2021
© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

О возможности равновесия в системе фононы–низкоэнергетические возбуждения в условиях нестационарного процесса распространения теплового импульса в твердых диэлектриках при гелиевых температурах ..... **Саламатов Е. И., Таранов А. В., Хазанов Е. Н.** 403

Влияние процесса нагрева и охлаждения на длины одномерных атомных структур ..... **Сыромятников А. Г., Кудряшов С. А., Салецкий А. М., Клавсюк А. Л.** 410

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Происхождение точки перегиба на температурной зависимости лондоновской глубины в дырочно-легированных купратных высокотемпературных сверхпроводниках ..... **Комаров К. К., Дзебисашвили Д. М.** 415

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Исследование процессов формирования наноконтактов Pt-Cu при погружении иглы сканирующего туннельного микроскопа в поверхностный сплав Pt-Cu методом компьютерного моделирования ..... **Докукин С. А., Колесников С. В., Салецкий А. М.** 426

Электрон-фононная перенормировка массы в металле за пределами адиабатического приближения ..... **Кучинский Э. З., Кулеева Н. А.** 434

Электронные свойства NiO при сверхвысоких давлениях ..... **Овчинников С. Г., Овчинникова Т. М.** 443

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 307–326 © 2021

ЗАКОНЫ ДИСПЕРСИИ ПОЛЯРИТОННОГО ТИПА ДЛЯ ЧЕТЫРЕХУРОВНЕВЫХ АТОМОВ С НЕЭКВИДИСТАНТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ТРЕМЯ ИМПУЛЬСАМИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

О. В. Коровай*

Приднестровский государственный университет им. Т. Г. Шевченко
MD–3300, Тирасполь, Молдова

Поступила в редакцию 19 апреля 2021 г.,
после переработки 19 апреля 2021 г.
Принята к публикации 20 апреля 2021 г.

Изучены особенности поляритонных законов дисперсии четырехуровневых атомов, взаимодействующих с тремя импульсами когерентного лазерного излучения с частотами, находящимися в резонансе с оптически-разрешенными однофотонными переходами $1 \leftrightarrows 2$, $2 \leftrightarrows 3$ и $3 \leftrightarrows 4$, с учетом двухфотонных переходов $1 \leftrightarrows 3$, $2 \leftrightarrows 4$, а также прямого трехфотонного перехода $1 \leftrightarrows 4$. Используется приближение заданной плотности фотонов трех импульсов. Показано, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, положение и форма которых определяется частотами Раби указанных переходов и плотностями фотонов трех импульсов. Непосредственный учет всех шести оптических переходов приводит к зависимости закона дисперсии атомных поляритонов от квантовых параметров — разностей фаз между частотами Раби рассматриваемых переходов. Найдены значения параметров, при которых возможны пересечения ветвей закона дисперсии.

DOI: 10.31857/S0044451021090017

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время повышенное внимание уделяется взаимодействию лазерного излучения с веществом в размерно-ограниченных системах. В работах [1–5] изучены обусловленные сильной связью фотонов с атомными системами явления бозе-эйнштейновской конденсации и сверхтекучести в системе экситон–поляритонов в микрорезонаторах. При этом большой интерес представляет установление общности или различий между такими понятиями, как частота нутации либо частота осцилляций Раби в системе экситонов Ванье – Мотта и вакуумного раби-расщепления ансамблем изолированных двухуровневых атомов либо системой экситонов Френкеля в условиях сильной связи фотонов с материальными возбуждениями. В работах [6, 7] исследованы поляритонные состояния в микрорезонаторе, где энергии экситонов Френкеля в органических квантовых ямах и экситонов Ванье – Мотта в неорганических квантовых ямах смешиваются с оптической модой микрорезонатора, что приводит к взаимодействию этих экситонов между собой и образованию связанных гибридных поляритонов.

Нелинейно-оптические явления в четырех- и многоуровневых атомных системах исследовались в работах [8–11]. При этом учитывались однофотонные индуцированные переходы между последовательными парами соседних уровней под действием света, как это представлено в теории каскадных лазеров. Вместе с тем, в атомных четырехуровневых системах возможны двухфотонные переходы между первым и третьим уровнями, вторым и четвертым уровнями и трехфотонный переход между первым и четвертым уровнями. В работе [12] исследуется когерентное управление нелинейным поглощением интенсивных лазерных полей в четырехуровневых атомных лестничных системах. Поле связи создает электромагнитно-индуцированную прозрачность с дублетом Аутлера – Таунса для зондирующего поля, в то время как управляющее поле отсутствует. При включении управляющего поля появляется большой резонансный пик поглоще-

* E-mail: olesya-korovai@mail.ru

ния, который приводит к оптическому переключению. Теоретическое исследование природы интерференции между пиками Аутлера – Таунса (или одетыми состояниями) в общей многоуровневой системе представлено в работе [13]. Показано, что в четырехуровневой системе характер взаимовлияния двух крайних пиков Аутлера – Таунса может быть как конструктивным, так и деструктивным в зависимости от мощности управляющего лазера. Динамика экситонно-светового поля плоского ансамбля квантовых точек, встроенных в фотонный резонатор, в режиме сильной квантовой связи исследована экспериментально [14]. Показано, что при возбуждении коротким лазерным импульсом в резонаторе обнаруживаются экситон-поляритонное поведение при слабом возбуждении и колебания Раби при сильном возбуждении с резким переходом между этими режимами, что демонстрирует сильную связь между светом и «одетыми» дублетными и триплетными возбужденными состояниями. При низком уровне возбуждения наблюдаются обычная верхняя и нижняя поляритонные ветви закона дисперсии. Однако при увеличении уровня накачки появляется сначала одна, а затем две дополнительные поляритонные ветви.

В работе [15] изучались оптические свойства связанных тримеров и тетрамеров. Методом накачки-зондирования [15, 16] изучены свойства экситон-поляритонов при изменении уровня возбуждения кристалла. Показано, что наблюдается возникновение дополнительных поляритонных ветвей, обусловленных образованием биэкситонных и триэкситонных состояний в кристалле. В работе [17] теоретически и экспериментально исследован спектр пропускания оптического резонатора, связанного с ансамблем холодных четырехуровневых атомов Rb-85. Получены четыре пика вследствие расщепления нормальных мод пропускания резонатора в режиме сильной связи из-за коллективного увеличения силы связи атом–резонатор ансамблем холодных атомов. При этом закон дисперсии состоит из четырех поляритонных ветвей. Когерентное трехфотонное лазерное возбуждение четырехуровневой системы ридберговских атомов также изучено теоретически и экспериментально [18]. Показано появление дополнительного спектрального уширения и возникновение колебаний Раби на крыльях трехфотонных резонансов. Влияние атомной когерентности на поглощение в четырехуровневой атомной системе лестничного типа при учете однофотонных переходов теоретически исследовано в работе [19]. Формирование поляритонов темного состояния в четырехуровневой системе продемонстрировано в работе [20].

В ряде работ изучалось влияние многофотонных процессов в системах лестничного типа на различные оптические явления. В работе [21] численно исследуются эффекты трехфотонной когерентности ридберговского состояния в доплеровской расширенной четырехуровневой лестничной атомной системе атомов Rb-85 с резонансным микроволновым полем. С двух точек зрения анализируются спектральные характеристики ридберговской трехфотонной когерентности: расщепление Аутлера – Таунса, ридберговская электро-индуцированной прозрачность и трехфотонное электромагнитно-индуцированное поглощение. В работе [22] показано экспериментальное различие наблюдаемого расщепления Аутлера – Таунса от электромагнитно-индуцированной прозрачности при учете двухфотонного резонанса.

Теоретическая схема достижения сильной фотонной блокады одиночного атома в резонаторе представлена в работе [23]. Показано, что взаимодействие между квантовой интерференцией и усиленным вакуумным расщеплением Раби приводит к сильной фотонной блокаде, которая увеличивает расщепление одетого состояния между верхней и нижней поляритонными ветвями. Исследование двухфотонной резонансной флуоресценции на микроволновых частотах с использованием сверхпроводящего искусственного атома с энергетическим спектром лестничного типа, трансмона, сильно связанного с волноводом, представлено в работе [24]. Рассматривается мощный двухфотонный переход между основным и вторым возбужденными состояниями и наблюдается пик резонансной флуоресценции, интенсивность которого становится сравнимой с однофотонным излучением.

Известно, что в экситонной области спектра имеют место индуцированные светом однофотонные переходы из основного состояния кристалла в экситонное и из экситонного в биэкситонное, а также прямой двухфотонный переход из основного состояния кристалла на биэкситонный уровень [25]. При этом однофотонный оптический переход из экситонного в биэкситонное состояние и двухфотонный переход из основного состояния кристалла в биэкситонное характеризуются гигантскими силами осциллятора по сравнению со случаем экситонного перехода. Отметим, что в работе [26] представлены предварительные результаты исследования двухимпульсного взаимодействия с экситонами и биэкситонами. Показано, что в условиях мощной накачки в

области M-полосы люминесценции закон дисперсии несущей волны имеет три ветви. Были найдены значения параметров, при которых может наблюдаться пересечение ветвей закона дисперсии. В работах [27, 28] представлены результаты исследования законов дисперсии поляритонного типа для трехуровневого атома с эквидистантым и неэквидистантным энергетическими спектрами при учете двухфотонного перехода. Были найдены значения частот Раби и разности фаз, при которых наблюдается пересечение ветвей законов дисперсии. Влияние двухфотонных процессов на поглощение в системе экситонов и биэкситонов при двухимпульсном взаимодействии изучено в работе [29]. Показано, что учет двухфотонных процессов приводит к возможности наблюдения несимметричного расщепления Аутлера – Таунса, а учет процессов квантовой интерференции — к исчезновению эффекта Аутлера – Таунса при определенных значениях полей падающих импульсов. Предсказана возможность управления спектром поглощения при помощи изменения интенсивности полей и расстроек резонанса.

Таким образом, можно сделать вывод, что ни в одной из упомянутых выше работ не исследуется система четырехуровневых атомов с одновременным учетом однофотонных, двухфотонных и трехфотонных переходов.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Ниже представлены результаты исследований закона дисперсии четырехуровневых атомов, взаимодействующих с тремя импульсами резонансного лазерного излучения. При этом учитываются однофотонные переходы между уровнями $1 \leftrightarrows 2$, $2 \leftrightarrows 3$ и $3 \leftrightarrows 4$, двухфотонные переходы между уровнями 1 и 3, 2 и 4, а также прямой трехфотонный переход между уровнями 1 и 4 (рис. 1). Гамильтониан взаимодействия атома и фотонов трех импульсов можно записать в виде

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}\hat{H}_{int} = &-g_{12}\hat{a}_1^\dagger\hat{c}_1^\dagger\hat{a}_2 - g_{12}^*\hat{a}_2^\dagger\hat{c}_1\hat{a}_1 - g_{23}\hat{a}_2^\dagger\hat{c}_2^\dagger\hat{a}_3 - \\ &- g_{23}^*\hat{a}_3^\dagger\hat{c}_2\hat{a}_2 - g_{34}\hat{a}_3^\dagger\hat{c}_3^\dagger\hat{a}_4 - g_{34}^*\hat{a}_4^\dagger\hat{c}_3\hat{a}_3 - \\ &- g_{13}\hat{a}_1^\dagger\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_2^\dagger\hat{a}_3 - g_{13}^*\hat{a}_3^\dagger\hat{c}_1\hat{c}_2\hat{a}_1 - g_{24}\hat{a}_2^\dagger\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_3^\dagger\hat{a}_4 - \\ &- g_{24}^*\hat{a}_4^\dagger\hat{c}_2\hat{c}_3\hat{a}_2 - g_{14}\hat{a}_1^\dagger\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_3^\dagger\hat{a}_4 - g_{14}^*\hat{a}_4^\dagger\hat{c}_1\hat{c}_2\hat{c}_3\hat{a}_1, \quad (1)\end{aligned}$$

где $\hat{a}_j (j = 1\text{–}4)$ — оператор уничтожения атома, находящегося на уровне j; $\hat{c}_1$, $\hat{c}_2$ и $\hat{c}_3$ — операторы фотонов, индуцирующих переходы между уровнями соответственно $1 \leftrightarrows 2$, $2 \leftrightarrows 3$ и $3 \leftrightarrows 4$; g_{ij} — константы оптической конверсии атома с уровня i на уровень j. Собственные энергии атомов на уровнях 2, 3 и 4 равны соответственно $\hbar\omega_0$, $\hbar\omega_{03}$ и $\hbar\omega_{04}$ (рис. 1). Отсчет энергии атома на возбужденных уровнях начинается с первого уровня (основного состояния атома). Фотоны падающих импульсов, описываемые операторами $\hat{c}_1$, $\hat{c}_2$ и $\hat{c}_3$, имеют частоты соответственно ω_1, ω_2 и ω_3. Фотоны первого (второго) импульса с энергией $\hbar\omega_1$ ($\hbar\omega_2$) возбуждают атом с уровня 1 (2) на уровень 2 (3), фотоны второго (третьего) импульса с энергией $\hbar\omega_3$ возбуждают атом с уровня 3 на уровень 4. Эти переходы являются оптически-разрешенными однофотонными переходами. Кроме того, в атомной системе возможны также оптически-разрешенные двухфотонные переходы с уровня 1 на уровень 3 (и обратно) под действием импульсов с энергиями $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$, с уровня 2 на уровень 4 (и обратно) под действием импульсов с энергиями $\hbar\omega_2 + \hbar\omega_3$. Наряду с двумя двухфотонными переходами в данной системе разрешен также оптический трехфотонный переход с уровня 1 на уровень 4 (и обратно) под действием тех же самых фотонов с энергиями $\hbar\omega_1$, $\hbar\omega_2$, $\hbar\omega_3$, что отражено последними двумя слагаемыми в выражении (1). Предполагаем, что три импульса электромагнитного излучения действуют в течение времени, меньшего времени релаксации атомов. В этом случае процессами релаксации можно пренебречь.

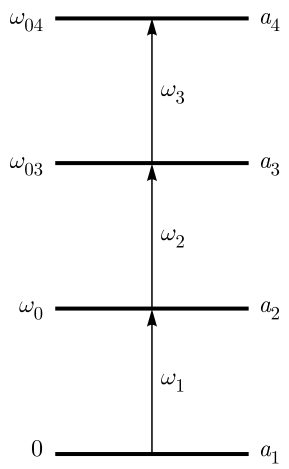


Рис. 1. Схема энергетического спектра четырехуровневого атома, взаимодействующего с фотонами с частотами ω_1, ω_2 и ω_3

Используя гамильтониан (1), легко получить гейзенберговские уравнения движения для операторов $\hat{a}_j$ и $\hat{c}_j$, после усреднения которых в приближении среднего поля приходим к системе нелиней-

ных эволюционных уравнений для амплитуд $a_j = \langle \hat{a}_j \rangle$ $(j = 1, 2, 3, 4)$ и $c_j = \langle \hat{c}_j \rangle$ $(j = 1, 2, 3)$:

$$\begin{aligned}
i\dot{a}_1 &= -g_{12}c_1^*a_2 - g_{13}c_1^*c_2^*a_3 - g_{14}c_1^*c_2^*c_3^*a_4,\\
i\dot{a}_2 &= \omega_0 a_2 - g_{12}^*a_1c_1 - g_{23}c_2^*a_3 - g_{24}c_2^*c_3^*a_4,\\
i\dot{a}_3 &= \omega_{03}a_3 - g_{23}^*a_2c_2 - g_{34}c_3^*a_4 - g_{13}^*a_1c_1c_2,\\
i\dot{a}_4 &= \omega_{04}a_4 - g_{34}^*a_3c_3 - g_{24}^*a_2c_2c_3 - g_{14}^*a_1c_1c_2c_3,\\
i\dot{c}_1 &= \omega_1c_1 - g_{12}a_1^*a_2 - g_{14}a_1^*c_2^*c_3^*a_4 - g_{13}a_1^*c_2^*a_3,\\
i\dot{c}_2 &= \omega_2c_2 - g_{23}a_2^*a_3 - g_{14}a_1^*c_2^*c_3^*a_4 - g_{13}a_1^*c_2^*a_3 -\\
&\qquad - g_{24}a_2^*c_3^*a_4,\\
i\dot{c}_3 &= \omega_3c_3 - g_{34}a_3^*a_4 - g_{24}a_2^*c_2^*a_4 - g_{14}a_1^*c_1^*c_2^*a_4.
\end{aligned} \tag{2}$$

Найдем дисперсионное уравнение системы в окрестности частоты второго уровня атома. Используя уравнение для $\dot{a}_2$, видим, что скорость изменения амплитуды a_2 определяется выражениями a_1c_1, $c_2^*a_3$ и $c_2^*c_3^*a_4$. Слагаемое с a_1c_1 описывает вклад в скорость изменения амплитуды a_2 за счет гибели атома на уровне a_1 и фотона с энергией $\hbar\omega_1$, в результате чего атом переходит на уровень 2. Слагаемое $c_2^*a_3$ описывает процессы гибели атома на уровне 3 с образованием фотона на частоте ω_2, в результате чего атом переходит на уровень 2. Аналогично, слагаемое с $c_2^*c_3^*a_4$ описывает процесс гибели атома на уровне 4 с образованием двух фотонов с частотами ω_2 и ω_3 и переходом атома на уровень 2. Соответствующие им операторы $\hat{a}_1\hat{c}_1$, $\hat{c}_2^\dagger\hat{a}_3$ и $\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_3^\dagger\hat{a}_4$ описывают состояния с квазиэнергиями $\hbar\omega_1$, $\hbar(\omega_{03} - \omega_2)$ и $\hbar(\omega_{04} - \omega_3 - \omega_2)$, равными энергии $\hbar\omega_0$ атома на втором уровне. Следовательно, состояние атома на уровне 2, а также реплика возбужденного состояния 3, сдвинутая вниз на энергию фотона $\hbar\omega_2$, и реплика возбужденного состояния 4, сдвинутая вниз на энергию двух фотонов $\hbar\omega_2 + \hbar\omega_3$, вырождены по энергии.

Используя выражение (2), получаем для амплитуд a_1c_1, $c_2^*a_3$ и $c_2^*c_3^*a_4$ следующие уравнения:

$$\begin{aligned}
i(a_1c_1)^{\cdot} &= \omega_1a_1c_1 - g_{12}c_1c_1^*a_2 - g_{14}c_1^*c_2^*c_3^*c_1a_4 -\\
&\quad - g_{13}c_1^*c_1c_2^*a_3 - g_{12}a_1a_1^*a_2 - g_{13}a_1^*c_2^*a_3a_1 -\\
&\qquad - g_{14}a_1^*c_2^*c_3^*a_4a_1,\\
i(a_3c_2^*)^{\cdot} &= (\omega_{03} - \omega_2)c_2^*a_3 - g_{23}^*a_2c_2^*c_2 - g_{34}c_3^*c_2^*a_4 -\\
&\quad - g_{13}^*a_1c_1c_2c_2^* + g_{24}^*a_2c_3a_4^*a_3 + g_{23}^*a_2a_3^*a_3 +\\
&\quad + g_{13}^*a_1c_2a_3^*a_3 + g_{24}^*a_2c_3a_4^*c_2^* +\\
&\qquad + g_{14}^*a_1c_1c_3c_2^*a_4^*,
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
i(c_2^*c_3^*a_4)^{\cdot} &= (\omega_{04} - \omega_3 - \omega_2)c_2^*c_3^*a_4 + g_{23}^*a_2a_3^*c_3^*a_4 +\\
&\quad + g_{13}^*a_1c_1a_3^*c_3^*a_4 + g_{24}^*a_2c_3a_4^*c_3^*a_4 +\\
&\quad + g_{14}^*a_1c_2c_3a_4^*c_3^*a_4 + g_{34}^*a_3a_4a_4^*c_2^* +\\
&\quad + g_{24}^*a_2c_2a_4a_4^*c_2^* + g_{14}^*a_1c_1c_2a_4^*a_4c_2^* -\\
&\quad - g_{34}^*a_3c_3c_3^*c_2^* - g_{24}^*a_2c_2c_3c_2^*c_3^* -\\
&\qquad - g_{14}^*a_1c_1c_2c_3c_2^*c_3^*.
\end{aligned}$$

Далее будем считать, что амплитуды фотонов намного превосходят амплитуды атомов на соответствующих уровнях $(c_1, c_2, c_3 \gg a_1, a_2, a_3, a_4)$ — приближение заданной плотности фотонов. Тогда решение этих уравнений будем искать в виде $c_i = c_{0i}\exp(-i\omega_i t)$, где c_{0i} — начальные значения амплитуд фотонов. Огибающая функции $c_i(t)$ в приближении заданной плотности фотонов не изменяется со временем: $|c_i|^2 = |c_{0i}|^2 \equiv f_{i0} = \text{const}$. Пренебрегая исчезающе малыми слагаемыми в уравнениях (3), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}
i\dot{a}_2 &= \omega_0a_2 - g_{12}^*(a_1c_1) - g_{23}(c_2^*a_3) - g_{24}(c_2^*c_3^*a_4),\\
i(a_1c_1)^{\cdot} &= \omega_1(a_1c_1) - g_{12}c_1c_1^*a_2 - g_{13}c_1^*c_1c_2^*a_3 -\\
&\qquad - g_{14}c_1c_1^*c_2^*c_3^*a_4,\\
i(a_3c_2^*)^{\cdot} &= (\omega_{03} - \omega_2)(c_2^*a_3) - g_{23}^*a_2c_2^*c_2 -\\
&\qquad - g_{34}c_3^*c_2^*a_4 - g_{13}^*a_1c_1c_2c_2^*,\\
i(c_2^*c_3^*a_4)^{\cdot} &= (\omega_{04} - \omega_3 - \omega_2)(c_2^*c_3^*a_4) - g_{34}^*a_3c_3c_3^*c_2^* -\\
&\qquad - g_{24}^*a_2c_2c_3c_2^*c_3^* - g_{14}^*a_1c_1c_2c_3c_2^*c_3^*.
\end{aligned} \tag{4}$$

В приближении заданной плотности фотонов система уравнений (4) является линейной. Решения системы (4) будем искать в виде

$$a_2, a_1c_1, a_3c_2^*, c_2^*c_3^*a_4 \propto e^{-i\omega t},$$

где ω — искомая собственная частота атомных поляритонов. Тогда для стационарных амплитуд получаем алгебраическую систему уравнений

$$\begin{aligned}
&(\omega - \omega_0)a_2 + g_{12}^*(a_1c_1) +\\
&\quad + g_{23}(c_2^*a_3) + g_{24}(c_2^*c_3^*a_4) = 0,\\
&(\omega - \omega_1)(a_1c_1) + g_{12}c_1c_1^*a_2 + g_{13}c_1^*c_1c_2^*a_3 +\\
&\quad + g_{14}c_1c_1^*c_2^*c_3^*a_4 = 0,\\
&(\omega - \omega_{03} + \omega_2)(c_2^*a_3) + g_{23}^*a_2c_2^*c_2 + g_{34}c_3^*c_2^*a_4 +\\
&\quad + g_{13}^*a_1c_1c_2c_2^* = 0,\\
&(\omega - \omega_{04} + \omega_3 + \omega_2)(c_2^*c_3^*a_4) + g_{34}^*a_3c_3c_3^*c_2^* +\\
&\quad + g_{24}^*a_2c_2c_3c_2^*c_3^* + g_{14}^*a_1c_1c_2c_3c_2^*c_3^* = 0,
\end{aligned} \tag{5}$$

детерминант которой представляет собой закон дисперсии взаимодействующих атомов с неэквидистантным энергетическим спектром в окрестности частоты ω_0 самого низкого возбужденного уровня атома:

$$\begin{vmatrix} \omega-\omega_0 & g_{12}^* & g_{23} & g_{24} \\ g_{12}f_{10} & \omega-\omega_1 & g_{13}f_{10} & g_{14}f_{10} \\ g_{23}^*f_{20} & g_{13}^*f_{20} & \omega-\omega_{03}+\omega_2 & g_{34} \\ g_{24}^*f_{20}f_{30} & g_{14}^*f_{20}f_{30} & g_{34}^*f_{30} & \omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2 \end{vmatrix} = 0, \tag{6}$$

где f_{10}, f_{20} и f_{30} — (заданные) плотности фотонов действующих импульсов. Раскрывая детерминант (6) и полагая константы

$$g_{nk} = |g_{nk}|\exp(i\varphi_{nk}), \quad n = 1\text{–}3, \quad k = 1\text{–}4,$$

получаем уравнение четвертой степени для определения частот ω атомных поляритонов:

$$\begin{gathered}(\omega-\omega_0)(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{03}+\omega_2)(\omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2)- \\ -\Omega_{12}^2(\omega-\omega_{03}-\omega_2)(\omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2)- \\ -\Omega_{23}^2(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2)- \\ -\Omega_{34}^2(\omega-\omega_0)(\omega-\omega_1)-\Omega_{13}^2(\omega-\omega_0)(\omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2)- \\ -\Omega_{24}^2(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{03}+\omega_2)-\Omega_{14}^2(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{03}+\omega_2)+ \\ +\Omega_{12}^2\Omega_{34}^2+\Omega_{23}^2\Omega_{14}^2+\Omega_{13}^2\Omega_{24}^2+ \\ +2\Omega_{13}\Omega_{34}\Omega_{14}(\omega-\omega_0)\cos\Theta_1+ \\ +2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}(\omega-\omega_{04}+\omega_3+\omega_2)\cos\Theta_2+ \\ +2\Omega_{12}\Omega_{14}\Omega_{24}(\omega-\omega_{03}+\omega_2)\cos\Theta_4+ \\ +2\Omega_{23}\Omega_{34}\Omega_{24}(\omega-\omega_1)\cos\Theta_3- \\ -2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}\Omega_{14}\cos(\Theta_1+\Theta_2)- \\ -2\Omega_{12}\Omega_{13}\Omega_{23}\Omega_{34}\cos(\Theta_1-\Theta_4)- \\ -2\Omega_{23}\Omega_{14}\Omega_{13}\Omega_{24}\cos(\Theta_1-\Theta_2)=0, \end{gathered} \tag{7}$$

где

$$\begin{aligned} &\Omega_{12}^2 = g_{12}^2 f_{10}, \quad \Omega_{23}^2 = g_{23}^2 f_{20}, \\ &\Omega_{34}^2 = g_{34}^2 f_{30}, \quad \Omega_{13}^2 = g_{13}^2 f_{10} f_{20}, \\ &\Omega_{24}^2 = g_{24}^2 f_{20} f_{30}, \quad \Omega_{14}^2 = g_{14}^2 f_{10} f_{20} f_{30} \end{aligned} \tag{8}$$

и

$$\begin{aligned} &\Theta_1 = \varphi_{12}+\varphi_{24}-\varphi_{14}, \quad \Theta_2 = \varphi_{12}+\varphi_{23}-\varphi_{13}, \\ &\Theta_3 = \varphi_{23}+\varphi_{34}-\varphi_{24}, \quad \Theta_4 = \varphi_{13}+\varphi_{34}-\varphi_{14}. \end{aligned} \tag{9}$$

Из соотношений (8) видно, что квадраты частот Раби Ω_{12}^2, Ω_{23}^2, Ω_{34}^2 однофотонных переходов между соседними уровнями пропорциональны квадратам матричных элементов g_{nk}^2 дипольных моментов переходов и плотностям фотонов соответствующих импульсов. Квадраты частот Раби Ω_{13}^2, Ω_{24}^2 двухфотонных переходов пропорциональны квадратам матричных элементов g_{13}^2, g_{24}^2 дипольных моментов переходов между уровнями $1 \leftrightarrows 3$, $2 \leftrightarrows 4$ и произведению плотностей фотонов соответствующих импульсов. Квадрат частоты Раби Ω_{14}^2 трехфотонного оптически-разрешенного перехода пропорционален квадрату матричного элемента g_{14}^2 дипольного момента перехода между уровнями 1 и 4 и произведению всех трех плотностей фотонов. Таким образом, по аналогии с двухуровневыми атомами, взаимодействующими с полем электромагнитной волны, используемые выражения для частот Раби совпадают с ранее введенными [27, 28]. Выражения (9) описывают разности фаз Θ_i, $i = 1\text{–}4$.

Из уравнения (7) видно, что закон дисперсии атомных поляритонов может иметь четыре действительных корня, которые описывают четыре дисперсионные ветви в зависимости от частоты фотонов $\omega_1 = ck_1$, где k_1 — волновой вектор. Форма и расположение ветвей закона дисперсии определяются частотами Раби, квадраты которых, в свою очередь, определяются плотностями фотонов f_{10}, f_{20} и f_{30} трех импульсов.

Второе, третье и четвертое слагаемые в уравнении (7) описывают последовательные независимые вклады каждого из однофотонных переходов в дисперсионном уравнении. При этом знаки (либо фазы) соответствующих констант взаимодействия по отношению к другим константам взаимодействия не играют роли. Пятое и шестое слагаемые в уравнении (7) описывают последовательные независимые вклады каждого из двухфотонных переходов (между уровнями соответственно $1 \leftrightarrows 3$ и $2 \leftrightarrows 4$). Седьмое слагаемое описывает вклад прямого трехфотонного перехода между уровнями $1 \leftrightarrows 4$. Слагаемые с восьмого по десятое определяют вклады, обусловленные корреляцией между однофотонными и многофотонными процессами. Слагаемые с одиннадцатого по четырнадцатое пропорциональны произведениям трех частот Раби (трех констант взаимодействия). Их появление обусловлено одновременным действием (квантовой интерференцией) трех процессов. При этом учет знаков между константами взаимодействия (фазовых соотношений) играет важную роль, так как закон дисперсии зависит еще и от разностей фаз между константами соответствующих оптических процессов. Вклад этих слагаемых зависит не только от значений частот Раби, но и от значений разностей фаз, введенных ранее. Последние три слагаемых учитывают вклад в дисперсионное соотношение квантовой интерференции четырех процессов. Здесь играют роль корреляции между

четырьмя константами взаимодействия, обусловленные четырехчастотными процессами. Слагаемые с разностью фаз в уравнении (7) являются следствием когерентности процессов взаимодействия фотонов с атомами. По этой причине экспериментальное установление особенностей поведения закона дисперсии при одновременном учете всех оптических переходов может способствовать установлению фазовых соотношений между различными константами взаимодействия.

3. ЗАКОН ДИСПЕРСИИ ЧЕТЫРЕХУРОВНЕВОГО АТОМА С НЕЭКВИДИСТАНТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ

Обсудим поведение ветвей закона дисперсии атомных поляритонов четырехуровневого атома. Будем считать, что частота фотонов первого импульса, $\omega_1 = ck_1$, действующего между уровнями 1 и 2, непрерывно изменяется, тогда как частоты ω_2 и ω_3 фотонов второго и третьего импульсов являются фиксированными параметрами. Используя уравнение (7), можно получить явные решения уравнения четвертой степени в виде зависимости $\omega(\omega_1)$. Введем в рассмотрение расстройки резонансов Δ, δ_1, δ_2, δ_3, нормированные на частоту Раби Ω_{12}:

$$\begin{gathered}\omega-\omega_0=\Omega_{12}\Delta, \quad \omega_2-\omega_{03}+\omega_0=\Omega_{12}\delta_2,\\ \omega_1-\omega_0=\Omega_{12}\delta_1, \quad \omega_3+\omega_{03}-\omega_{04}=\Omega_{12}\delta_3.\end{gathered} \tag{10}$$

Для анализа поведения кривых законов дисперсии более удобным является рассмотрение решения уравнения $\delta_1(\Delta)$ с учетом расстроек резонансов δ_i ($i = 1, 2, 3$). Дисперсионное уравнение (7) примет вид

$$\begin{gathered}\Delta(\Delta-\delta_1)(\Delta+\delta_2)(\Delta+\delta_2+\delta_3)-(\Delta+\delta_2)(\Delta+\delta_2+\delta_3)-\\ -\omega_{23}^2(\Delta-\delta_1)(\Delta+\delta_2+\delta_3)-\omega_{34}^2\Delta(\Delta-\delta_1)-\\ -\omega_{13}^2\Delta(\Delta+\delta_2+\delta_3)-\omega_{24}^2(\Delta-\delta_1)(\Delta+\delta_2)-\omega_{14}^2\Delta(\Delta+\delta_2)+\\ +\omega_{34}^2+\omega_{23}^2\omega_{14}^2+\omega_{13}^2\omega_{24}^2+2\omega_{13}\omega_{34}\omega_{14}\Delta\cos\Theta_4+\\ +2\omega_{23}\omega_{13}(\Delta+\delta_2+\delta_3)\cos\Theta_2+2\omega_{14}\omega_{24}(\Delta+\delta_2)\cos\Theta_1+\\ +2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}(\Delta-\delta_1)\cos\Theta_3-2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{14}\cos(\Theta_2+\Theta_4)-\\ -2\omega_{13}\omega_{24}\omega_{34}\cos(\Theta_1-\Theta_4)-\\ -2\omega_{23}\omega_{14}\omega_{13}\omega_{24}\cos(\Theta_1-\Theta_2)=0,\end{gathered} \tag{11}$$

где

$$\omega_{23}=\frac{\Omega_{23}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{34}=\frac{\Omega_{34}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{13}=\frac{\Omega_{13}}{\Omega_{12}},$$
$$\omega_{24}=\frac{\Omega_{24}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{14}=\frac{\Omega_{14}}{\Omega_{12}}$$

— нормированные на Ω_{12} частоты Раби. Соответственно, уравнение для расстройки резонанса можно записать в виде

$$\delta_1(\Delta)=\Delta-\frac{F(\Delta)}{G(\Delta)}, \tag{12}$$

где

$$\begin{gathered}F(\Delta)=\Delta^2(\omega_{14}^2-\omega_{13}^2-1)+\\ +\Delta(\delta_2(\omega_{14}^2-\omega_{13}^2-2)-\delta_3(\omega_{13}^2+1)+\\ +2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1+2\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2)+\\ +2\delta_2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1+2(\delta_2+\delta_3)\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2+\\ +\omega_{23}^2\omega_{14}^2+\omega_{24}^2\omega_{13}^2+\omega_{34}^2-\\ -2\omega_{34}\omega_{24}\omega_{13}\cos(\Theta_1-\Theta_4)-\\ -2\omega_{14}\omega_{23}\omega_{34}\cos(\Theta_2+\Theta_4)-\\ -2\omega_{14}\omega_{23}\omega_{24}\omega_{13}\cos(\Theta_1-\Theta_2),\end{gathered} \tag{13a}$$

$$\begin{gathered}G(\Delta)=\Delta^3+(2\delta_2+\delta_3)\Delta^2+\\ +(\delta_2^2+\delta_2\delta_3-(\omega_{23}^2+\omega_{34}^2+\omega_{24}^2))\Delta+\\ +2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_3-\delta_2(\omega_{23}^2+\omega_{24}^2)-\delta_3\omega_{34}^2.\end{gathered} \tag{13b}$$

Видно, что поведение функции $\delta_1(\Delta)$ существенно определяется корнями уравнения для $G(\Delta)$, которое представляет собой каноническое кубическое уравнение $G(\Delta) = 0$ относительно Δ. При этом корни будут являться полюсами функции $\delta_1(\Delta)$, положение которых изменяется в зависимости от значений параметров системы.

Рассмотрим случай точного резонанса $\delta_2 = 0$, $\delta_3 = 0$, тогда выражения (13) можно записать в виде

$$\begin{gathered}\Delta^2(\omega_{14}^2-\omega_{13}^2-1)+\\ +\Delta(2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1+2\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2)+\\ +\omega_{23}^2\omega_{14}^2+\omega_{24}^2\omega_{13}^2+\omega_{34}^2-\\ -2\omega_{34}\omega_{24}\omega_{13}\cos(\Theta_1-\Theta_4)-\\ -2\omega_{14}\omega_{23}\omega_{34}\cos(\Theta_2+\Theta_4)-\\ -2\omega_{14}\omega_{23}\omega_{24}\omega_{13}\cos(\Theta_1-\Theta_2)=0,\end{gathered} \tag{14a}$$

$$\begin{gathered}\Delta^3-(\omega_{23}^2+\omega_{34}^2+\omega_{24}^2)\Delta+\\ +2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos(\Theta_3)=0.\end{gathered} \tag{14b}$$

Второе слагаемое в (14b) описывает взаимодействие импульса на частоте ω_2 с атомами с квазиэнергией $\hbar(\omega_{03}-\omega_2)$ и с частотой Раби ω_{23} (переход $2 \leftrightarrows 3$), третье слагаемое в (14b) — взаимодействие импульса на частоте ω_3 с атомами с квазиэнергией $\hbar(\omega_{04}-\omega_3)$ на переходе $3 \leftrightarrows 4$ с частотой Раби ω_{34}, четвертое слагаемое в (14b) описывает взаимодействие импульсов на частотах ω_2 и ω_3 с атомами с квазиэнер-

гией $\hbar(\omega_{04}-\omega_3-\omega_2)$ на переходе $2 \leftrightarrows 4$ с частотой Раби ω_{24}, пятое слагаемое представляет собой квантовую интерференцию трех процессов. При этом второе и третье слагаемые описывают однофотонные переходы, тогда как четвертое слагаемое — это следствие учета двухфотонного перехода $2 \leftrightarrows 4$. Корни уравнения (14b) являются аналогами поперечных частот теории экситон-поляритонов, т. е. расщепление первого возбужденного уровня атома определяется тремя частотами Раби и разностью фаз Θ_3. Очевидно, что если одна из этих частот Раби равна нулю либо разность фаз $\Theta_3 = \pi/2$, то слагаемое, описывающее квантовую интерференцию трех процессов, равно нулю.

Изучим поведение корней уравнения (14b) при различных значениях частот Раби и разности фаз Θ_3. При $\Theta_3 = \pi/2$ уравнение имеет три различных корня:

$$\Delta_1 = 0, \quad \Delta_{2,3} = \pm\sqrt{\omega_{23}^2 + \omega_{34}^2 + \omega_{24}^2},$$

положение которых определяется значениями всех частот Раби, входящих в уравнение. На рис. 2*а–в* представлены зависимости $\Delta(\omega_{23})$ при различных значениях частот Раби ω_{24} и ω_{34}. Видно, что корни $\Delta_{2,3}$ при увеличении частот Раби ω_{24} и ω_{34} симметрично удаляются от корня $\Delta_1 = 0$ (рис. 2*б*), что свидетельствует об увеличении расщепления первого возбужденного уровня атома и о симметричном смещении расщепленных квазиуровней друг относительно друга (рис. 2*в*). В случае $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{24}$ положение корней $\Delta_{2,3}$ определяется только одной частотой Раби. При $\Theta_3 = 0, \pi$ уравнение (14b) имеет три различных корня при условии $\omega_{23} \neq \omega_{34} \neq \omega_{24}$. Решение кубического уравнения (14b) в общем случае можно представить в виде [30]

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= -\frac{a}{3} + 2\sqrt{-\frac{p}{3}}\,\cos\left(\frac{\alpha}{3}\right), \\ \Delta_{2,3} &= -\frac{a}{3} + 2\sqrt{-\frac{p}{3}}\,\cos\left(\frac{\alpha \pm \pi}{3}\right), \end{aligned} \tag{15}$$

где

$$\cos\alpha = -\frac{q}{2\sqrt{-(p/3)^3}},$$

$$p = -\frac{1}{3}a^2 + b, \quad q = \frac{2}{27}a^3 - \frac{1}{3}ab + c,$$

а коэффициенты в условиях точного резонанса имеют вид

$$a = 1, \quad b = \omega_{23}^2 + \omega_{34}^2 + \omega_{24}^2, \quad c = 2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_3.$$

На рис. 2*г,д* видно, что если исключить двухфотонный переход $2 \leftrightarrows 4$, т. е. $\omega_{24} = 0$, то увеличение значения частоты Раби ω_{23} приводит к симметричному смещению корней уравнения друг относительно друга при увеличении значения частоты ω_{34} (рис. 2*д,е*). При $\omega_{24} \neq 0$ возникает перестройка энергетического спектра четырехуровневого атома (рис. 2*е*), корни уравнения (14b) при условии $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{24}$ принимают значения $\Delta_{1,2} = \omega_{23}$, $\Delta_3 = -2\omega_{23}$ и возникает пересечение кривых в длинноволновой области $\Delta < 0$ (рис. 2*ж*) при $\Theta_3 = \pi$, обусловленное вырождением корней Δ_1 и Δ_2 кубического уравнения, или корней Δ_1 и Δ_3 в коротковолновой области $\Delta > 0$ в случае $\Theta_3 = \pi$ (рис. 2*з*). Наличие вырождения можно увидеть, исследуя дискриминант уравнения (14b)

$$D = -108\omega_{23}^2\omega_{24}^2\omega_{34}^2\cos^2\Theta_3 - 4(-\omega_{23}^2 - \omega_{24}^2 - \omega_{34}^2)^3.$$

Видно, что дискриминант и, следовательно, корни уравнения (14b) определяются частотами Раби и разностью фаз Θ_3, входящей в интерференционное слагаемое всех трех процессов. Анализ дискриминанта уравнения позволяет увидеть, что $D = 0$ при $|\cos^2\Theta_3| = 1$ и $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{24}$ и, следовательно, уравнение (14b) имеет один двукратно вырожденный корень и один отличный от него. Отсюда следует, что при учете процесса прямого двухфотонного возбуждения атома с уровня 2 на уровень 4 возникает вырождение корней уравнения (14b), а это, в свою очередь, приводит к пересечению кривых $\Delta(\omega_{23})$ при $\Theta_3 = 0, \pi$ (рис. 2*ж,з*). Эти особенности поведения корней уравнения (14b) и кривых функции $\Delta(\omega_{23})$ в зависимости от значений частот Раби и разности фаз должны проявиться и в поведении ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_1)$. В условиях точного резонанса второго и третьего импульсов выражение (11) примет вид

$$\begin{aligned} &\Delta^4 - \Delta^3\delta_1 - \Delta^2(1 + \omega_{23}^2 + \omega_{34}^2 + \omega_{13}^2 + \omega_{24}^2 + \omega_{14}^2) + \\ &+ \Delta(\delta_1(\omega_{23}^2 + \omega_{34}^2 + \omega_{24}^2) + 2\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2 + \\ &+ 2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1 + 2\omega_{13}\omega_{34}\omega_{14}\cos\Theta_3 + \\ &+ 2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_4) + \omega_{34}^2 + \omega_{23}^2\omega_{14}^2 + \omega_{13}^2\omega_{24}^2 - \\ &- 2\delta_1\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_4 - 2\omega_{14}\omega_{23}\omega_{34}\cos(\Theta_1 + \Theta_4) - \\ &- 2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{14}\cos(\Theta_2 + \Theta_4) - \\ &- 2\omega_{23}\omega_{14}\omega_{13}\omega_{24}\cos(\Theta_1 + \Theta_2) = 0. \end{aligned} \tag{16}$$

Изучим решения уравнения четвертой степени (16) как функцию $\Delta(\delta_1)$ при постоянных значениях параметров ω_{14}, ω_{24}, ω_{34}, ω_{23}, ω_{13} и Θ_i ($i = 1$–4). Для оценки и анализа природы корней уравнения

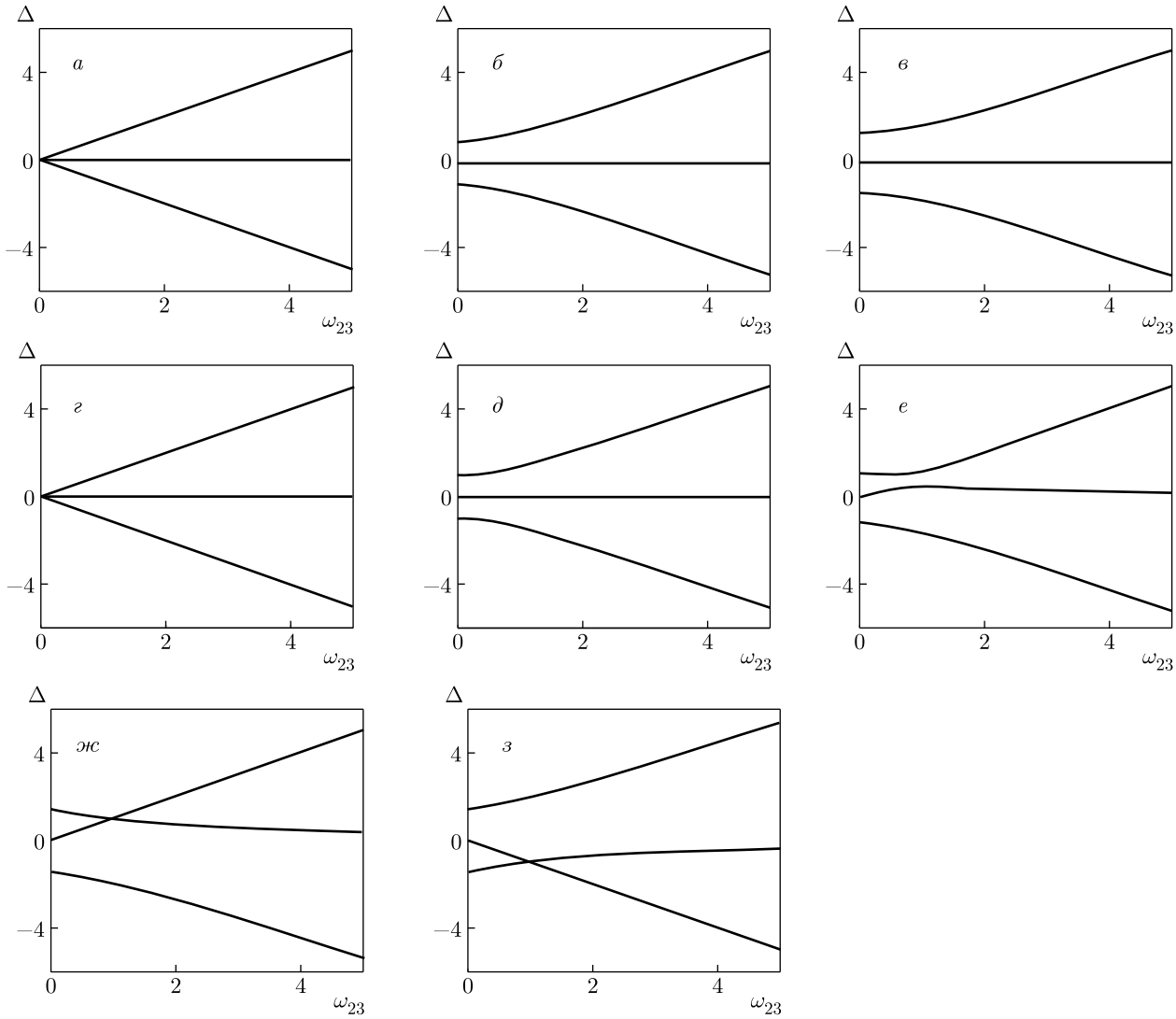


Рис. 2. Зависимости корней уравнения $\Delta_i(\omega_{23})$ при $\delta_2 = \delta_3 = 0$: разность фаз $\Theta_3 = \pi/2$ и $\omega_{24} = \omega_{34} = 0$ (*а*), $\omega_{24} = 0$, $\omega_{34} = 1$ (*б*), $\omega_{24} = \omega_{34} = 1$ (*в*); разность фаз $\Theta_3 = 0$ и $\omega_{24} = \omega_{34} = 0$ (*г*), $\omega_{24} = 0$, $\omega_{34} = 1$ (*д*), $\omega_{24} = 0.5$, $\omega_{34} = 1$ (*е*), $\omega_{24} = \omega_{34} = 1$ (*ж*); разность фаз $\Theta_3 = \pi$ и $\omega_{24} = \omega_{34} = 1$ (*з*)

используем подход, развитый в работе [31], из которого следует, что все четыре корня Δ_i $(i = 1\text{–}4)$ являются действительными и определяются выражениями [32]

$$\begin{aligned} \Delta_{1,2} &= -\frac{b}{4a} - S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 - 2p + \frac{q}{S}}, \\ \Delta_{3,4} &= -\frac{b}{4a} + S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 - 2p - \frac{q}{S}}, \end{aligned} \tag{17}$$

где

$$p = \frac{8ac - 3b^2}{8a^2}, \quad q = \frac{b^3 - 4abc + 8a^2 d}{8a^3},$$

$$S = \frac{1}{2}\sqrt{-\frac{2}{3}p + \frac{1}{3a}\left(Q + \frac{D_0}{Q}\right)},$$

$$Q = \sqrt[3]{\frac{D_1 + \sqrt{D_1^2 - 4D_0^3}}{2}},$$

$$D_0 = c^2 - 3bd + 12ae,$$

$$D_1 = 2c^3 - 9bcd + 27b^2 e + 27ad^2 - 72ace,$$

а a, b, c, d, e — коэффициенты из уравнения (16). Результаты анализа дискриминанта уравнения (16) (см. Приложение) позволяют объяснить особенности поведения ветвей закона дисперсии. Например, равенство дискриминанта нулю соответствует вырождению корней уравнения, а это, в условиях нашей задачи, выражается в пересечении ветвей закона дисперсии.

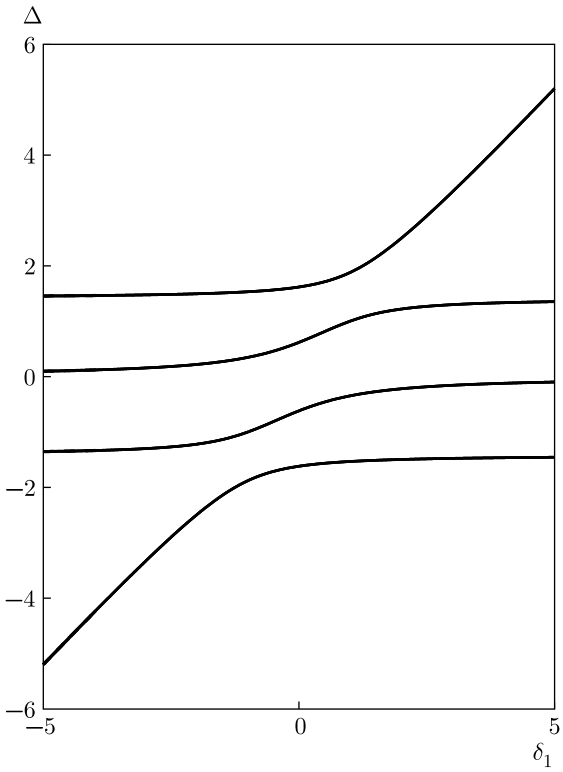


Рис. 3. Законы дисперсии $\Delta(\delta_1)$ при $\delta_2 = \delta_3 = 0$ и значениях нормированных частот Раби $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{12} = 1$ без учета многофотонных переходов ($\omega_{14} = \omega_{24} = \omega_{13} = 0$)

Исследуя уравнение (16), рассмотрим поведение кривых закона дисперсии атомных поляритонов (рис. 3). Видно, что закон дисперсии $\Delta(\delta_1)$ при $\delta_2 = 0$, $\delta_3 = 0$ и без учета многофотонных переходов ($\omega_{14} = \omega_{24} = \omega_{13} = 0$) представляет собой структуру, состоящую из четырех восходящих с ростом δ_1 ветвей, положение и форма которых определяется параметрами системы.

Анализ выражений (9) и (16) позволяют сделать вывод, что разности фаз Θ_i ($i = 1$–4) могут быть все одновременно равны друг другу. Рассмотрим для начала случай $\Theta_i = \pi/2$ ($i = 1$–4) и изучим влияние многофотонных переходов на поведение ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_1)$. При $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ (рис. 4*а*) с ростом ω_{13} наблюдается симметричное удаление друг от друга верхней и нижней ветвей закона дисперсии и сильное сближение средних ветвей на всем диапазоне значений δ_1 с изменением их формы. Если $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$ (рис. 4*б*), то с ростом ω_{24} верхняя и нижняя поляритонные ветви удаляются друг от друга (смещаясь соответственно в длинноволновую $\Delta < 0$ и коротковолновую $\Delta > 0$ области), тогда как средние ветви закона дисперсии сильно сближаются в окрестности $\Delta = 0$, сохраняя свою форму. В случае, когда $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{14} \geq 0$ (рис. 4*в*), при увеличении параметра ω_{14} наблюдается сближение верхней и средней ветвей в коротковолновой области $\Delta > 0$ и нижней и средней ветвей в длинноволновой области $\Delta < 0$. Ветви сближаются при росте частоты Раби ω_{14} и одновременно пересекаются при $\omega_{14} = 1$. Таким образом, возникают пересечения верхней и средней ветвей закона дисперсии в коротковолновой области $\Delta > 0$ и нижней и средней ветвей в длинноволновой области $\Delta < 0$; средние ветви при этом представляют собой прямые и не зависят от расстройки резонанса δ_1. Дальнейшее увеличение частоты Раби ω_{14} приводит к исчезновению пересечений, при этом наблюдается сближение средних ветвей и симметричное смещение верхней и нижней ветвей закона дисперсии.

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии при $\omega_{14} = \omega_{24} = 1$ и $\omega_{13} \geq 0$ (рис. 4*г*). С ростом параметра ω_{13} средние ветви закона дисперсии сближаются в окрестности точки $\delta_1 = 0$, при этом верхняя и нижняя поляритонные ветви медленно удаляются друг от друга, смещаясь в коротковолновой и длинноволновой областях. При $\omega_{13} = 2$ происходит пересечение средних ветвей закона дисперсии в точке $\delta_1 = 0$, при этом одна из ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$ и не зависит от δ_1, тогда как другая монотонно возрастает с ростом δ_1. Дальнейшее увеличение ω_{13} приводит к расщеплению средних ветвей и к симметричному смещению верхней и нижней ветвей закона дисперсии, при этом смещение средних ветвей друг относительно друга слабо зависят от ω_{13}.

Зафиксируем $\omega_{14} = \omega_{13} = 1$, $\omega_{24} \geq 0$ (рис. 4*д*). Увеличение параметра ω_{24} приводит к симметричному удалению верхней и нижней ветвей, к одновременному сближению средних ветвей закона дисперсии и к их пересечению при $\omega_{24} = 2$ в точке $\delta_1 = 0$. При этом одна из ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$. Дальнейший рост параметра ω_{24} приводит к расщеплению средних ветвей закона дисперсии, постепенному расталкиванию средних ветвей друг относительно друга и к последующему симметричному смещению всех четырех ветвей закона дисперсии.

Случай $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$ и $\omega_{14} \geq 0$ представлен на рис. 4*е*. При $\omega_{14} = 0$ наблюдается пересечение двух средних ветвей закона дисперсии в точке $\delta_1 = 0$. При этом одна из них носит восходящий с ростом δ_1 характер, тогда как другая представляет собой прямую $\Delta = 0$. При увеличении параметра ω_{14} пересечение исчезает, возникает расщепление средних ветвей в окрестности $\delta_1 = 0$, которое увеличивается с ростом ω_{14}, формируя две восходящие средние вет-

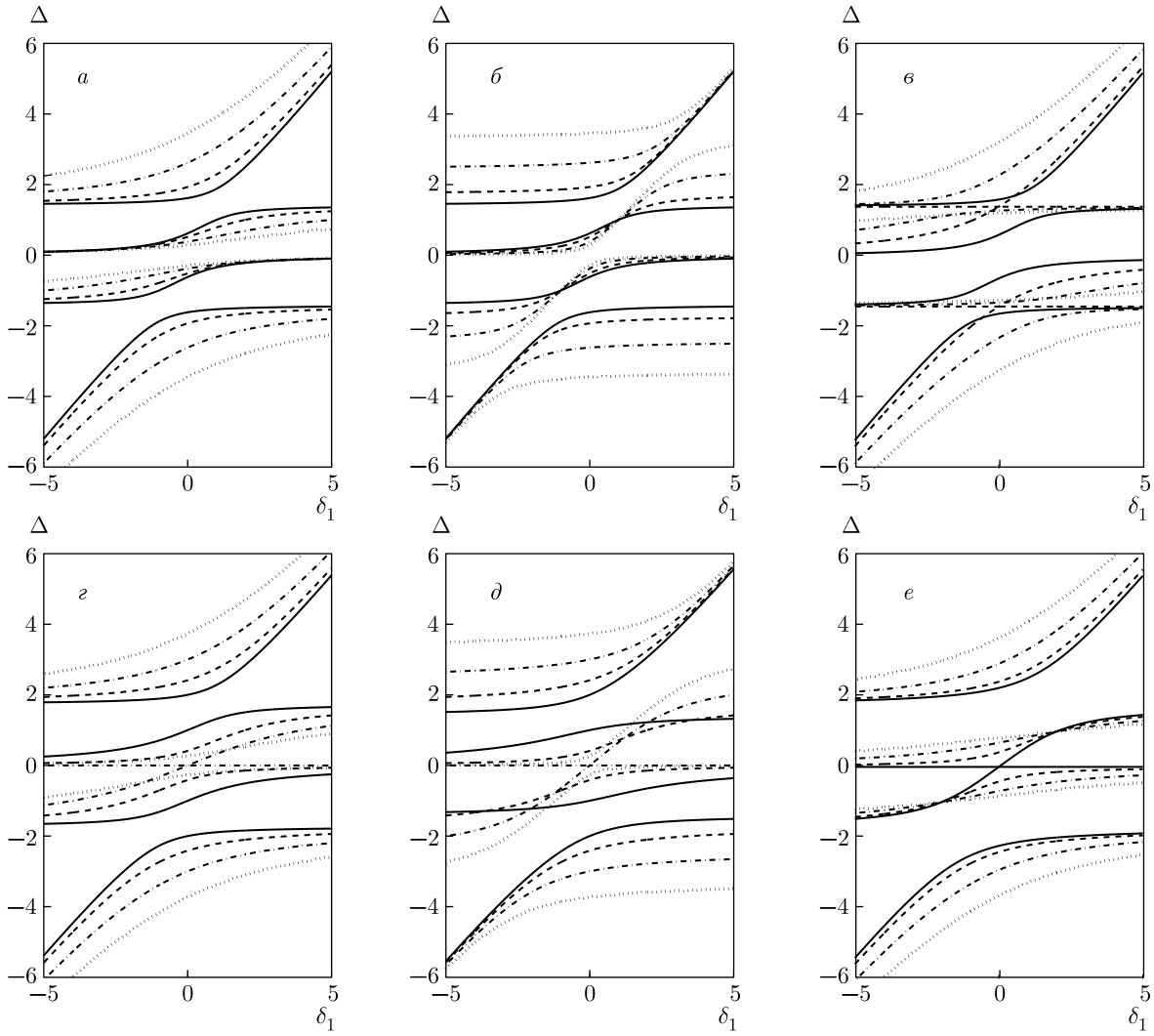


Рис. 4. Законы дисперсии $\Delta(\delta_1)$, когда $\delta_2 = \delta_3 = 0$, разность фаз $\Theta_i = \pi/2$ ($i = 1$–4) и нормированные частоты Раби $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{12} = 1$: *а* — $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$ и различные ω_{13}; *б* — $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$ и различные ω_{24}; *в* — $\omega_{24} = \omega_{13} = 0$ и различные ω_{14}; *г* — $\omega_{14} = \omega_{24} = 1$ и различные ω_{13}; *д* — $\omega_{14} = \omega_{13} = 1$ и различные ω_{24}; *е* — $\omega_{24} = \omega_{13} = 1$ и различные ω_{14}. На всех рисунках тип линии соответствует следующим значениям нормированных изменяющихся частот Раби ω_{13}, ω_{24}, ω_{14}: 0 — сплошные; 1 — штриховые; 2 — штрихпунктирные; 3 — пунктирные

ви закона дисперсии, которые отталкиваются друг от друга. При этом увеличение ω_{14} также приводит к симметричному смещению верхней и нижней поляритонных ветвей относительно $\Delta = 0$.

Рассмотрим поведение ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_1)$ и изучим влияние многофотонных переходов в случае, когда разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4) при $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ (рис. 5*а*). С ростом параметра ω_{13} происходит сближение верхней и средней поляритонных ветвей закона дисперсии в коротковолновой области спектра, а также средней и нижней ветвей в длинноволновой области спектра. Затем нижняя и средняя ветви расталкиваются, и происходит дальнейшее сближение средней и верхней ветвей. Дальнейший рост ω_{13} приводит к отталкиванию верхней и нижней ветвей и сближению средних ветвей в области $\delta_1 > 0$. В случае $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$ на рис. 5*б* видно, что при $\omega_{24} = 1$ средняя ветвь закона дисперсии представляет собой прямую $\Delta = 1$. Дальнейший рост параметра ω_{24} приводит к восстановлению восходящего характера средней ветви с ростом δ_1, постепенному расталкиванию средних ветвей и последующему смещению всех че-

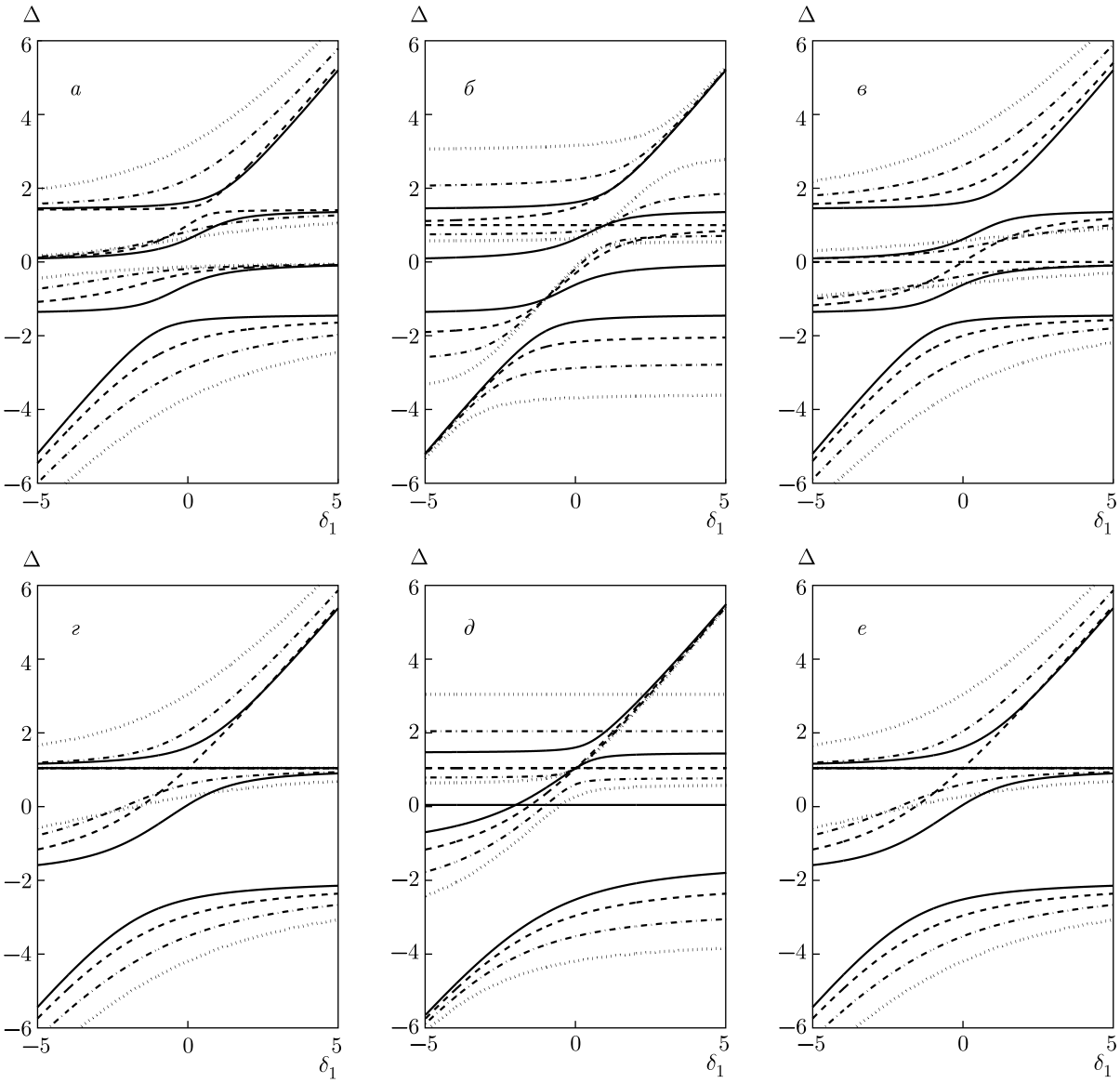


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4)

тырех ветвей закона дисперсии в длинноволновую и коротковолновую области. При $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{14} \geq 0$ (рис. 5*в*) с ростом параметра ω_{14} наблюдается сближение средних ветвей. При $\omega_{14} = 1$ происходит пересечение в точке $\delta_1 = 0$, одна из ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$, тогда как другая монотонно возрастает с ростом δ_1. Дальнейший рост параметра приводит к смещению всех четырех ветвей закона дисперсии в длинноволновую и коротковолновую области.

При $\omega_{14} = \omega_{24} = 1$, а $\omega_{13} \geq 0$ закон дисперсии (рис. 5*г*) состоит из четырех ветвей. Одна из средних ветвей представляет собой прямую $\Delta = 1$, тогда как другая монотонно возрастает с ростом δ_1. Увеличение параметра ω_{13} приводит к сильному сближению верхней и обеих средних ветвей закона дисперсии. При $\omega_{13} = 1$ возникает пересечение трех ветвей закона дисперсии в точке $\delta_1 = 0$, при этом происходит изменение структуры закона дисперсии — он состоит из трех ветвей, поскольку корень $\Delta = 1$ уравнения (16) становится двукратно вырожденным. Дальнейшее увеличение параметра приводит к расталкиванию средних и верхней ветвей и последующему смещению всех четырех ветвей закона дисперсии в длинноволновую и коротковолновую области, при этом средняя ветвь представляет собой прямую $\Delta = 1$.

При $\omega_{14} = \omega_{13} = 1$, а $\omega_{24} \geq 0$ (рис. 5*д*) закон дисперсии состоит из четырех ветвей, одна из средних ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$, тогда как другая монотонно возрастает с ростом δ_1. При этом имеет место пересечение средних ветвей закона дисперсии. С ростом параметра обе средние ветви вырождаются в прямую $\Delta = 1$ и по-прежнему пересекают верхнюю ветвь. В данном случае наличие точки пересечения свидетельствует о существовании только одной частоты нутации атомных поляритонов. Дальнейшее увеличение параметра приводит к восстановлению структуры из четырех ветвей, при этом наблюдается сильное смещение в коротковолновую область средней ветви, которая представляет собой прямую. В этом случае существует точка пересечения между верхней и средней ветвями закона дисперсии, тогда как нижняя ветвь смещается незначительно.

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии, когда $\omega_{13} = \omega_{24} = 1, \omega_{14} \geq 0$ (рис. 5*е*). В этом случае поведение ветвей закона дисперсии в точности повторяет поведение ветвей при $\omega_{14} = \omega_{24} = 1$ и $\omega_{13} \geq 0$ (см. рис. 5*г*), что свидетельствует об одинаковом влиянии учета двухфотонного перехода $1 \leftrightarrows 3$ и трехфотонного перехода. В случае, когда разности фаз $\Theta_i = \pi$ ($i = 1$–4), поведение ветвей закона дисперсии будет аналогично описанному при $\Theta_i = 0$ с сохранением характера изменений поведения ветвей в длинноволновой области $\Delta < 0$.

На рис. 4, 5 видно, что при учете процессов двухфотонного возбуждения атома в условиях точного резонанса второго и третьего импульсов ($\delta_2 = 0$, $\delta_3 = 0$) возникают эффекты пересечения верхней и средней ветвей в коротковолновой области спектра при $\Theta_i = 0$. При $\Theta_i = \pi/2$ возникает эффект пересечения средних ветвей закона дисперсии в точке $\delta_1 = 0$ при $\omega_{13} = 1$, $\omega_{24} = 1$, т. е. при условии равенства частот Раби Ω_{12}, Ω_{13} и Ω_{24}. На рис. 4*б* видно, что учет трехфотонного процесса возбуждения атома при отсутствии двухфотонных процессов ($\omega_{13} = 0$, $\omega_{24} = 0$) приводит к возникновению эффекта пересечения верхней и средней ветвей в точке $\Delta = \sqrt{2}$ и нижней и средней поляритонных ветвей закона дисперсии в точке $\Delta = -\sqrt{2}$ при $\Theta_i = \pi/2$. Это обусловлено преобразованием выражения (16) в биквадратное уравнение вида $ax^4 + cx^2 + e = 0$ с действительными коэффициентами и $a \neq 0$ [33]. Наличие точек пересечения в этом случае означает, что существует только одна частота нутации атомных поляритонов.

При $\Theta_i = 0$ наблюдается пересечение средних ветвей в точке $\delta_1 = 0$ при $\omega_{13} = \omega_{24} = \omega_{14} = 1$. При одновременном учете двухфотонных и трехфотонных процессов ($\omega_{13} = \omega_{24} = 1$, $\omega_{14} = 2$) и значениях разностей фаз $\Theta_i = 0$ наблюдается вырождение средних ветвей в одну и пересечение с верхней поляритонной ветвью в коротковолновой области при условии равенства частот Раби Ω_{12}, Ω_{13}, Ω_{24} и Ω_{14}. Следовательно, если изменять плотности второго f_{20} и третьего f_{30} импульсов, то частоты Раби становятся одинаковыми при определенных значениях f_{20} и f_{30}. Дальнейший рост плотностей f_{20} и f_{30} снимает пересечение ветвей закона дисперсии, и снова восстанавливается структура из четырех непересекающихся ветвей. Сближение и удаление поляритонных ветвей при изменении плотностей фотонов f_{20} и f_{30} соответствует изменению поляритонных частот Раби и возникновению эффекта индуцированной мощным полем первого импульса оптической связи атома с излучением.

Представленные на рис. 4, 5 результаты свидетельствуют о том, что нормированные частоты Раби двухфотонных ω_{13}, ω_{24} и трехфотонного ω_{14} переходов являются важными параметрами, определяющими особенности поведения ветвей закона дисперсии атомных поляритонов.

Будем считать, что частота $\omega_2 = ck_2$ фотонов второго импульса, действующего между уровнями 2 и 3, непрерывно изменяется, тогда как частоты ω_1 и ω_3, фотонов первого и третьего импульсов являются фиксированными параметрами, $\delta_1 = \delta_3 = \text{const}$. В условиях точного резонанса ($\delta_1 = \delta_3 = 0$) выражение (11) примет вид

$$\begin{gathered}\Delta^4+2\Delta^3\delta_2-\Delta^2(1+\omega_{13}^2+\omega_{14}^2+\omega_{23}^2+\omega_{24}^2+\omega_{34}^2-\delta_2^2)+\\ +\Delta(2\omega_{13}\omega_{34}\omega_{14}\cos\Theta_4+2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_3+\\ +2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1+2\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2-\\ -\delta_2(\omega_{13}^2+\omega_{14}^2+\omega_{23}^2+\omega_{24}^2+2))-\\ -2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{14}\cos(\Theta_2+\Theta_4)-\\ -2\omega_{13}\omega_{24}\omega_{34}\cos(\Theta_1-\Theta_4)-\\ -2\omega_{23}\omega_{14}\omega_{13}\omega_{24}\cos(\Theta_1-\Theta_2)+\\ +2\omega_{23}\omega_{13}\delta_2\cos\Theta_2+2\omega_{14}\omega_{24}\delta_2\cos\Theta_1+\\ +\omega_{34}^2+\omega_{23}^2\omega_{14}^2+\omega_{13}^2\omega_{24}^2-\delta_2^3=0. \quad (18)\end{gathered}$$

Закон дисперсии атомных поляритонов представляет собой уравнение четвертой степени. Для построения графиков $\Delta(\delta_2)$ и анализа корней уравнения (18) воспользуемся подходом, развитым в работах [31, 32]. Закон дисперсии атомных поляритонов в зависимости от непрерывно изменяющейся расстройки δ_2 фотонов второго импульса, действующего между уровнями 2 и 3, представлен на рис. 6, 7.

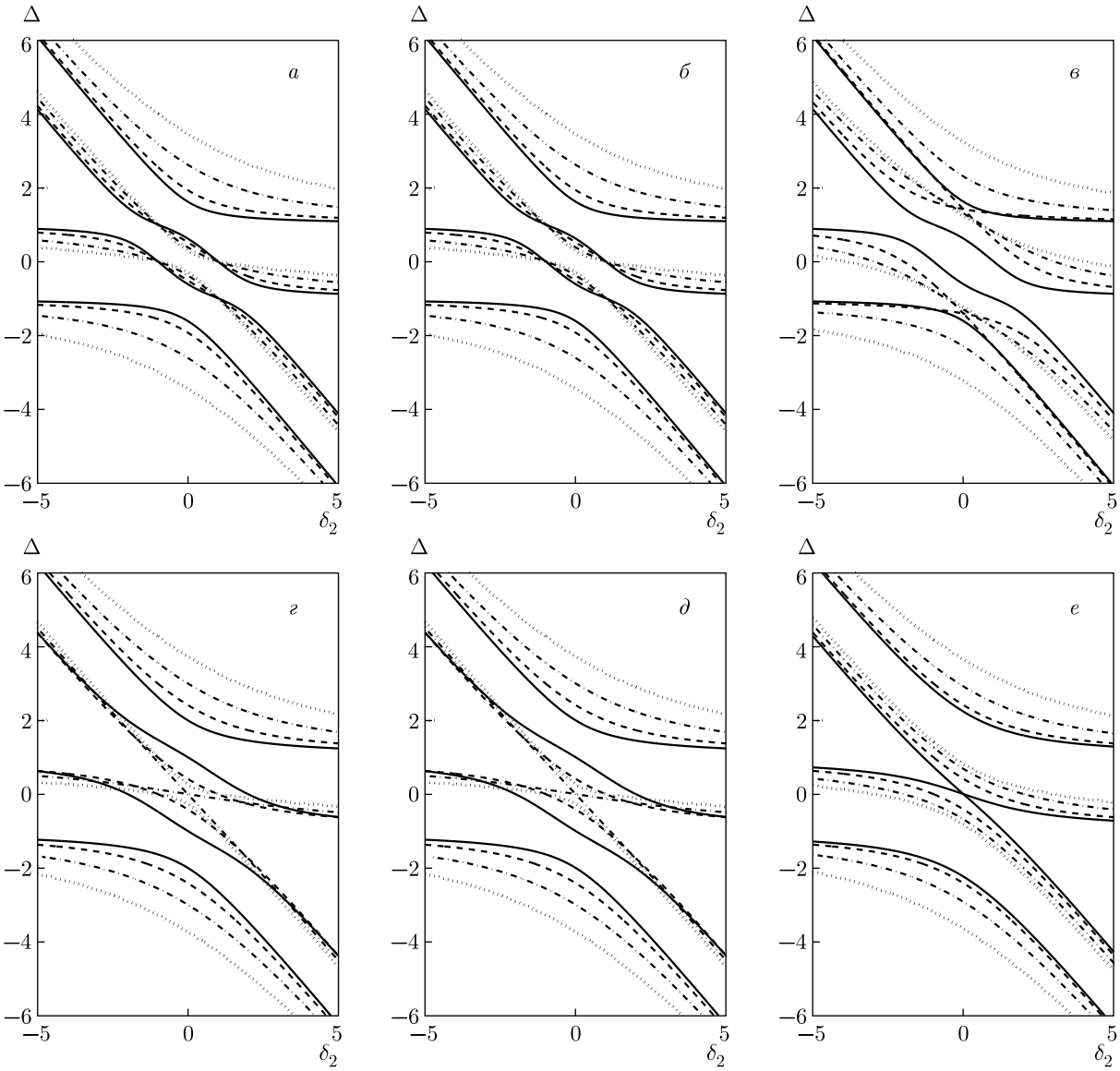


Рис. 6. Законы дисперсии $\Delta(\delta_2)$, когда $\delta_1 = \delta_3 = 0$, разность фаз $\Theta_i = \pi/2$ и нормированные частоты Раби $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{12} = 1$ (остальные обозначения, как на рис. 4)

Видно, что закон дисперсии $\Delta(\delta_2)$ в этом случае состоит из четырех ниспадающих ветвей.

Рассмотрим поведение ветвей при $\Theta_i = \pi/2$ ($i = 1$–4) и изучим влияние многофотонных переходов. Если $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ (рис. 6*а*), то с ростом ω_{13} средние поляритонные ветви медленно сближаются, изменяя свою форму в окрестности $\delta_2 = 0$; при этом верхняя и нижняя поляритонные ветви симметрично удаляются друг от друга, смещаясь соответственно в коротковолновую и длинноволновую области спектра. Если положить $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$ и увеличивать ω_{24}, то закон дисперсии в точности повторяет рис. 6*б*, что позволяет сделать вывод об одинаковом влиянии учета двухфотонных переходов на поведение ветвей закона дисперсии.

При $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$, а $\omega_{14} \geq 0$ наблюдается сближение между верхней и средней ветвями в коротковолновой области $\Delta > 0$ и между нижней и средней ветвями в длинноволновой области $\Delta < 0$ (рис. 6*в*). Ветви сближаются при росте частоты Раби ω_{14}, и при $\omega_{14} = 1$ возникает пересечение ветвей закона дисперсии. Дальнейший рост ω_{14} приводит к симметричному расталкиванию ветвей и восстановлению структуры из четырех непересекающихся

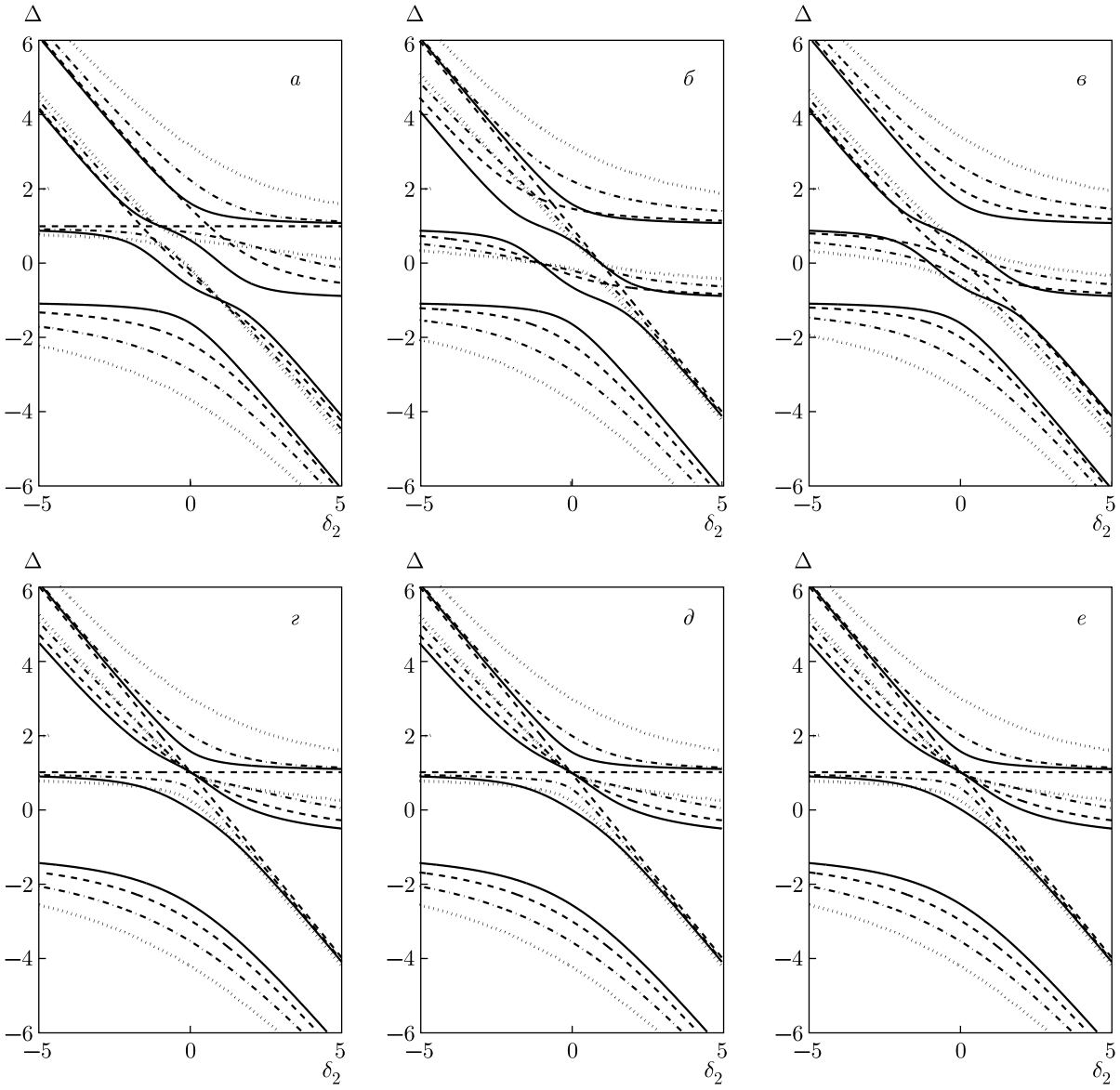


Рис. 7. То же, что на рис. 6, но для разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4)

нисходящих ветвей, которые постепенно смещаются — верхняя и средняя в коротковолновую область $\Delta > 0$, а нижняя и средняя в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 6*в*).

Если положить $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$ и изменять ω_{13} либо положить $\omega_{13} = \omega_{14} = 1$ и изменять ω_{24}, т. е. если изучать влияние двухфотонных переходов на поведение ветвей закона дисперсии, то на рис. 6*г,д* видно, что поведение ветвей одинаково. При $\omega_{24} = 0$ либо $\omega_{13} = 0$, т. е. при включенном одном из двухфотонных переходов, наблюдается сближение между верхней и средней и нижней и средней поляритонными ветвями; увеличение одного из параметров приводит к сближению средних ветвей закона дисперсии в окрестности $\delta_2 = 0$, и при значении $\omega_{24} = 2$ либо $\omega_{13} = 2$ возникает пересечение средних ветвей в точке $\delta_2 = 0$. Дальнейшее увеличение параметров приводит к восстановлению структуры из четырех ниспадающих ветвей.

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии в случае, когда $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$, а $\omega_{14} \geq 0$ (рис. 6*е*). При $\omega_{14} = 0$ наблюдается пересечение двух средних ветвей закона дисперсии, обе ветви проходят через точку $\delta_2 = 0$, при этом одна из них носит нисходящий с ростом δ_2 характер и представляет собой прямую. Увеличение параметра ω_{14} приводит

к симметричному расталкиванию средних ветвей и одновременному смещению верхней и средней ветвей в коротковолновую область $\Delta > 0$ и нижней и средней ветвей в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 6*е*).

Рассмотрим поведение ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_2)$ и изучим влияние многофотонных переходов в случае, если разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4). При $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ (рис. 7*а*) при увеличении ω_{13} происходит сближение верхней и средних ветвей, при этом изменяется форма средних ветвей закона дисперсии, и при $\omega_{13} = 1$ одновременно возникают два пересечения средних ветвей в области $\delta_2 > 0$ и средней и верхней ветвей в области $\delta_2 < 0$. Дальнейшее увеличение параметра ω_{13} приводит к восстановлению структуры из четырех непересекающихся нисходящих ветвей, которые постепенно смещаются — верхняя и средняя в коротковолновую область $\Delta > 0$, а нижняя и средняя в длинноволновую область $\Delta < 0$.

Если положить $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$ и увеличивать ω_{24} (рис. 7*б*), то при увеличении ω_{24} происходит сближение нижней и средней ветвей закона дисперсии с изменением формы средних ветвей; одновременно возникают два пересечения средних ветвей в области $\delta_2 < 0$ и средней и нижней ветвей в области $\delta_2 > 0$. Дальнейшее увеличение параметра ω_{24} приводит к восстановлению структуры из четырех непересекающихся ветвей.

При $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{14} \geq 0$ (рис. 7*в*) средние ветви сближаются при росте частоты Раби ω_{14} и пересекаются при $\omega_{14} = 1$. Дальнейший рост ω_{14} приводит к симметричному расталкиванию ветвей закона дисперсии и восстановлению структуры из четырех непересекающихся нисходящих ветвей, которые постепенно смещаются — верхняя и средняя в коротковолновую область $\Delta > 0$, а нижняя и средняя в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 7*в*).

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии в случае, когда $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$ и изменяется одна из частот двухфотонного перехода ω_{13} (рис. 7*г*). При увеличении ω_{13} происходит сильное сближение средних и верхней ветвей закона дисперсии в окрестности $\delta_2 = 0$, затем при $\omega_{13} = 1$ — пересечение трех ветвей (двух средних и верхней) в коротковолновой области $\Delta > 0$ в точке $\delta_2 = 0$; при этом существенно изменяется форма верхней средней и верхней ветвей — они представляют собой прямые (рис. 7*г*). Дальнейшее увеличение параметра приводит к восстановлению структуры из четырех непересекающихся ветвей, которые постепенно смещаются — верхняя и средняя в коротковолновую область $\Delta > 0$, а нижняя и средняя в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 7*г*).

На рис. 7*д* видно, что идентичное поведение ветвей закона дисперсии можно наблюдать, если $\omega_{13} = \omega_{14} = 1$ и изменяется частота двухфотонного перехода ω_{24}, а также, если $\omega_{24} = \omega_{13} = 1$ и изменяется частота трехфотонного перехода ω_{14} (рис. 7*е*). Наличие точки пересечения трех ветвей закона дисперсии означает, что при данных значениях частот существует только одна частота нутации атомных поляритонов, а учет одного из многофотонных переходов приводит к перестройке энергетического спектра четырехуровневого атома.

Будем считать, что частота $\omega_3 = ck_3$ фотонов третьего импульса, действующего между уровнями 3 и 4, непрерывно изменяется, тогда как частоты ω_1 и ω_2 фотонов первого и второго импульсов являются фиксированными параметрами, $\delta_1 = \delta_2 = \mathrm{const}$. В условиях точного резонанса ($\delta_1 = \delta_2 = 0$) выражение (11) примет вид

$$\begin{gathered}\Delta^4+\Delta^3\delta_3-\Delta^2(1+\omega_{13}^2+\omega_{14}^2+\omega_{23}^2+\omega_{24}^2+\omega_{34}^2)+\\ +\Delta(2\omega_{13}\omega_{34}\omega_{14}\cos\Theta_4+2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24}\cos\Theta_3+\\ +2\omega_{14}\omega_{24}\cos\Theta_1+2\omega_{23}\omega_{13}\cos\Theta_2-\\ -\delta_3(\omega_{13}^2+\omega_{23}^2+1))-2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{14}\cos(\Theta_2+\Theta_4)-\\ -2\omega_{13}\omega_{24}\omega_{34}\cos(\Theta_1-\Theta_4)-\\ -2\omega_{23}\omega_{14}\omega_{13}\omega_{24}\cos(\Theta_1-\Theta_2)+\\ +2\omega_{23}\omega_{13}\delta_3\cos\Theta_2+\omega_{34}^2+\omega_{23}^2\omega_{14}^2+\omega_{13}^2\omega_{24}^2=0. \quad (19)\end{gathered}$$

Закон дисперсии атомных поляритонов представляет собой уравнение четвертой степени. Для построения графиков $\Delta(\delta_3)$ и анализа корней уравнения (19) воспользуемся подходом, описанным выше. Закон дисперсии атомных поляритонов в зависимости от непрерывно изменяющейся расстройки δ_3 фотонов третьего импульса, действующего между уровнями 3 и 4, представлен на рис. 8, 9. Видно, что закон дисперсии $\Delta(\delta_3)$ в этом случае состоит из четырех ниспадающих ветвей.

Рассмотрим поведение ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_3)$ при $\Theta_i = \pi/2$ ($i = 1$–4) и изучим влияние многофотонных переходов. Если положить $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ и увеличивать ω_{13}, то средние ветви закона дисперсии сближаются в окрестности $\delta_3 = 0$ и одновременно возникают области сужения между средней и верхней ветвями в области $\delta_3 < 0$ и средней и нижней ветвями в области $\delta_3 > 0$ (рис. 8*а*). Если $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$, (рис. 8*б*), то с ростом ω_{24} происходит сближение средних ветвей закона дисперсии и симметричное смещение верхней

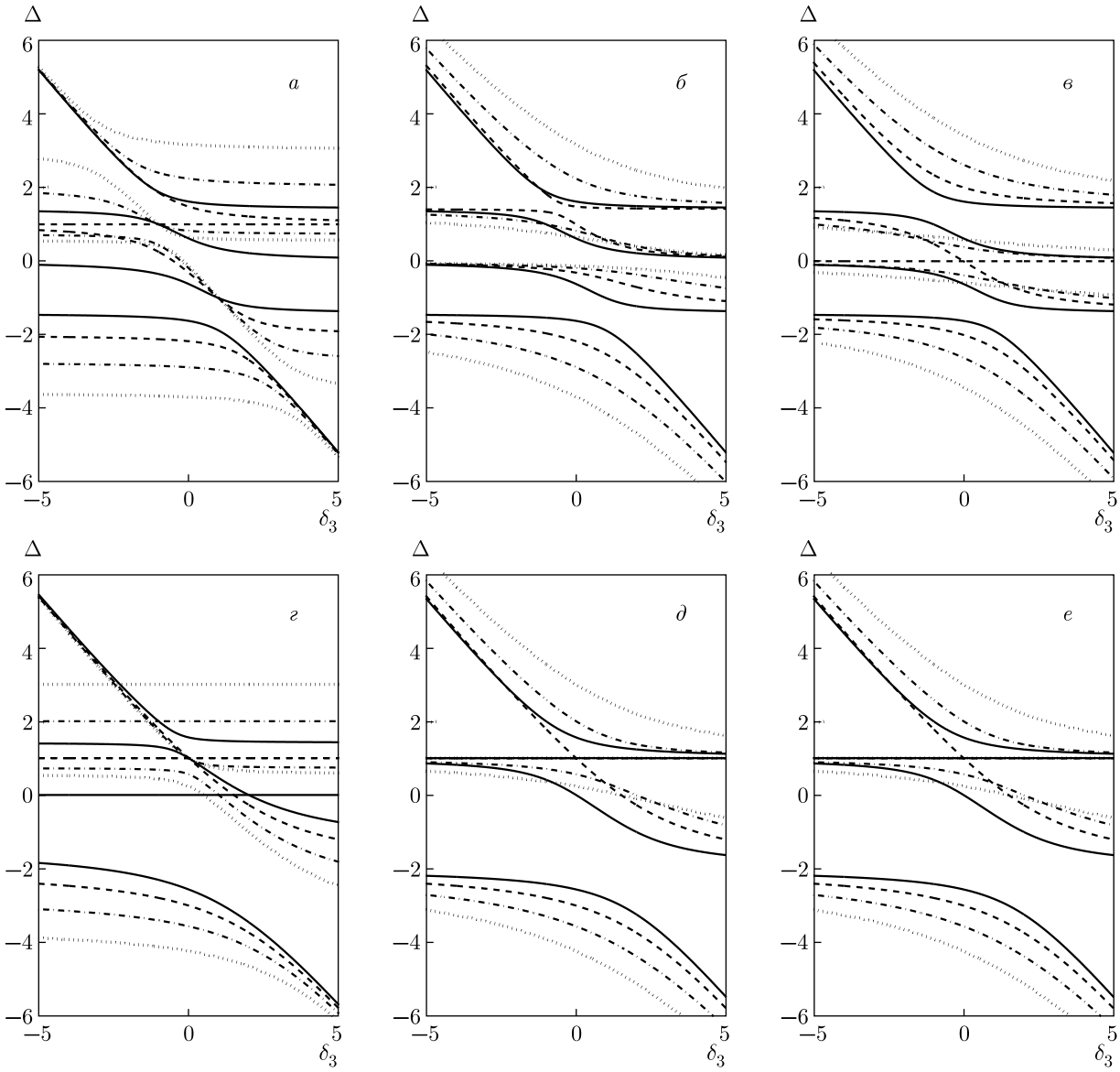


Рис. 8. Законы дисперсии $\Delta(\delta_3)$, когда $\delta_1 = \delta_2 = 0$, разность фаз $\Theta_i = \pi/2$ ($i = 1$–4) и нормированные частоты Раби $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{12} = 1$ (остальные параметры такие же, как на рис. 4)

и нижней ветвей соответственно в коротковолновую область $\Delta > 0$ и в длинноволновую область $\Delta < 0$.

При $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{14} \geq 0$ пересечение верхней и средней ветвей и нижней и средней ветвей наблюдается при $\omega_{14} = 1$, при этом средние ветви представляют собой прямые, не зависящие от δ_3 (рис. 8*в*). Дальнейший рост ω_{14} приводит к восстановлению структуры из четырех непересекающихся нисходящих ветвей с симметричным расталкиванием ветвей и смещением в коротковолновую $\Delta > 0$ и длинноволновую $\Delta < 0$ области (рис. 8*в*). В случае, если положить $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$ и изменять ω_{13}, то с ростом ω_{13} происходит сближение средних ветвей закона дисперсии в окрестности $\delta_3 = 0$ и одновременное смещение верхней и средней ветвей соответственно в область $\Delta > 0$ и в область $\Delta < 0$. При $\omega_{13} = 2$ возникает пересечение средних ветвей в точке $\delta_3 = 0$ (рис. 8*г*).

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии в случае, когда $\omega_{13} = \omega_{14} = 1$ и $\omega_{24} \geq 0$ (рис. 8*д*). При $\omega_{24} = 0$ средние ветви закона дисперсии пересекаются в точке $\delta_3 = 0$, причем одна из них представляет собой прямую $\Delta = 0$, увеличение частоты Раби ω_{24} двухфотонного перехо-

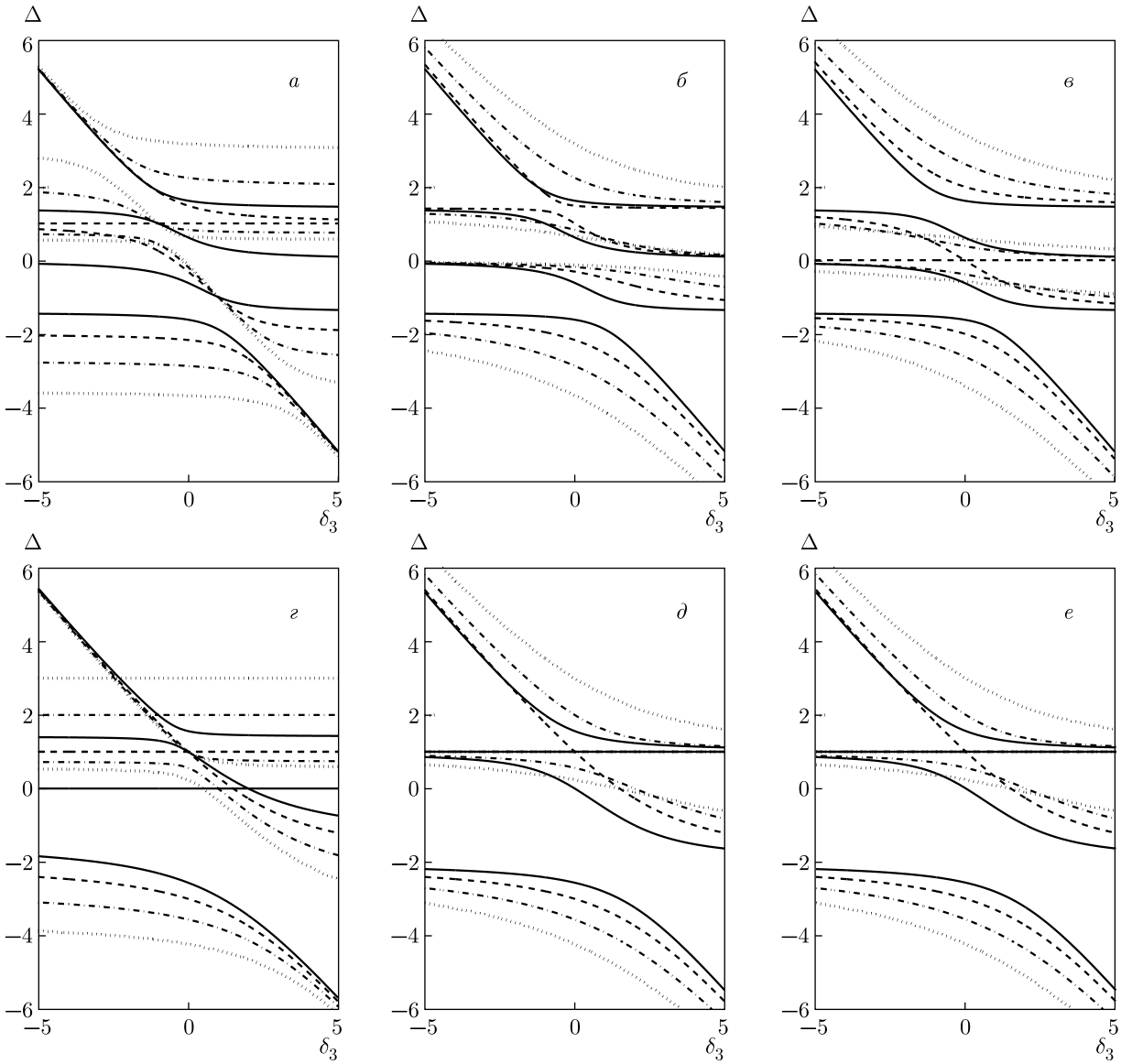


Рис. 9. То же, что на рис. 7, но для разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4)

да приводит к симметричному расталкиванию средних ветвей и одновременному смещению верхней и нижней ветвей соответственно в коротковолновую область $\Delta > 0$ и в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 8*д*). Если положить $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$ и изменять ω_{14} (рис. 8*е*), то поведение ветвей закона дисперсии качественно повторяет рис. 8*д*.

Рассмотрим поведение ветвей закона дисперсии $\Delta(\delta_3)$ и изучим влияние многофотонных переходов в случае, если разности фаз $\Theta_i = 0$ ($i = 1$–4). При $\omega_{14} = \omega_{24} = 0$, а $\omega_{13} \geq 0$ с ростом параметра ω_{13} происходит сильное сближение верхней и средней поляритонных ветвей закона дисперсии в коротковолновой области спектра, а затем сильное сближение средних ветвей и одновременное смещение верхней и нижней ветвей друг относительно друга (рис. 9*а*). При $\omega_{13} = 1$ наблюдается изменение формы одной из средних ветвей закона дисперсии — она представляет собой прямую $\Delta = 0$, не зависящую от δ_3. При $\omega_{14} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{24} \geq 0$ (рис. 9*б*) увеличение ω_{24} приводит к несимметричному сближению средних ветвей и сближению средней и верхней ветвей закона дисперсии. Дальнейшее увеличение ω_{24} ведет к расталкиванию ветвей закона дисперсии и смещению в коротковолновую область $\Delta > 0$ и в длинноволновую область $\Delta < 0$ (рис. 9*б*).

При $\omega_{24} = \omega_{13} = 0$, а $\omega_{14} \geq 0$ (рис. 9*в*) с ростом параметра ω_{14} наблюдается сближение средних ветвей, при $\omega_{14} = 1$ происходит их схлопывание с возникновением пересечения в точке $\delta_3 = 0$; при этом одна из ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$ и не зависит от δ_3, тогда как другая монотонно возрастает с ростом δ_3. Дальнейший рост параметра приводит к восстановлению структуры ветвей закона дисперсии и одновременному симметричному расталкиванию средних ветвей и последующему симметричному смещению всех четырех ветвей закона дисперсии в длинноволновую и коротковолновую области.

Рассмотрим теперь поведение ветвей закона дисперсии в случае, когда $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$, и будем изменять значение параметра ω_{13} (рис. 9*г*). При $\omega_{13} = 0$ можно наблюдать пересечение средних ветвей закона дисперсии, одна из которых представляет собой прямую, не зависящую от δ_3 в области $\delta_3 < 0$, и сильное сближение нижней и средней ветвей в области $\delta_3 = 0$. С ростом ω_{13} происходит смещение пресечения средних ветвей в область меньших расстроек резонанса δ_3; при этом верхняя ветвь закона дисперсии изменяет свою форму и пересекается со средней ветвью, представляя собой прямую, не зависящую от δ_3 и образуя пересечение в точке $\delta_3 = 0$ (рис. 9*г*).

Дальнейшее увеличение приводит к расщеплению ветвей закона дисперсии; при этом средняя ветвь по-прежнему пресекается с верхней ветвью в области $\delta_3 > 0$. Если положить $\omega_{13} = \omega_{14} = 1$ и изменять ω_{24}, то закон дисперсии представляет собой структуру из четырех непересекающихся нисходящих ветвей, одна из средних ветвей представляет собой прямую $\Delta = 0$ и не зависит от δ_3 (рис. 9*д*). При $\omega_{24} = 1$ возникает сближение средней и верхней ветвей закона дисперсии, ветви преобразуются в прямую, не зависящую от δ_3, и возникает пересечение средней и верхней ветвей закона дисперсии в точке $\delta_3 = 0$. Дальнейшее увеличение ω_{24} приводит к восстановлению структуры из четырех непересекающихся ветвей закона дисперсии и последующему симметричному смещению всех четырех ветвей в длинноволновую и коротковолновую области (рис. 9*д*). При $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$ и $\omega_{14} \geq 0$ на рис. 9*е* можно видеть, что поведение ветвей закона дисперсии полностью повторяет случай, представленный на рис. 9*д*.

Из анализа выражений (18), (19) и представленных на рис. 6– 9 результатов можно сделать вывод, что важным параметром, определяющим особенности поведения ветвей закона дисперсии атомных поляритонов являются расстройка резонанса δ_2 второго импульса в области перехода между уровнями 2 и 3 и расстройка резонанса δ_3 третьего импульса в области перехода между уровнями 3 и 4 (рис. 10).

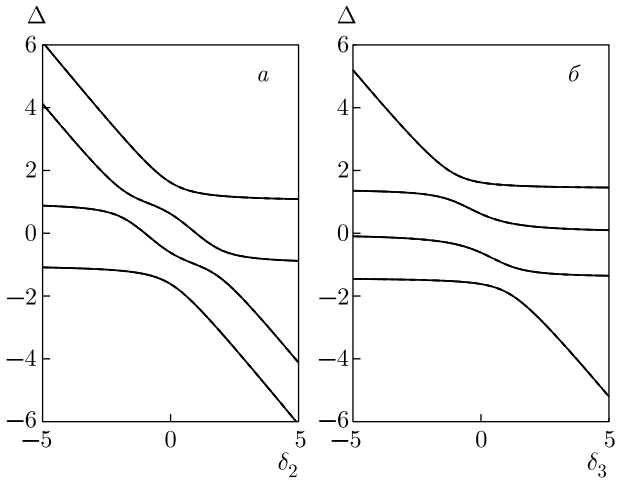


Рис. 10. Законы дисперсии $\Delta(\delta_2)$ при $\delta_1 = \delta_3 = 0$ (*а*) и $\Delta(\delta_3)$ при $\delta_1 = \delta_2 = 0$ (*б*) и значениях нормированных частот Раби $\omega_{23} = \omega_{34} = \omega_{12} = 1$ без учета многофотонных переходов ($\omega_{14} = \omega_{24} = \omega_{13} = 0$)

Следует отметить, что если в уравнении (7) положить $\Omega_{13} = 0$, $\Omega_{24} = 0$, $\Omega_{14} = 0$, т. е. пренебречь процессами двухфотонного и трехфотоннного возбуждения атома, то закон дисперсии представляется укороченным уравнением четвертой степени для определения собственных частот атомных поляритонов:

$$(\omega-\omega_0)(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{03}-\omega_2)(\omega-\omega_{04}-\omega_3-\omega_2) - \\ - \Omega_{12}^2(\omega-\omega_{03}-\omega_2)(\omega-\omega_{04}-\omega_3-\omega_2) - \\ - \Omega_{23}^2(\omega-\omega_1)(\omega-\omega_{04}-\omega_3-\omega_2) - \Omega_{34}^2(\omega-\omega_0)(\omega-\omega_1) + \\ + \Omega_{12}^2\Omega_{34}^2 = 0. \quad (20)$$

Видно, что в нем отсутствуют слагаемые с разностями фаз. Это означает, что процессы трех- и четырехчастичной когерентной интерференции исчезают. Используя анализ (см. Приложение), легко показать, что в этом случае при любых значениях частот Раби однофотонных переходов корни уравнения (20) всегда действительны и различны. Следовательно, пересечение ветвей закона дисперсии не наблюдается. Наличие четырех неперекрывающихся областей свидетельствует о возникновении четырех частот нутации атомных поляритонов при различных значениях частот Раби. Отсюда можно сделать вывод, что при одновременном учете одно-, двух- и трехфотонных оптических переходов возникает существенная перестройка энергетического спектра четырехуровневого атома.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что в настоящей работе представлены результаты исследования особенностей поведения закона дисперсии атомных поляритонов для четырехуровневых атомов, взаимодействующих с тремя импульсами когерентного лазерного излучения с частотами фотонов, находящимися в резонансе с оптически-разрешенными однофотонными переходами между соседними уровнями, а также с учетом прямых двухфотонных переходов и прямого трехфотонного перехода в приближении заданных плотностей фотонов трех импульсов. Показано, что в такой системе закон дисперсии представляет собой структуру из четырех ветвей, положение и форма которых определяется частотами Раби указанных шести оптических переходов, расстройками резонанса и плотностями фотонов трех импульсов. Непосредственный учет многофотонных переходов (двух- и трехфотонного) приводит к зависимости закона дисперсии атомных поляритонов от квантовых параметров — разностей фаз между константами взаимодействия, определяющими частоты Раби соответствующих переходов. Найдены значения параметров системы, при которых наблюдается пересечение ветвей закона дисперсии, что свидетельствует о возможности влияния одновременного учета одно-, двух- и трехфотонных переходов на перестройку энергетического спектра в окрестности второго уровня четырехуровневого атома.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Выражение (16) описывает кривую четвертой степени вида

$$ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e = 0$$

с действительными коэффициентами и $a \neq 0$. Характер корней выражения (16) определяется знаком его дискриминанта

$$\begin{gathered}\mathrm{Discr} = 256a^3e^3 - 192a^2bde^2 - 128a^2c^2e^2 + \\ + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 + 144ab^2ce^2 - 6ab^2d^2e - \\ - 80abc^2de + 18abcd^2 + 16ac^4e - 4ac^3d^2 - 27b^4e^2 + \\ + 18b^3cde - 4b^3d^3 - 4b^2c^3e + b^2c^2d^2.\end{gathered}$$

Введем вспомогательные многочлены

$$P = 8ac - 3b^2,$$

$$R = b^3 + 8da^2 - 4abc,$$

$$D_0 = c^2 - 3bd + 12ae,$$

$$D = 64a^3e - 16a^2c^2 + 16ab^2c - 16a^2bd - 3b^4.$$

Возможные следующие разновидности корней.

1. Если $\mathrm{Discr} > 0$, то все четыре корня уравнения действительны, если $P < 0$ и $D < 0$, то все четыре корня действительны и различны.

2. Если $\mathrm{Discr} = 0$, то тогда (и только тогда) многочлен имеет кратный корень:

а) если $P < 0$, $D < 0$ и $D_0 \neq 0$, то существуют действительный двойной корень и два вещественных простых корня;

б) если $D_0 = 0$, $D \neq 0$, то существуют тройной корень и простой корень, все действительные;

в) если $P < 0$, то есть два действительных двойных корня;

г) если $D_0 = 0$, то все четыре корня равны $-b/4a$.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Deng, H. Haug, and Y. Yamamoto, Rev. Mod. Phys. **82**, 1489 (2010).

2. I. Carusotto and C. Ciuti, Rev. Mod. Phys. **85**, 299 (2013).

3. Y. Kasprzak, M. Richard, S. Kindermann, A. Baas, P. Jeambrun, J.M.J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymanska, R. Andre, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud, and L. S. Dang, Nature **443**, 409 (2006).

4. R. Balili, V. Hartwell, D. Snoke, L. Pfeiffer, and K. West, Science **316**, 1007 (2007).

5. A. Kogar, M. S. Rak, S. Vig, A. A. Husain, F. Flicker, Y. I. Joe, L. Venema, G. J. MacDougall, T. C. Chiang, E. Fradkin, Y. van Vezel, and P. Abbamonte, Science **358**, 1314 (2017).

6. V. Agranovich, H. Benisty, and C. Weisbuch, Sol. St. Comm. **102**, 631 (1997).

7. О. А. Дубовский, В. М. Агранович, ФТТ **58**, 1371 (2016).

8. М. Л. Тер-Микаелян, УФН **167**, 1249 (1997).

9. Э. Г. Канецян, Научные труды НУАСА **III**(5), 144 (2014).

10. S. N. Sandhya, J. Phys. B **40**, 837 (2007).

11. G. Solookinejad, M. Jabbari, M. Nafar, E. Ahmadi Sangachin, and S. H. Asadpour, Int. J. Theor. Phys. **58**, 1359 (2019).

12. P. Kumar and Sh. Dasgupta, Phys. Rev. A **94**, 023851, (2016).

13. E. O. Nyakang'o, D. Shylla, K. Indumathi, and K. Pandey, Eur. Phys. J. D **74**(9), 187 (2020).

14. T. M. Autry, G. Nardin, C. L. Smallwood, K. Silverman, D. Bajoni, A. Lemaître, S. Bouchoule, J. Bloch, and S. Cundif, arXiv:2004.10845v1, 22 April 2020.

15. E. D. Valle, S. Zippilli, F. P. Laussy, A. Gonzalez-Tudela, G. Morigi, and C. Tejedor, Phys. Rev. B **81**, 035302 (2010).

16. S. M. Yoshida, S. Endo, J. Levinsen, and M. M. Parish, Phys. Rev. X **8**, 011024 (2018).

17. Z. Tan, L. Wang, M. Liu, Y. Zhu, J. Wang, and M. Zhan, arXiv:1901.00127v1, 1 Jan 2019.

18. Е. А. Якшина, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин, И. И. Бетеров, И. И. Рябцев, КЭ **48**, 10, 886 (2018).

19. B. K. Dutta and P. Panchadhyayee, Laser Phys. **28**, 045201 (2018).

20. F. E. Zimmer, J. Otterbach, R. G. Unanyan, B. W. Shore, and M. Fleischhauer, Phys. Rev. A **77**, 063823 (2008).

21. H. M. Kwak, T. Jeong, Y.-S. Lee, and H. S. Moon, Opt. Comm. **380**, 168 (2016).

22. S. K. Nath, V. Naik, A. Chakrabarti, and A. Ray, J. Opt. Soc. Amer. B **36**, 2610 (2019).

23. J. Tang, Yu. Deng, and C. Lee, Phys. Rev. Appl. **12**, 044065 (2019).

24. S. Gasparinetti, J.-C. Besse, M. Pechal, R. D. Buijs, C. Eichler, H. J. Carmichael, and A. Wallraff, Phys. Rev. A **100**, 033802 (2019).

25. П. И. Хаджи, *Нелинейные оптические процессы в системе экситонов и биэкситонов в полупроводниках*, Штиинца, Кишинев (1985), с. 209.

26. П. И. Хаджи, Л. Ю. Надькин, Д. А. Марков, ФТТ **60**, 660 (2018).

27. П. И. Хаджи, О. В. Коровай, Л. Ю. Надькин, ЖЭТФ **155**, 620 (2019).

28. П. И. Хаджи, О. В. Коровай, Л. Ю. Надькин, Письма в ЖЭТФ **107**, 623 (2018).

29. Л. Ю. Надькин, О. В. Коровай, Д. А. Марков, Опт. и спектр. **3**, 272 (2021).

30. Г. А. Корн, Т. М. Корн *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва, (1978), с. 44.

31. M. D. Yacoub and G. Fraidenraich, Math. Gazette **96**(536), 271 (2012).

32. William F. Carpenter, Math. Magazine **39**, 28 (1966).

33. С. Арушанян, А. Меликян, С. Саакян, КЭ **41**, 483 (2011).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 327–365 © 2021

ПОБОЧНЫЕ КАНАЛЫ УТЕЧКИ ИНФОРМАЦИИ В КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ: НЕ СТРОГО ОДНОФОТОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, РАЗНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕТЕКТОРОВ, КОНЕЧНЫЕ ПЕРЕДАВАЕМЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ

С. Н. Молотков*

Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Академия криптографии Российской Федерации
121552, Москва, Россия

Центр квантовых технологий, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2021 г.,
после переработки 20 апреля 2021 г.
Принята к публикации 25 апреля 2021 г.

Реализации систем квантовой криптографии существенно отличаются от идеализированных моделей, которые используются для доказательства секретности распределяемых ключей. Без учета неидеальностей реальных систем невозможно всерьез говорить о криптографической стойкости. Для практического использования систем квантовой криптографии необходимо учитывать все реальные факторы, влияющие на секретность распределяемых ключей. В работе предложен, по сути, аналитический метод, учитывающий нестрогую однофотонность информационных состояний, различные квантовые эффективности детекторов, флуктуации параметров за счет конечных передаваемых последовательностей, утечку информации через побочные каналы как при пассивном детектировании побочного излучения, так и при активном зондировании элементов системы. Состояния в побочных каналах могут иметь предельно низкую интенсивность, поэтому рассматриваются квантовым образом. Максимально возможная полная утечка информации к подслушивателю по всем каналам достигается на совместных коллективных измерениях как квантовых информационных состояний, так и квантовых состояний в побочных каналах. Метод применим при любом спектральном распределении числа фотонов в побочных каналах.

DOI: 10.31857/S0044451021090029

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовая криптография [1] — квантовое распределение ключей — один из разделов квантовых технологий, который доведен до практических применений. Квантовая криптография, по сути, является процедурой согласования двух независимых случайных последовательностей на передающей и приемной сторонах путем передачи и регистрации квантовых состояний через открытый квантовый канал связи. При этом квантовый канал связи доступен не только для прослушивания, но и для произвольных модификаций третьей нелегитимной стороной. Для согласования результатов измерений, коррекции ошибок в первичных ключах на приемной стороне и сжатия очищенных ключей используется вспомогательный классический открытый аутентичный канал связи.

Секретность ключей в квантовой криптографии базируется на фундаментальном свойстве квантовых состояний — вторжение в квантовый канал связи неизбежно приводит к возмущению передаваемых квантовых состояний и ошибкам измерений на приемной стороне.

* E-mail: sergei.molotkov@gmail.com

Анализ криптостойкости квантовой криптографии прошел длинный путь. Первоначально рассматривались «идеальные» системы квантовой криптографии и отдельные атаки на передаваемые квантовые состояния. На первом этапе предполагалось, что квантовые состояния являются строго однофотонными, что не отвечает реальной ситуации.

В реальной ситуации в качестве информационных квантовых состояний используются сильно ослабленные когерентные состояния, которые являются квазиоднофотонными — имеют пуассоновскую статистику по числу фотонов, что приводит к возникновению новых атак, которые отсутствуют в случае строго однофотонных состояний.

Предполагалось, что передающая и приемная станции изолированы от внешнего мира, т. е. подслушиватель не имеет ни прямого, ни косвенного доступа к аппаратуре. В реальности системы квантовой криптографии являются открытыми системами в том смысле, что подслушиватель может иметь опосредованный доступ через линию связи к приемной и передающей аппаратуре. Кроме того, подслушиватель может детектировать побочное излучение самой аппаратуры [2, 3].

Для практического использования систем квантовой криптографии необходимо учитывать все реальные факторы, влияющие на секретность распределяемых ключей, а именно:

1) разную и неидеальную квантовую эффективность однофотонных детекторов;

2) нестрогую однофотонность информационных состояний;

3) побочные каналы утечки информации;

4) атаки активного зондирования;

5) конечную длину передаваемых последовательностей.

Доказательство секретности ключей должно учитывать все упомянутые выше факторы. До сих пор комплексный учет всех факторов, влияющих на секретность распределяемых ключей, не сделан.

В случае строго однофотонных информационных состояний и идеальных детекторов фундаментальные энтропийные соотношения неопределенностей позволяют связать утечку информации к подслушивателю с наблюдаемой ошибкой на приемной стороне. Энтропийные соотношения неопределенностей позволяют не перебирать и не строить явно всевозможные атаки, а выразить утечку только через наблюдаемую ошибку на приемной стороне. Данный метод применим также и для конечных передаваемых последовательностей [4, 5]. При этом считалось, что измерения на приемной стороне являются идеальными — детекторы имеют идеальную и одинаковую квантовую эффективность, что также не отвечает реальной ситуации. Метод не позволяет перенести доказательство на случай неидеальных детекторов с разными квантовыми эффективностями.

Обычно в системах квантовой криптографии используется пара детекторов. В одном из базисов отсчеты в одном детекторе D_1 отвечают за регистрацию 0, в другом детекторе D_2 — за регистрацию 1. В сопряженном базисе, наоборот, отсчеты в детекторе D_2 отвечают за регистрацию 0, в детекторе D_1 — за регистрацию 1. Базисы передающей и приемной сторон раскрываются через открытый аутентичный канал связи. Информация о том, в каком базисе была регистрация, известна подслушивателю.

Интуитивно ясно, что в случае, когда квантовая эффективность одного из детекторов стремится к нулю (отсчеты имеют место только в одном из детекторов), невозможно гарантировать секретность ключей. Базис подслушивателю известен, и срабатывает только один детектор. В такой ситуации подслушиватель знает весь ключ даже без вторжения в квантовый канал связи. При этом подслушиватель не производит ошибок на приемной стороне и не обнаруживается, а система квантовой криптографии оказывается несекретной.

Как видно из приведенного простого примера, учет различных квантовых эффективностей детекторов играет принципиальную роль в обеспечении секретности ключей в квантовой криптографии даже в случае строго однофотонных состояний. В этом направлении имеются лишь частичные результаты [6].

В рамках энтропийных соотношений неопределенностей также невозможно учесть утечку информации к подслушивателю по побочным каналам. Интуитивно данный факт имеет простое объяснение. Энтропийные соотношения неопределенностей связывают утечку информации с возмущением квантовых состояний — ошибкой на приемной стороне. Утечка информации по побочным каналам, например детектирование побочного излучения передающей и приемной аппаратуры, не приводит к возмущению подслушивателем информационных состояний и ошибкам на приемной стороне. По этой причине утечка информации по побочным каналам лежит за рамками энтропийных соотношений неопределенностей.

Неоднофотонность информационных состояний приводит к атаке с расщеплением по числу фотонов (PNS-атака, Photon Number Splitting). В канале с потерями, при уровне потерь больше некоторой кри-

тической величины, данная атака приводит к тому, что подслушиватель знает весь передаваемый ключ и не производит ошибок на приемной стороне — не детектируется. Для детектирования PNS-атаки используется Decoy State-метод. Данный метод в исходном виде перестает работать при атаках активного зондирования — атаках с зондированием модулятора интенсивности, и требует обобщения. Такое обобщение было сделано в работах [7, 8].

Анализ криптостойкости систем квантовой криптографии с полным учетом неидеальностей 1)–5) до сих пор не сделан.

Цель данной работы — учесть упомянутые выше неидеальности систем квантовой криптографии в доказательстве секретности ключей.

Логика доказательства будет состоять в следующем. Секретный ключ формируется из однофотонной компоненты информационных состояний, достигающей приемной стороны. Информация, содержащаяся в многофотонных компонентах состояний в пользу подслушивателя, считается ему известной и не фигурирует в секретном ключе. Оценка доли однофотонной компоненты проводится обобщенным Decoy State-методом. Учет побочных каналов утечки информации требует построения явной атаки на состояния в квантовом канале связи. Кроме того, учет разной и неидеальной квантовой эффективности детекторов также требует явного вида однофотонной компоненты информационных состояний. Состояния в побочных каналах также необходимо рассматривать квантовым образом. Неформально говоря, данные квантовые состояния «подцепляются» явно к однофотонной компоненте состояний.

Предложен также простой метод учета флуктуаций наблюдаемых параметров, которые имеют место при конечных длинах передаваемых последовательностей.

Ниже будем последовательно включать в рассмотрение неидеальности системы, чтобы продемонстрировать, как зависит оценка длины секретного ключа от каждого из факторов.

2. СЛЕДОВОЕ РАССТОЯНИЕ, СГЛАЖЕННЫЕ min- И max-ЭНТРОПИИ

Выше была описана на неформальном уровне причина секретности ключей, которая гарантируется фундаментальными законами Природы. На формальном уровне секретность ключей в квантовой криптографии выражается в довольно абстрактных терминах, и доказательства секретности являются «многоходовыми» [4]. Для самодостаточности изложения приведем определения величин, которые используются в доказательстве секретности.

Секретность ключей в квантовой криптографии дается в терминах следовой метрики — расстояния между двумя квантовыми состояниями, описывающими реальную ситуацию после квантового распределения ключей и идеальную ситуацию, когда ключи строго равновероятны и полностью некоррелированы с квантовыми состояниями подслушивателя.

Данный критерий вызывал споры даже среди специалистов [9, 10]. Абстрактность критерия секретности ключей на основе следовой метрики не содержит интуитивно прозрачных соображений, которые были выработаны применительно к использованию ключей в классической криптографии, например, таких как переборная сложность по поиску истинного ключа, число шифр-сообщений до их первого дешифрования при условии, что шифрование происходит на ключах, полученных в результате квантового распределения.

Явная связь следового критерия секретности ключей в квантовой криптографии с переборными критериями секретности в классической криптографии была установлена в работе [11].

В задачах квантовой криптографии после передачи и измерения квантовых состояний возникает матрица плотности ρ_{XE} Алиса–Ева, которая имеет классически-квантовую структуру. Алиса имеет в своем распоряжении случайную эталонную битовую строку, к которой Ева не имеет доступа. Ева имеет в своем распоряжении квантовое состояние, которое возникает из-за вторжения в квантовый канал связи. Матрица плотности имеет вид

$$\rho_{XE}^{(n)} = \sum_{x\in\{0,1\}^n} |x\rangle_X\,{}_X\langle x| \otimes \rho_E^x, \qquad |x\rangle_X = |x_1\rangle_X \otimes |x_2\rangle_X \otimes \ldots \otimes |x_n\rangle_X. \tag{1}$$

Удобно классической битовой строке x длиной n сопоставить регистр ортогональных квантовых состояний $|x\rangle_X$, отвечающих состоянию классического регистра с последовательностью битов $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, ρ_E^x — квантовое состояние Евы, коррелированное с битовой строкой Алисы.

Для дальнейшего потребуются сглаженные min- и max-квантовые энтропии, которые мажорируют следовое расстояние. По определению имеем (см. детали в [4])

$$H_{min}^{\varepsilon}(\rho_{XE}^{(n)}|\rho_E^{(n)}) = \sup_{\overline{\rho}_{XE}^{(n)}\in\mathcal{B}^{\varepsilon}(\rho_{XE}^{(n)})} H_{min}(\overline{\rho}_{XE}^{(n)}|\overline{\rho}_E^{(n)}), \tag{2}$$

$$H^{\varepsilon}_{max}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_{E}) = \inf_{\overline{\rho}^{(n)}_{XE}\in\mathcal{B}^{\varepsilon}(\rho^{(n)}_{XE})} H_{max}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE}|\overline{\rho}^{(n)}_{E}), \quad (3)$$

далее, пусть λ — минимальное число, такое что

$$\lambda I_X \otimes \overline{\rho}^{(n)}_{E} - \overline{\rho}^{(n)}_{XE} \geq 0,$$

тогда по определению

$$H_{min}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE}|\overline{\rho}^{(n)}_{E}) = -\log(\lambda), \quad (4)$$

где $\log \equiv \log_2$. Матрицы плотности, по которым определяются inf и sup, лежат внутри шара $\mathcal{B}^{\varepsilon}(\rho_{XE})$,

$$\mathrm{Tr}\{|\rho^{(n)}_{XE} - \overline{\rho}^{(n)}_{XE}|\} = ||\rho^{(n)}_{XE} - \overline{\rho}^{(n)}_{XE}||_1 \leq \varepsilon. \quad (5)$$

Для дальнейшего будет полезно эквивалентное определение, которое следует из (4):

$$H_{min}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE}|\overline{\rho}^{(n)}_{E}) = -\log(\lambda_{max}((I_X \otimes (\overline{\rho}^{(n)}_{E})^{-1/2}) \times \times \overline{\rho}^{(n)}_{XE}(I_X \otimes (\overline{\rho}^{(n)}_{E})^{-1/2}))), \quad (6)$$

где

$$\lambda_{max}((I_X \otimes (\overline{\rho}^{(n)}_{E})^{-1/2})\overline{\rho}^{(n)}_{XE}(I_X \otimes (\overline{\rho}^{(n)}_{E})^{-1/2}))$$

— максимальное собственное число оператора в скобках (6). Далее

$$H_{max}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE}|\overline{\rho}^{(n)}_{E}) = \log(\mathrm{Tr}\{I_X \otimes \overline{\rho}^{(n)}_{E}\mathcal{P}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE})\}), \quad (7)$$

где $\mathcal{P}(\overline{\rho}^{(n)}_{XE})$ — проектор на носитель матрицы плотности $\overline{\rho}^{(n)}_{XE}$.

Данные определения предполагают минимизацию/максимизацию по матрицам плотности, лежащим в некоторой области пространства состояний. При конкретных практических вычислениях такая минимизация/максимизация вряд ли возможна. Кроме того, данные определения предполагают, что матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ (центр шара) известна точно. В реальной ситуации матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ точно не известна по двум причинам. Первая — передаваемые последовательности имеют конечную длину, поэтому можно получить лишь оценку самой $\rho^{(n)}_{XE}$. Вторая причина состоит в том, что даже если матрица плотности всей последовательности точно известна и имеет структуру тензорного произведения, $\rho^{(n)}_{XE} = \rho^{\otimes n}_{XE}$, то вычислить сглаженные энтропии точно не удается, можно лишь получить верхнюю/нижнюю оценку для сглаженных энтропий.

По этим причинам приходится делать двойное усечение матрицы плотности — вычисление сглаженных энтропий в два этапа (см. подробности ниже). На первом этапе оценивается матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ — центр шара. На втором этапе получается верхняя/нижняя оценка для сглаженных энтропий.

3. СЛЕДОВОЕ РАССТОЯНИЕ И КРИТЕРИЙ СЕКРЕТНОСТИ КЛЮЧЕЙ

Секретность ключей в квантовой криптографии формулируется в терминах следового расстояния [4]. После передачи и регистрации квантовых состояний, но до коррекции ошибок у Боба, квантовое состояние Алиса–Ева описывается матрицей плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ (1), которая содержит корреляции между эталонной битовой строкой Алисы и квантовой системой Евы. После коррекции ошибок через открытый аутентичный канал связи Ева получает дополнительную информацию о битовой строке Алисы. При коррекции ошибок через открытый канал между Алисой и Бобом передается множество битовых строк $\mathcal{C}$.

После коррекции ошибок Алиса и Боб проводят усиление секретности очищенного ключа при помощи универсальных хеш-функций второго порядка, которое сводится к сжатию очищенной битовой строки $f : x = \{0,1\}^n \to \ell = \{0,1\}^{\ell}$. Хеш-функция сама является случайной величиной, которая равновероятно выбирается из множества хеш-функций $\mathcal{F}$. Выбор хеш-функции проводится через открытый канал связи и известен Еве.

Универсальные хеш-функции второго порядка обладают свойством [12]

$$\Pr_{f\in\mathcal{F}}\{f(x) = f(x')\} < \frac{1}{2^{\ell}} \quad \forall \quad x \neq x'. \quad (8)$$

После усиления секретности матрица плотности Алиса–Ева и матрица плотности Евы, коррелированная с битовой строкой x, переходит в новую матрицу плотности $\rho^{(n)}_{XE} \to \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)}$.

После сжатия следовое расстояние мажорируется условной min-энтропией (см. детали в [4]):

$$||\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)} - \rho_{\mathcal{F}(U_X)} \otimes \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}||_1 < < 2^{-(1/2)(H_{min}(\rho^{(n)}_{XEC}|\rho^{(n)}_{EC})-\ell)} = = 2^{-(1/2)(H_{min}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_{E})-\log|\mathcal{C}|-\ell)}. \quad (9)$$

Отметим, что в правой части (9) фигурируют матрицы плотности после передачи и регистрации квантовых состояний в согласованных базисах, но до усиления секретности и коррекции ошибок. В (9), (11) $U = \mathcal{F}(U_X)$, $\mathcal{C}$ — множество битовых строк (синдрома ошибок и др.), передаваемых через открытый канал между Алисой и Бобом при коррекции ошибок, $\log|\mathcal{C}|$ — количество информации в битах, содержащееся в этих строках,

$$\log|\mathcal{C}| = \mathrm{leak}. \quad (10)$$

Далее, $\rho_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)}$ — матрица плотности после сжатия битовой строки $f : x = \{0,1\}^n \to \ell = \{0,1\}^\ell$,

$$\rho_{U_X} = \frac{1}{2^n} \sum_{x\in\{0,1\}^n} |x\rangle_{X\,X}\langle x|,$$
$$\rho_U = \frac{1}{2^\ell} \sum_{x\in\{0,1\}^\ell} |x\rangle_{X\,X}\langle x|, \qquad (11)$$
$$\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(X)}\{\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)}\}.$$

Матрица плотности $\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)}$ описывает реальную ситуацию после усиления секретности — остаточные корреляции между новой битовой строкой Алисы и новой квантовой системой Евы.

Матрица плотности $\rho_{\mathcal{F}(U_X)} \otimes \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}$ описывает идеальную ситуацию, когда ключи равновероятно распределены и никак не коррелированы с квантовыми состояниями Евы $\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}$.

4. ПЕРЕХОД К min-ЭНТРОПИИ

По «техническим математическим» причинам удобно перейти от условной min-энтропии в (9) к сглаженной условной min-энтропии. Почему возникает min-энтропия?

Умозрительно можно было бы вычислить условную min-энтропию в (2)–(4), (9), если матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ в (2)–(4) была бы точно известна и ее можно было бы вычислить. Однако это невозможно. В лучшем случае можно получить оценку матрицы плотности. Определения (2)–(7) с математической точки зрения очень удобны при доказательстве различных неравенств. Однако при практических вычислениях ими невозможно напрямую воспользоваться.

Пусть матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ лежит в шаре $\rho^{(n)}_{XE} \in \mathcal{B}_\varepsilon(\rho^{(n)}_{XE})$, тогда

$$\begin{aligned}
&||\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)} - \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(U_X)} \otimes \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}||_1 \le \\
&\le ||\rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)} - \overline{\rho}^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)}||_1 + \\
&+ ||\overline{\rho}^{(\ell)}_{\mathcal{F}(X)\mathcal{F}(E)} - \overline{\rho}_U \otimes \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}||_1 + ||\overline{\rho}^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)} - \rho^{(\ell)}_{\mathcal{F}(E)}||_1 \le \\
&\le 2\varepsilon + 2^{-(1/2)(H_{min}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_E) - \log|\mathcal{C}| - \ell)} \le \\
&\le 2\varepsilon + 2^{-(1/2)(H^\varepsilon_{min}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_E) - \log|\mathcal{C}| - \ell)}. \qquad (12)
\end{aligned}$$

В (12) дважды использовано неравенство треугольника для следового расстояния, а также тот факт, что следовое расстояние не возрастает при взятии частичного следа. Последнее неравенство следует из определения (2) условной min-энтропии.

Напомним, что в правую часть (12) входит матрица плотности до стадии усиления секретности.

Если величина сжатия (длина секретного ключа ℓ) выбрана такой, что

$$2\varepsilon + 2^{-(1/2)(H^\varepsilon_{min}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_E) - \log|\mathcal{C}| - \ell)} \le \varepsilon', \qquad (13)$$

то ключ называется ε'-секретным в смысле следового расстояния (9), (12). После усиления секретности следовое расстояние оказывается меньше ε' — параметра секретности ключей, который выбирается легитимными пользователями и достигается соответствующим сжатием (выбором хеш-функций) очищенных ключей.

Таким образом, доказательство секретности сводится к вычислению условной сглаженной min-энтропии после передачи и измерения квантовых состояний до коррекции ошибок и усиления секретности.

Для конструктивного вычисления сглаженной min-энтропии требуется получить оценку для матрицы плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ — центра шара.

5. КВАНТОВАЯ КРИПТОГРАФИЯ КАК РАСПРЕДЕЛЕННЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ ЭКСПЕРИМЕНТ СО ЗЛОУМЫШЛЕННИКОМ

Квантовое распределение ключей представляет собой статистический эксперимент в следующем смысле. Легитимные пользователи Алиса и Боб связаны между собой через «черный ящик» — квантовый канал связи, в который вторгается Ева. Алиса контролирует информационные состояния на входе, Боб на приемной стороне видит результаты измерений при условии, что были посланы конкретные квантовые состояния. Это осуществляется на стадии оценки параметров путем раскрытия части передаваемой последовательности.

Целью этой стадии протокола является оценка частичной матрицы плотности $\rho^{(n)}_{XE} = \mathrm{Tr}_B\{\rho^{(n)}_{XBE}\}$ при условии, что Боб получает результаты измерений на частичной матрице плотности $\rho^{(n)}_{XB} = \mathrm{Tr}_E\{\rho^{(n)}_{XBE}\}$.

Если бы матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ была бы точно известна, то задача вычисления длины секретного ключа сводилась бы к вычислению $H_{min}(\rho^{(n)}_{XE}|\rho^{(n)}_E)$ в (2).

В реальной ситуации матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ точно не известна. Вопрос об оценке матрицы плот-

ности должен решаться в терминах теории вероятностей и математической статистики. Матрица плотности Алиса–Ева зависит от действий Евы — от параметров (ошибки на приемной стороне, доли однофотонной компоненты и пр.), которые управляются Евой и которые в явном виде недоступны легитимным пользователям. Легитимные пользователи имеют косвенную информацию об этих параметрах из результатов измерений. Точнее говоря, они имеют лишь оценку параметров (например, оценку вероятности ошибки), которая зависит от длины последовательности и истинной вероятности ошибки.

Обозначим набор параметров, от которых зависит матрица плотности, как $\{\mathcal{Q}\}$. Данные параметры известны Еве точно, поскольку ей и определяются. Для легитимных пользователей данные параметры «скрыты».

Ниже увидим, что имеются два типа скрытых параметров: 1) наблюдаемые скрытые параметры, которые могут быть определены из измерений на приемной стороне Боба, иначе говоря, вероятности фотоотсчетов на приемной стороне напрямую зависят от данных параметров; 2) ненаблюдаемые скрытые параметры, от которых не зависят вероятности результатов измерений на приемной стороне, но от них зависит утечка информации к подслушивателю.

Нет другого способа, кроме как рассматривать скрытый набор параметров для легитимных пользователей как случайные величины, которые имеют свое распределение вероятностей, определяемое Евой, но явно неизвестное легитимным пользователям. В этом смысле квантовое распределение ключей представляет собой статистический эксперимент, когда истинное совместное распределение параметров и величин легитимных пользователей неизвестно, но требуется получить оценку данного совместного распределения (оценку совместной матрицы плотности) по маргинальному распределению (частичной матрице плотности). Оценка частичной матрицы плотности в реальной ситуации должна быть получена по конечному, а не асимптотическому (бесконечному) набору наблюдаемых данных.

Сказанное означает, что недоступные параметры должны рассматриваться легитимными пользователями как случайные величины, которые подчиняются некоторому, также неизвестному для них, распределению вероятностей. Данные параметры должны быть включены в матрицу плотности, которая может быть записана в виде

$$\rho_{XEQ}^{(n)} = \\ = \sum_{x\in(\mathcal{X})} P_X(x)|x\rangle_{X\,X}\langle x| \otimes \sum_{Q\in\mathcal{Q}} P_Q(Q)|Q\rangle\langle Q| \otimes \rho_{E|Q}^{x(n)} = \\ = \sum_{x\in(\mathcal{X})} P_X(x)|x\rangle_{X\,X}\langle x| \otimes \rho_{EQ}^{x(n)}, \quad (14)$$

здесь $P_X(x)$ — вероятность распределения битовых строк у Алисы,

$$\sum_{x\in(\mathcal{X})} P_X(x) = 1. \quad (15)$$

В (14) введено обозначение

$$\rho_{EQ}^{x(n)} = \sum_{Q\in\mathcal{Q}} P_Q(Q)|Q\rangle\langle Q| \otimes \rho_{X\,E|Q}^{x(n)}, \\ \mathrm{Tr}_E\{\rho_{E|Q}^{x(n)}\} = 1. \quad (16)$$

Каждому набору параметров Q удобно сопоставить соответствующие ортогональные (различимые) квантовые состояния $|Q\rangle_Q$. Набор параметров Q имеет распределение вероятностей $P_Q(Q)$, которое известно Еве, более того, Еве известен в каждом акте распределения ключей сам набор параметров. Неформально ситуацию можно интерпретировать следующим образом. Ева «случайно генерирует» в соответствии с распределением $P_Q(Q)$ набор параметров атаки Q. После «генерации» параметры самой Еве точно известны, но не известны Алисе и Бобу. В результате атаки Ева имеет условную матрицу плотности $\rho_{E|Q}^{x(n)}$, зависящую от атаки, которая параметризуется набором сгенерированных параметров.

Матрица плотности параметров и функция распределения параметров имеют вид

$$\rho_Q(\mathcal{Q}) = P_Q(Q)|Q\rangle_{Q\,Q}\langle Q|, \quad \sum_{Q\in\mathcal{Q}} P_Q(Q) = 1. \quad (17)$$

Поскольку сами параметры и их распределение Алисе неизвестны, статистический ансамбль по всевозможным наборам параметров дается матрицей плотности Алиса–Ева:

$$\rho_{XE}^{(n)} = \sum_{Q\in\mathcal{Q}} P_Q(Q)\rho_{X\,E|Q}^{(n)}, \\ \rho_{X\,E|Q}^{(n)} = \sum_{x\in(\mathcal{X})} P_X(x)|x\rangle_{X\,X}\langle x| \otimes \rho_{E|Q}^{x(n)}. \quad (18)$$

Набор скрытых от легитимных пользователей параметров параметризует атаку Евы и определяет вероятности результатов измерений на приемной стороне Боба. Например, таким параметром в строго

однофотонном случае и при идеальных детекторах является один параметр Q — вероятность ошибочных отсчетов на приемной стороне.

По этой причине, если имеется оценка параметра Q по результатам измерений, то можно оценить матрицу плотности $\rho^{x(n)}_{XE|Q}$, которая приводит к таким результатам измерений. Более точно, попадание параметров в доверительный интервал с определенной вероятностью позволяет оценить следовое расстояние.

Разобьем все множество параметров на две области:

$$\rho^{(n)}_{XE} = \sum_{Q\in\delta_Q} P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q} + \sum_{Q\notin\delta_Q} P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q}, \quad (19)$$

где

$$\mathrm{Tr}_{XE}\{\rho^{(n)}_{XE|Q}\} = 1. \quad (20)$$

Введем символические обозначения

$$Q\in\delta_Q = Q\in\delta\mathcal{Q}, \quad Q\notin\delta_Q = Q\notin\delta\mathcal{Q}, \quad (21)$$

параметры попадают в доверительнный интервал или лежат вне его. Далее, используя (14)–(21), получаем

$$\rho^{(n)}_{XE} = \Pr\{Q\in\delta_Q\}\sum_{Q\in\delta_Q}\frac{P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q}}{\Pr\{Q\in\delta_Q\}} + \\ + \Pr\{Q\notin\delta_Q\}\sum_{Q\notin\delta_Q}\frac{P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q}}{\Pr\{Q\notin\delta_Q\}} = \\ = \Pr\{Q\in\delta_Q\}\rho^{(n)}_{XE|Q\in\delta_Q} + \\ + \Pr\{Q\notin\delta_Q\}\rho^{(n)}_{XE|Q\notin\delta_Q}, \quad (22)$$

где

$$\Pr\{Q\in\delta_Q\} = \sum_{Q\in\delta_Q} P_Q(Q), \\ \Pr\{Q\notin\delta_Q\} = \sum_{Q\notin\delta_Q} P_Q(Q). \quad (23)$$

При этом условные матрицы плотности в (22) нормированы:

$$\mathrm{Tr}_{XE}\{\rho^{(n)}_{XE|Q\in\delta_Q}\} = 1, \quad \mathrm{Tr}_{XE}\{\rho^{(n)}_{XE|Q\notin\delta_Q}\} = 1. \quad (24)$$

6. ДВОЙНОЕ УСЕЧЕНИЕ МАТРИЦ ПЛОТНОСТИ

Матрица плотности $\rho^{(n)}_{XE}$ является истинной и зависит от скрытых параметров. В дальнейшем придется иметь дело с усеченными матрицами плотности, которые близки к истинной матрице плотности в смысле следового расстояния. Усечение матриц плотности приходится делать дважды.

Введем события.

Первое событие Ω_1 — параметры матрицы плотности попадают в доверительный интервал (23). Второе событие Ω_2 — собственные числа матрицы плотности попадают в типичное множество последовательностей при условии, что ее параметры уже лежат в доверительном интервале (23). Совместная вероятность двух событий есть

$$\Pr\{\Omega_1\cap\Omega_2\} = \Pr\{\Omega_2|\Omega_1\}\Pr\{\Omega_1\}, \quad (25)$$

здесь $\Pr\{\Omega_2|\Omega_1\}$ — условная вероятность того, что матрица плотности попадает в типичное пространство при условии, что параметры матрицы плотности лежат в доверительном интервале.

6.1. Первое усечение матриц плотности

Пусть событие Ω_1 такое, что параметры попадают в доверительный интервал, пусть вероятность данного события

$$\Pr\{\Omega_1\} = \Pr\{Q\in\delta_Q\} > 1-\varepsilon_1. \quad (26)$$

Матрица плотности после первого усечения истинной матрицы плотности, с учетом (18), (19), имеет вид

$$\overline{\rho}^{(n)}_{XE} = \sum_{Q\in\delta_Q} P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q}. \quad (27)$$

Усеченная матрица плотности $\overline{\rho}^{(n)}_{XE}$ является ε_1-близкой в смысле следового расстояния к истинной матрице плотности $\rho^{(n)}_{XE}$. Действительно,

$$||\rho^{(n)}_{XE} - \overline{\rho}^{(n)}_{XE}||_1 = ||\sum_{Q\notin\delta_Q} P_Q(Q)\rho^{(n)}_{XE|Q}||_1 \le \\ \le \sum_{Q\notin\delta_Q} P_Q(Q)||\rho^{(n)}_{XE|Q}||_1 \le \sum_{Q\notin\delta_Q} P_Q(Q) \le \varepsilon_1. \quad (28)$$

В (28) использовано неравенство треугольника для следового расстояния.

Тот факт, что параметры усеченной матрицы плотности (событие Ω_1) лежат в доверительном интервале с вероятностью

$$\Pr\{\Omega_1\} = \Pr\{Q\in\delta_Q\} > 1-\varepsilon_1,$$

гарантирует, что наблюдаемые параметры на приемной стороне (например, ошибка Q) также лежат в доверительном интервале с той же вероятностью.

6.2. Второе усечение матриц плотности

Второе усечение матрицы плотности $\overline{\rho}_{XE}^{(n)}$ в (27), в отличие от первого усечения, связано, скорее, с техническими вычислительными причинами, чем с принципиальными причинами, диктуемыми статистикой.

Пусть параметры матрицы плотности уже лежат в доверительном интервале.

При вычислении min-энтропии необходимо выбирать значения параметров на нужной границе (правой или левой) доверительного интервала, которые в пользу подслушивателя приводят к минимальному значению условной min-энтропии. Минимальное значение условной min-энтропии для параметров на нужной границе доверительного интервала означает (в пользу подслушивателя) выбор минимальной нехватки информации подслушивателя о битовой строке Алисы.

Обозначим символически это значение как Q_{max}.

Обсудим теперь технические подробности вычисления min-энтропии на усеченной матрице плотности $\overline{\rho}_{XE}^{(n)}$.

Реально вычислить сглаженную энтропию можно, если матрица плотности имеет структуру тензорного произведения $\overline{\rho}_{XE|Q}^{(n)} = \overline{\rho}_{XE|Q}^{\otimes n}$. Второе усечение связано с тем, что даже, если матрица плотности имеет структуру тензорного произведения, то для конечной последовательности большой длины и при заданном значении параметров Q_{max} не удается точно вычислить условную сглаженную min-энтропию. Можно лишь получить оценку верхней границы для нее.

Матрица плотности после второго усечения $\hat{\rho}_{XE|Q_{max}}^{\otimes n}$ это матрица плотности, полученная из $\overline{\rho}_{XE|Q_{max}}^{\otimes n}$ оставлением только тех слагаемых, чьи собственные числа реализуются с вероятностью не менее $1-\varepsilon_2$ — попадают в множество ε_2-типичных последовательностей,

$$\Omega_2 = \left\{ \lambda \left(\left(I_X \otimes \left(\overline{\rho}_{E|Q_{max}}^{\otimes n} \right)^{-1/2} \right) \times \right.\right.$$
$$\left.\left. \times\ \overline{\rho}_{XE|Q_{max}}^{\otimes n} \left(I_X \otimes \left(\overline{\rho}_{E|Q_{max}}^{\otimes n} \right)^{-1/2} \right) \right) \in \mathrm{Typ}_{\varepsilon_2} \right\}, \quad (29)$$

при условии, что параметры уже лежат в доверительном интервале.

Вероятность попадания собственных чисел в множество ε_2-типичных последовательностей

$$\Pr\{\Omega_2|\Omega_1\} \geq 1-\varepsilon_2. \quad (30)$$

В итоге вероятность события, при котором параметры лежат в доверительном интервале и собственные числа попадают в множество ε_2-типичных последовательностей, равна

$$\Pr\{\Omega_1 \cap \Omega_2\} \geq (1-\varepsilon_1)(1-\varepsilon_2) \geq 1-\varepsilon_1-\varepsilon_2. \quad (31)$$

Матрица плотности $\hat{\rho}_{XE}^{\otimes n}$ после двойного усечения является $\varepsilon_1+\varepsilon_2$-близкой, в смысле следового расстояния, к истинной матрице плотности:

$$||\rho_{XE}^{\otimes n} - \hat{\rho}_{XE}^{\otimes n}||_1 = ||\rho_{XE}^{\otimes n} - \sum_{Q\in\delta} P_Q(Q)\rho_{XE|Q}^{\otimes n} +$$
$$+ \sum_{Q\in\delta} P_Q(Q)(\rho_{XE|Q}^{\otimes n} - \hat{\rho}_{XE|Q}^{\otimes n})||_1 \leq$$
$$\leq \varepsilon_1 + \sum_{Q\in\delta} P_Q(Q)||\rho_{XE|Q}^{\otimes n} - \hat{\rho}_{XE|Q}^{\otimes n}||_1 \leq$$
$$\leq \varepsilon_1 + (1-\varepsilon_1)\varepsilon_2 \leq \varepsilon_1+\varepsilon_2, \quad (32)$$

здесь $\hat{\rho}_{XE|Q}^{\otimes n}$ — усеченная матрица плотности ($Q \in \delta$), которая отличается от не усеченной $\overline{\rho}_{XE|Q}^{\otimes n}$ тем, что в ней присутствуют слагаемые с собственными числами, которые попадают в ε_2-типичное множество (см. следующий раздел).

6.3. Иллюстративный пример вычисления условной сглаженной min-энтропии

Для интуитивного подкрепления сказанного в предыдущем разделе приведем краткое эвристическое вычисление условной энтропии на усеченной матрице плотности. Более аккуратный вывод см. в [4]. Результат вычислений, естественно, будет одинаковым при нашем выводе и точном выводе [4]. При вычислении воспользуемся определением (6). Приведем матрицу плотности $\rho_{XE|Q_{max}}$ к диагональному виду, имеем

$$(\rho_{XE|Q_{max}})^{\otimes n} = \left(\sum_i \Lambda_i |\Lambda_i\rangle\langle\Lambda_i| \right)^{\otimes n} =$$
$$= \sum_{i_1}\sum_{i_2}\ldots\sum_{i_n} \Lambda_{i_1}\Lambda_{i_2}\ldots\Lambda_{i_n} |\Lambda_{i_1}\rangle\langle\Lambda_{i_1}| \otimes$$
$$\otimes |\Lambda_{i_2}\rangle\langle\Lambda_{i_2}| \otimes \ldots |\Lambda_{i_n}\rangle\langle\Lambda_{i_n}|, \quad (33)$$

здесь Λ_i — собственные числа, $|\Lambda_i\rangle$ — собственные векторы, отвечающие собственным числам, матрицы плотности $\rho_{XE|Q_{max}}$.

Усеченная матрица плотности содержит слагаемые, которые попадают в множество ε_2-типичных последовательностей. Это такие последовательности, вероятности которых удовлетворяют неравенствам

$$P(i_1, i_2, \ldots, i_n) = \Lambda_{i_1}\Lambda_{i_2}\ldots\Lambda_{i_n}, \quad (34)$$

$$2^{-n(H(\rho_{XE|Q_{max}})+\delta(\varepsilon_2))} \le P(i_1, i_2, \ldots, i_n) \le \le 2^{-n(H(\rho_{XE|Q_{max}})-\delta(\varepsilon_2))}. \quad (35)$$

Аналогично предыдущему приведем к диагональному виду матрицу плотности $\rho_{E|Q_{max}}$, находим

$$(\rho_{E|Q_{max}})^{\otimes n} = \left(\sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|\right)^{\otimes n} = = \sum_{i_1}\sum_{i_2}\ldots\sum_{i_n} \lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\ldots\lambda_{i_n} |\lambda_{i_1}\rangle \times \times \langle\lambda_{i_1}| \otimes |\lambda_{i_2}\rangle\langle\lambda_{i_2}| \otimes \ldots |\lambda_{i_n}\rangle\langle\lambda_{i_n}|, \quad (36)$$

где λ_i — собственные числа, $|\lambda_i\rangle$ — отвечающие им собственные векторы матрицы плотности $\rho_{E|Q_{max}}$. Усеченная матрица плотности содержит слагаемые, вероятности которых попадают в множество ε_2-типичных последовательностей. Это такие слагаемые, вероятности которых удовлетворяют условиям

$$p(i_1, i_2, \ldots, i_n) = \lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\ldots\lambda_{i_n}, \quad (37)$$

$$2^{-n(H(\rho_{E|Q_{max}})+\delta(\varepsilon_2))} \le p(i_1, i_2, \ldots, i_n) \le \le 2^{-n(H(\rho_{E|Q_{max}})-\delta(\varepsilon_2))}. \quad (38)$$

Оценка вероятности $\Pr\{\Omega_2|\Omega_1\}$ того, что собственные числа лежат в интервале при условии, что параметры атаки Евы $\mathcal{Q}$ лежат в доверительном интервале, есть

$$2^{-n(H(\rho_{XE|Q_{max}}|\rho_{E|Q_{max}})+\delta(\varepsilon_2))} \le \le \lambda\left(\left(I_X \otimes \left(\rho_{E|Q_{max}}^{\otimes n}\right)^{-1/2}\right) \times \times \rho_{XE|Q_{max}}^{\otimes n}\left(I_X \otimes \left(\rho_{E|Q_{max}}^{\otimes n}\right)^{-1/2}\right)\right) = = \frac{P(i_1, i_2, \ldots, i_n)}{p(i_1, i_2, \ldots, i_n)} \le \le 2^{-n(H(\rho_{XE|Q_{max}}|\rho_{E|Q_{max}})-\delta(\varepsilon_2))}, \quad (39)$$

где собственные числа лежат в множестве $\mathrm{Typ}_{\varepsilon_2}$ (29).

Вычисление min-энтропии через максимальное собственное число матрицы плотности после второго усечения, с учетом (6) и (29), дает

$$H_{min}^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}(\rho_{XE|Q\in\delta_Q}^{(n)}|\rho_{E|Q\in\delta_Q}^{(n)}) \ge \ge H_{min}^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}(\rho_{XE|Q_{max}}^{(n)}|\rho_{E|Q_{max}}^{(n)}). \quad (40)$$

Смысл данного неравенства интуитивно понятен. Неформально, условная энтропия есть нехватка информации Евы о битовой строке Алисы при условии, что ошибка на приемной стороне из-за вторжения в квантовый канал есть Q_{max}. Соответственно, чем меньше ошибка, тем больше нехватка информации Евы.

С учетом (6), (29) получаем

$$H_{min}^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}(\rho_{XE|Q_{max}}^{(n)}|\rho_{E|Q_{max}}^{(n)}) = = -\log\left(\lambda\left(\left(I_X \otimes \left(\rho_{E|Q_{max}}^{\otimes n}\right)^{-1/2}\right) \times \times \rho_{XE|Q_{max}}^{\otimes n}\left(I_X \otimes \left(\rho_{E|Q_{max}}^{\otimes n}\right)^{-1/2}\right)\right)\right) = = n(H(\rho_{XE|Q_{max}}|\rho_{E|Q_{max}}) - \delta(\varepsilon_2)), \quad (41)$$

здесь $H(\rho) = -\mathrm{Tr}\{\rho\log(\rho)\}$ — энтропия фон Неймана. Таким образом, вычисление условной сглаженной min-энтропии при неизвестных скрытых параметрах сводится к вычислению условной (не сглаженной) энтропии для параметров — вероятности ошибки Q, лежащей на правой границе доверительного интервала $Q = Q_{max}$.

7. ПОСТРОЕНИЕ ЯВНОЙ АТАКИ НА ОДНОФОТОННУЮ КОМПОНЕНТУ СОСТОЯНИЙ

Для вычисления условной min-энтропии в (9), а также учета побочных каналов утечки информации, разных квантовых эффективностей детекторов, как было отмечено выше, требуется явное построение атаки на однофотонную компоненту состояний.

При побочных каналах утечки фундаментальная связь между ошибкой и утечкой к Еве расцепляется. По этой причине, чтобы «подцепить» побочные квантовые состояния к информационным состояниям, требуется явное знание состояний и, соответственно, явное построение атаки.

В следующих разделах будет построена явная атака на однофотонные состояния, затем будут приведены оценки для длины секретного ключа.

Атака Евы на однофотонные информационные состояния в квантовом канале связи определяется унитарным оператором, который определяется и параметризуется набором параметров, контролируемых Евой. Атака Евы приводит к преобразованию входных квантовых состояний в новые квантовые состояния. Самое общее преобразование квантовых состояний (матриц плотности) в матрицы плотности

задается линейным вполне положительным отображением — супероператором [13]. Любой супероператор согласно [14] унитарно представим. Неформально, супероператор может быть реализован как совместная унитарная эволюция исходного состояния вместе со вспомогательным состоянием. В результате возникает совместное запутанное состояние. Взятие частичного следа по вспомогательной системе дает преобразованную матрицу плотности исходного состояния.

Построение супероператора сводится к построению унитарного оператора, который параметризуется набором параметров, которые находятся в руках подслушивателя.

Естественно, подслушиватель должен выбирать унитарный оператор оптимальным образом. Оптимальность понимается в смысле максимизации информации подслушивателя о передаваемых битах ключа при заданной наблюдаемой ошибке на приемной стороне.

При идеальных детекторах и без учета побочных каналов утечки информации можно явно не строить атаку, а воспользоваться энтропийными соотношениями неопределенностей. Оптимальная унитарная атака, достигающая нижнюю границу энтропийных соотношений неопределенностей [5], может быть построена явно [15].

Для дальнейшего потребуется построение явной атаки с учетом разных и неидеальных квантовых эффективностей детекторов. Для определенности будем иметь в виду протокол BB84, который является базовым. Предлагаемый метод применим и к другим протоколам.

Унитарная атака на информационные состояния в базисе + имеет вид

$$|0^+\rangle_X \otimes |0^+\rangle_Y \to |0^+\rangle_X \otimes U_{BE}(|0^+\rangle_Y \otimes |E\rangle_Q) = \\ = |0^+\rangle_X \otimes [\sqrt{1-Q^+}|0^+\rangle_Y \otimes |\Phi_{0^+}\rangle_Q + \\ + \sqrt{Q^+}|1^+\rangle_Y \otimes |\Theta_{0^+}\rangle_Q], \quad (42)$$

$$|1^+\rangle_X \otimes |1^+\rangle_Y \to |1^+\rangle_X \otimes U_{BE}(|1^+\rangle_Y \otimes |E\rangle_Q) = \\ = |1^+\rangle_X \otimes [\sqrt{1-Q^+}|1^+\rangle_Y \otimes |\Phi_{1^+}\rangle_Q + \\ + \sqrt{Q^+}|0^+\rangle_Y \otimes |\Theta_{1^+}\rangle_Q], \quad (43)$$

где $|0^+\rangle_X$ — эталонное состояние на стороне Алисы, доступное только ей, $|0^+\rangle_Y$ — состояние, которое посылается к Бобу через квантовый канал связи, U_{BE} — унитарный оператор Евы, $|E\rangle_Q$ — исходное вспомогательное состояние Евы — ancilla, $|\Phi_{0^+}\rangle_Q$ и $|\Theta_{0^+}\rangle_Q$ — искаженные состояния, возникающие из вспомогательного состояния Евы.

Формулы (42), (43) представляют собой разложение Шмидта, параметр Q^+ пока является свободным. Ниже увидим, что Q^+ является наблюдаемой ошибкой на приемной стороне, к которой приводит атака на квантовые состояния в канале связи.

Индекс «Q» для состояний Евы символизирует атаку на квантовые информационные состояния. Аналогичные (42), (43) выражения имеют место, когда в канал посылаются состояния в базисе $\times$, $|0^\times\rangle_Y$, $|1^\times\rangle_Y$. Имеем

$$|0^\times\rangle_X \otimes |0^\times\rangle_Y \to |0^\times\rangle_X \otimes U_{BE}(|0^\times\rangle_Y \otimes |E\rangle_Q) = \\ = |0^\times\rangle_X \otimes [\sqrt{1-Q^\times}|0^+\rangle_Y \otimes |\Phi_{0^\times}\rangle_Q + \\ + \sqrt{Q^\times}|1^+\rangle_Y \otimes |\Theta_{0^\times}\rangle_Q], \quad (44)$$

$$|1^\times\rangle_X \otimes |1^\times\rangle_Y \to |1^\times\rangle_X \otimes U_{BE}(|1^\times\rangle_Y \otimes |E\rangle_Q) = \\ = |1^\times\rangle_X \otimes [\sqrt{1-Q^\times}|1^\times\rangle_Y \otimes |\Phi_{1^\times}\rangle_Q + \\ + \sqrt{Q^\times}|0^\times\rangle_Y \otimes |\Theta_{1^\times}\rangle_Q]. \quad (45)$$

Связь между информационными состояниями в разных базисах дается соотношениями

$$|0^\times\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0^+\rangle + |1^+\rangle\right), \\ |1^\times\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0^+\rangle - |1^+\rangle\right). \quad (46)$$

Связь между состояниями Евы в разных базисах следует из линейности унитарного оператора. С учетом (42)–(46) получаем

$$|\Phi_\pm\rangle_E = |\Phi_{0^+}\rangle_E \pm |\Phi_{1^+}\rangle_E, \\ |\Theta_\pm\rangle_E = |\Theta_{0^+}\rangle_E \pm |\Theta_{1^+}\rangle_E, \quad (47)$$

где

$$_E\langle\Phi_{0^\times}|\Phi_{0^\times}\rangle_E + {}_E\langle\Theta_{0^\times}|\Theta_{0^\times}\rangle_E = 1, \\ _E\langle\Phi_{1^\times}|\Phi_{1^\times}\rangle_E + {}_E\langle\Theta_{1^\times}|\Theta_{1^\times}\rangle_E = 1,$$

$$|\Phi_{0^\times}\rangle_E = \frac{|\Phi_+\rangle_E + |\Theta_+\rangle_E}{2}, \\ |\Theta_{0^\times}\rangle_E = \frac{|\Phi_-\rangle_E - |\Theta_-\rangle_E}{2}, \quad (48)$$

$$|\Phi_{1^\times}\rangle_E = \frac{|\Phi_+\rangle_E - |\Theta_+\rangle_E}{2}, \\ |\Theta_{1^\times}\rangle_E = \frac{|\Phi_-\rangle_E + |\Theta_-\rangle_E}{2}. \quad (49)$$

Таким образом, атака Евы параметризуется величинами Q^+, $Q^\times$, имеющими смысл вероятностей ошибок в базисах $+$ и $\times$.

Отметим, что, как было показано в [16], векторы $\{|\Phi_{0^+}\rangle_Q, |\Phi_{1^+}\rangle_Q\}$ и $\{|\Theta_{0^+}\rangle_Q, |\Theta_{1^+}\rangle_Q\}$ лежат в ортогональных подпространствах. Аналогично для состояний $\{|\Phi_{0^\times}\rangle_Q, |\Phi_{1^\times}\rangle_Q\}$ и $\{|\Theta_{0^\times}\rangle_Q, |\Theta_{1^\times}\rangle_Q\}$. Этот факт будет использован в дальнейшем.

Ниже будет видно, что не все параметры, которыми параметризуется унитарная атака, являются наблюдаемыми при измерениях на приемной стороне. Существуют параметры, от которых зависит утечка информации к Еве, но которые явно не проявляются в измерениях Боба. Такими параметрами являются скалярные произведения между различными состояниями Евы.

7.1. Идеальные и реальные измерения

Для дальнейшего нам потребуются описания измерений для случаев идеальных и реальных детекторов. С формальной точки зрения любое измерение задается разложением единицы.

Идеальные измерения Боба в базисах $+$ и $\times$ даются разложением единицы I_Y (I_Y — единичный оператор в пространстве состояний Боба):

$$I_Y = |0^+\rangle_{YY}\langle 0^+| + |1^+\rangle_{YY}\langle 1^+| = \\ = |0^\times\rangle_{YY}\langle 0^\times| + |1^\times\rangle_{YY}\langle 1^\times|. \quad (50)$$

Ситуацию с не равной единице квантовой эффективностью детекторов можно описывать следующим образом. Пусть квантовые эффективности детекторов равны η_0 и η_1. Отсутствие отсчета в обоих детекторах можно считать отсчетом в фиктивном состоянии $\perp$. В этом случае измерения в базисах $+$ и $\times$ даются разложением единицы:

$$I_Y = \\ = \eta_0|0^+\rangle_{YY}\langle 0^+| + \eta_1|1^+\rangle_{YY}\langle 1^+| + \eta_\perp^+|\perp^+\rangle_{\perp\perp}\langle\perp^+| = \\ = \eta_1|0^\times\rangle_{YY}\langle 0^\times| + \eta_0|1^\times\rangle_{YY}\langle 1^\times| + \\ + \eta_\perp^\times|\perp^\times\rangle_{\perp\perp}\langle\perp^\times|. \quad (51)$$

Исходы измерений, при которых отсутствуют отсчеты в детекторах, отбрасываются.

Необходимо отметить важный факт (см. расстановку квантовых эффективностей в формуле (51)). Поскольку квантовые эффективности детекторов различаются, число регистрируемых 0 и 1 внутри каждого базиса не равно друг другу. Для выравнивания суммарного количества регистрируемых 0 и 1 в двух базисах, на приемной стороне при фазовом кодировании разность фаз в плечах интерферометра в разных базисах выбирается таким образом, чтобы 0 в одном базисе регистрировался в детекторе $D0$, а единица — в детекторе $D1$. В сопряженном базисе, наоборот, 0 регистрируется в детекторе $D1$, а 1 — в детекторе $D0$.

7.2. Матрицы плотности после идеальных измерений

Измерения (50) фактически сводятся к проектированию на набор ортогональных состояний. С учетом (42)–(46), после идеальных измерений Боба матрица плотности Алиса–Боб–Ева принимает вид

$$\rho_{XYE}^+ = \frac{1}{2}|0^+\rangle_{XX}\langle 0^+| \otimes [(1-Q^+)|0^+\rangle_{YY}\langle 0^+| \otimes |\Phi_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Phi_{0^+}| + Q^+|1^+\rangle_Y \times \\ \times {}_Y\langle 1^+| \otimes |\Theta_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{0^+}|] + \frac{1}{2}|1^+\rangle_{XX}\langle 1^+| \otimes [(1-Q^+)|1^+\rangle_{YY}\langle 1^+| \otimes |\Phi_{1^+}\rangle_Q \times \\ \times {}_Q\langle\Phi_{1^+}| + Q^+|0^+\rangle_{YY}\langle 0^+| \otimes |\Theta_{1^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{1^+}|]. \quad (52)$$

Частичная матрица плотности Алиса–Ева

$$\rho_{XE}^+ = \frac{1}{2}|0^+\rangle_{XX}\langle 0^+| \otimes [(1-Q^+)|\Phi_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Phi_{0^+}| + Q^+|\Theta_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{0^+}|] + \frac{1}{2}|1^+\rangle_{XX}\langle 1^+| \otimes \\ \otimes[(1-Q^+)|\Phi_{1^+}\rangle_{QQ}\langle\Phi_{1^+}| + Q^+|\Theta_{1^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{1^+}|]. \quad (53)$$

Частичная матрица плотности Евы

$$\rho_E^+ = \frac{1}{2}(1-Q^+)[|\Phi_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Phi_{0^+}| + |\Phi_{1^+}\rangle_{QQ}\langle\Phi_{1^+}|] + Q^+\frac{1}{2}[|\Theta_{0^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{0^+}| + |\Theta_{1^+}\rangle_{QQ}\langle\Theta_{1^+}|]. \quad (54)$$

В базисе $\times$ с учетом (42)–(46) и (50) находим

$$\rho^{\times}_{XYE} = \frac{1}{2}|0^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 0^{\times}| \otimes [(1-Q^{\times})|0^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{\times}| \otimes |\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + Q^{\times}|1^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 1^{\times}| \otimes |\Theta_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0\times}|] +$$
$$+\frac{1}{2}|1^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 1^{\times}| \otimes [(1-Q^{\times})|1^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 1^{\times}| \otimes |\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}| + Q^{\times}|0^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{\times}| \otimes |\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (55)$$

Частичная матрица плотности Алиса–Ева

$$\rho^{\times}_{XE} = \frac{1}{2}|0^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 0^{\times}| \otimes [(1-Q^{\times})|\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + Q^{\times}|\Theta_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0\times}|] + \frac{1}{2}|1^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 1^{\times}| \otimes$$
$$\otimes [(1-Q^{\times})|\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}| + Q^{\times}|\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (56)$$

Частичная матрица плотности Евы

$$\rho^{\times}_{E} = \frac{1}{2}(1-Q^{\times})[|\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + |\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}|] + Q^{\times}\frac{1}{2}[|\Theta_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0\times}| + |\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (57)$$

7.3. Матрицы плотности после реальных измерений

После реальных измерений и отбрасывания холостных исходов матрица плотности Алиса–Боб–Ева в базисе $+$, нормированная на полную вероятность отсчетов $\eta_0 + \eta_1$ в детекторах, принимает вид

$$\rho^{+}_{XYE} = |0^{+}\rangle_{X\,X}\langle 0^{+}| \otimes [\xi_0(1-Q^{+})|0^{+}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{+}| \otimes |\Phi_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0+}| + \xi_1 Q^{+}|1^{+}\rangle_{Y} \times$$
$$\times {}_{Y}\langle 1^{+}| \otimes |\Theta_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0+}|] + |1^{+}\rangle_{X\,X}\langle 1^{+}| \otimes [\xi_1(1-Q^{+})|1^{+}\rangle_{Y\,Y}\langle 1^{+}| \otimes |\Phi_{1+}\rangle_{Q} \times$$
$$\times {}_{Q}\langle \Phi_{1+}| + \xi_0 Q^{+}|0^{+}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{+}| \otimes |\Theta_{1+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1+}|]. \quad (58)$$

Частичная матрица плотности Алиса–Ева

$$\rho^{+}_{XE} = |0^{+}\rangle_{X\,X}\langle 0^{+}| \otimes [\xi_0(1-Q^{+})|\Phi_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0+}| + \xi_1 Q^{+}|\Theta_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0+}|] + |1^{+}\rangle_{X\,X}\langle 1^{+}| \otimes$$
$$\otimes [\xi_1(1-Q^{+})|\Phi_{1+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1+}| + \xi_0 Q^{+}|\Theta_{1+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1+}|]. \quad (59)$$

Частичная матрица плотности Евы

$$\rho^{+}_{E} = (1-Q^{+})[\xi_0|\Phi_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0+}| + \xi_1|\Phi_{1+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1+}|] + Q^{+}[\xi_1|\Theta_{0+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0+}| + \xi_0|\Theta_{1+}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1+}|]. \quad (60)$$

В базисе $\times$ получаем

$$\rho^{\times}_{XYE} = |0^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 0^{\times}| \otimes [\xi_1(1-Q^{\times})|0^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{\times}| \otimes |\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + \xi_0 Q^{\times}|1^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 1^{\times}| \otimes |\Theta_{0\times}\rangle_{Q} \times$$
$$\times {}_{Q}\langle \Theta_{0\times}|] + |1^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 1^{\times}| \otimes [\xi_0(1-Q^{\times})|1^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 1^{\times}| \otimes |\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}| + \xi_1 Q^{\times}|0^{\times}\rangle_{Y\,Y}\langle 0^{\times}| \otimes |\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (61)$$

Частичная матрица плотности Алиса–Ева

$$\rho^{\times}_{XE} = |0^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 0^{\times}| \otimes [\xi_1(1-Q^{\times})|\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + \xi_0 Q^{\times}|\Theta_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0\times}|] + |1^{\times}\rangle_{X\,X}\langle 1^{\times}| \otimes [\xi_0(1-Q^{\times}) \times$$
$$\times |\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}| + \xi_1 Q^{\times}|\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (62)$$

Частичная матрица плотности Евы

$$\rho^{\times}_{E} = (1-Q^{\times})[\xi_1|\Phi_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{0\times}| + \xi_0|\Phi_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Phi_{1\times}|] + Q^{\times}\frac{1}{2}[\xi_0|\Theta_{0\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{0\times}| + \xi_1|\Theta_{1\times}\rangle_{Q\,Q}\langle \Theta_{1\times}|]. \quad (63)$$

В (58)–(63) для удобства введены обозначения

$$\xi_0 = \frac{\eta_0}{\eta_0+\eta_1}, \quad \xi_1 = \frac{\eta_1}{\eta_0+\eta_1}. \quad (64)$$

7.4. Скрытые ненаблюдаемые параметры — скалярные произведения между состояниями подслушивателя

Измерения на приемной стороне не являются информационно полными, поскольку не позволяют однозначно восстановить искаженное информационное квантовое состояние на входе в приемную станцию. Этот факт приводит к тому, что утечка информации, которая выражается через условную энтропию, зависит от ненаблюдаемых скрытых для легитимных пользователей параметров атаки Евы. Точнее говоря, при одних и тех же вероятностях исходов измерений на приемной стороне значения ненаблюдаемых скрытых параметров будут разными. Исходы измерений не чувствительны к данным параметрам, но в то же время условная энтропия — утечка информации к Еве — зависит от данных параметров.

Такими ненаблюдаемыми скрытыми для Алисы и Боба параметрами являются скалярные произведения между состояниями подслушивателя, $\langle\Phi_{0^+}|\Phi_{1^+}\rangle$ и $\langle\Theta_{0^+}|\Theta_{1^+}\rangle$.

Фундаментальное требование унитарности оператора в (42)–(49) приводит к тому, что скалярные произведения между квантовыми состояниями подслушивателя в разных базисах связаны определенными соотношениями.

С учетом выражений (42)–(49), следующих из унитарности оператора Евы, получаем соотношения между скалярными произведениями в разных базисах:

$$\begin{gathered}(1-Q^+)\varepsilon(\Phi^+) = |\langle\Phi_{0^+}|\Phi_{1^+}\rangle|,\\ Q^+\varepsilon(\Theta^+) = |\langle\Theta_{0^+}|\Theta_{1^+}\rangle|,\end{gathered} \tag{65}$$

$$\begin{gathered}(1-Q^\times)\varepsilon(\Phi^\times) = |\langle\Phi_{0^\times}|\Phi_{1^\times}\rangle|,\\ Q^\times\varepsilon(\Theta^\times) = |\langle\Theta_{0^\times}|\Theta_{1^\times}\rangle|,\end{gathered} \tag{66}$$

$$(1-Q^+)\varepsilon(\Phi^+) = \frac{1}{2}[1-2Q^+ + \\ + (1-Q^+)\operatorname{Re}(\varepsilon(\Phi^+)) - Q^+\operatorname{Re}(\varepsilon(\Theta^+))], \tag{67}$$

$$Q^\times\varepsilon(\Theta^\times) = \frac{1}{2}[1-2Q^+ - \\ - (1-Q^+)\operatorname{Re}(\varepsilon(\Phi^+)) + Q^+\operatorname{Re}(\varepsilon(\Theta^+))]. \tag{68}$$

Параметры Q^+ и $Q^\times$ являются экспериментально наблюдаемыми параметрами и имеют смысл вероятностей ошибок в прямом $+$ и сопряженном $\times$ базисах. Результаты измерений на стороне Боба не зависят от скалярных произведений (65)–(68), но от них зависит утечка информации к Еве.

По этой причине при определенных из измерений параметрах Q^+ и $Q^\times$, по ненаблюдаемым скрытым параметрам необходимо проводить максимизацию утечки информации к Еве при данных наблюдаемых Q^+ и $Q^\times$.

7.5. Область допустимых значений ненаблюдаемых скрытых параметров

Покажем, что независимым является только один параметр $\varepsilon_+(\Phi)$, остальные выражаются через него. Кроме того, поскольку состояния $|\Phi_{0^{+,\times},0^{+,\times}}\rangle$ и $|\Theta_{0^{+,\times},0^{+,\times}}\rangle$ ортогональны, в утечку информации, которая выражается через собственные числа матрицы плотности Евы (см. ниже), входят только модули скалярных произведений. Это означает, что утечка информации к Еве не зависит от фаз, вообще говоря, комплексных скалярных произведений. Из-за такой нечувствительности к фазе можно считать скалярные произведения вещественными.

Из наблюдаемых величин (вероятностей исходов измерений) можно определить не все скалярные произведения, от которых зависит утечка информации к подслушивателю. Из четырех скалярных произведений $\varepsilon_+(\Phi)$, $\varepsilon_+(\Theta)$, $\varepsilon_\times(\Phi)$ и $\varepsilon_\times(\Theta)$ остается неопределенным $\varepsilon_+(\Phi)$. Остальные три могут быть выражены через него.

С учетом уравнений (65)–(68) получаем следующие соотношения:

$$\varepsilon_+(\Theta) = \frac{1-2Q^\times-(1-Q^+)\varepsilon_+(\Phi)}{Q^+}, \tag{69}$$

$$\varepsilon_\times(\Phi) = \frac{1}{2(1-Q^\times)}\times \\ \times\left((1-2Q^+)-(1-2Q^\times)+2(1-Q^+)\varepsilon_+(\Phi)\right), \tag{70}$$

$$\varepsilon_\times(\Theta) = \frac{1}{2Q^\times}\times \\ \times\left((1-2Q^+)+(1-2Q^\times)-2(1-Q^+)\varepsilon_+(\Phi)\right). \tag{71}$$

Скалярные произведения между квантовыми состояниями по модулю не должны превышать единицы, с учетом (65)–(71) это приводит к следующим неравенствам:

$$L_1(Q^+,Q^\times) = \frac{1-2Q^\times-Q^+}{1-Q^+} \le \varepsilon_+(\Phi) \le \\ \le \frac{1-2Q^\times+Q^+}{1-Q^+} = R_1(Q^+,Q^\times), \tag{72}$$

$$L_2(Q^+,Q^\times) = \frac{1}{2(1-Q^+)} \times \times \left(-2(1-Q^\times) - [(1-2Q^+) - (1-2Q^\times)]\right) \le \le \varepsilon_+(\Phi) \le \frac{1}{2(1-Q^+)} \left(2(1-Q^\times) - - [(1-2Q^+) - (1-2Q^+)]\right) = R_2(Q^+,Q^\times), \quad (73)$$

$$L_3(Q^+,Q^\times) = \frac{1}{2(1-Q^+)} \times \times \left((1-2Q^+) + (1-2Q^\times) - 2Q^\times\right) \le \varepsilon_+(\Phi) \le \le \frac{1}{2(1-Q^+)} \left((1-2Q^+) + (1-2Q^\times) + 2Q^\times\right) = = R_3(Q^+,Q^\times). \quad (74)$$

Таким образом, максимизацию утечки информации к подслушивателю достаточно проводить по одному параметру $\varepsilon_+(\Phi)$, который с учетом (72)–(74) меняется на отрезке

$$R(Q^+,Q^\times) = \min\left\{R_1(Q^+,Q^\times), R_2(Q^+,Q^\times), R_3(Q^+,Q^\times)\right\}, \quad (75)$$

$$L(Q^+,Q^\times) = \max\left\{L_1(Q^+,Q^\times), L_2(Q^+,Q^\times), L_3(Q^+,Q^\times)\right\}, \quad (76)$$

$$V(Q^+,Q^\times) = R(Q^+,Q^\times) - L(Q^+,Q^\times). \quad (77)$$

Удобно параметризовать $\varepsilon_+(\Phi)$ следующим образом:

$$\varepsilon_+(\Phi) = L(Q^+,Q^\times) + xV(Q^+,Q^\times), \quad x \in [0,1]. \quad (78)$$

Остальные параметры выражаются по формулам (62)–(71).

В итоге максимизацию утечки информации к Еве при данных наблюдаемых параметрах Q^+ и $Q^\times$ можно проводить только по одной переменной x.

7.6. Собственные числа матрицы плотности подслушивателя

Для вычисления условных энтропий нужны собственные числа матриц плотности. Для собственных чисел матрицы плотности ρ^+_{XE} в базисе + находим

$$\xi_0(1-Q^+), \quad \xi_1 Q^+, \quad \xi_1(1-Q^+), \quad \xi_0 Q^+. \quad (79)$$

Аналогично для матрицы плотности $\rho^\times_{XE}$:

$$\xi_1(1-Q^\times), \quad \xi_0 Q^\times, \quad \xi_0(1-Q^\times), \quad \xi_1 Q^\times. \quad (80)$$

Собственные числа матрицы плотности ρ^+_E в базисе + равны

$$\Lambda_\pm(\Phi^+) = (1-Q^+)\lambda_\pm(\Phi^+), \quad \Lambda_\pm(\Theta^+) = Q^+\lambda_\pm(\Theta^+), \quad (81)$$

где

$$\lambda_\pm(\Phi^+) = = \frac{1}{2}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(A(\Phi^+)B(\Phi^+) - |\varepsilon(\Phi^+)|^2)}{1-|\varepsilon(\Phi^+)|^2}}\right\}, \quad (82)$$

$$A(\Phi^+) = \xi_0 + \xi_1|\varepsilon(\Phi^+)|^2, \quad B(\Phi^+) = \xi_0|\varepsilon(\Phi^+)|^2 + \xi_1, \quad (83)$$

$$\lambda_\pm(\Theta^+) = = \frac{1}{2}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(A(\Theta^+)B(\Theta^+) - |\varepsilon(\Theta^+)|^2)}{1-|\varepsilon(\Theta^+)|^2}}\right\}, \quad (84)$$

$$A(\Theta^+) = \xi_0 + \xi_1|\varepsilon(\Theta^+)|^2, \quad B(\Theta^+) = \xi_0|\varepsilon(\Theta^+)|^2 + \xi_1, \quad (85)$$

Аналогично (79)–(85) для собственных чисел матрицы плотности $\rho^\times_E$ в базисе $\times$ получаем

$$\Lambda_\pm(\Phi^\times) = (1-Q^\times)\lambda_\pm(\Phi^\times), \quad \Lambda_\pm(\Theta^\times) = Q^\times\lambda_\pm(\Theta^\times), \quad (86)$$

где

$$\lambda_\pm(\Phi^\times) = = \frac{1}{2}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(A(\Phi^\times)B(\Phi^\times) - |\varepsilon(\Phi^\times)|^2)}{1-|\varepsilon(\Phi^\times)|^2}}\right\}, \quad (87)$$

$$A(\Phi^\times) = \xi_1 + \xi_0|\varepsilon(\Phi^\times)|^2, \quad B(\Phi^\times) = \xi_1|\varepsilon(\Phi^\times)|^2 + \xi_0, \quad (88)$$

$$\lambda_\pm(\Theta^\times) = = \frac{1}{2}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(A(\Theta^\times)B(\Theta^\times) - |\varepsilon(\Theta^\times)|^2)}{1-|\varepsilon(\Theta^\times)|^2}}\right\}, \quad (89)$$

$$A(\Theta^\times) = \xi_0 + \xi_1|\varepsilon(\Theta^\times)|^2, \quad B(\Theta^\times) = \xi_0|\varepsilon(\Theta^\times)|^2 + \xi_1. \quad (90)$$

8. ОЦЕНКА ДЛИНЫ СЕКРЕТНОГО КЛЮЧА: ОДНОФОТОННЫЙ СЛУЧАЙ, ИДЕАЛЬНЫЕ ДЕТЕКТОРЫ, АСИМПТОТИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ

Для того чтобы показать, как изменяется оценка длины секретного ключа по мере включения в рассмотрение различных реальных каналов утечки информации, сначала приведем такие оценки для строго однофотонного источника, когда параметры атаки Евы известны точно. Затем учтем тот факт, что имеется только оценка параметров атаки — ошибки на приемной стороне при конечной длине переданных последовательностей.

Сначала рассмотрим асимптотический случай длинных последовательностей. При стремлении длины передаваемой последовательности к бесконечности оценка вероятности ошибки становится самой вероятностью, т. е. параметр ошибки известен точно.

В случае идеальных детекторов нижняя граница энтропийных соотношений неопределенностей достигается на симметричной атаке [15], $Q^+ = Q^\times = Q$. Ненаблюдаемые скрытые параметры — скалярные произведения в этом случае равны

$$\varepsilon(\Phi^{+,\times}) = \varepsilon(\Theta^{+,\times}) = 1 - 2Q.$$

Оценки параметров и первого усечения матриц плотности, связанного с оценкой наблюдаемых параметров, не требуется. Достаточно только второго усечения при вычислении условной сглаженной энтропии матрицы плотности в виде тензорного произведения $\rho_{XE}^{(n)} = \rho_{XE}^{\otimes n}$. Сглаженная условная min-энтропия, вычисленная на усеченной матрице плотности $\overline{\rho}_{XE}^{\otimes n}$, удовлетворяющей условию ε-близости в смысле следового расстояния, имеет вид

$$\begin{aligned} H_{min}^{\varepsilon}(\overline{\rho}_{XE}^{\otimes n}|\overline{\rho}_{E}^{\otimes n}) &= \\ &= \max_{||\rho_{XE}^{\otimes n}-\overline{\rho}_{XE}^{\otimes n}||_1 \le \varepsilon} H_{min}(\rho_{XE}^{\otimes n}|\rho_{E}^{\otimes n}) = \\ &= H(\rho_{XE}^{\otimes n}) - H(\rho_{E}^{\otimes n}) - \delta(\varepsilon) = \\ &= n\left(1-h(Q)-(2H_{max}(\rho_X)+1)\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right), \quad (91) \end{aligned}$$

где Q — истинная вероятность ошибки, матрица плотности в (91) берется из соотношений (52)–(57),

$$\text{const} = 2H_{max}(\rho_X) + 1,$$

$$H_{max}(\rho_X) = \text{rank}(\rho_X) = 2$$

[4], n — длина зарегистрированной последовательности.

Утечка информации при коррекции ошибок в асимптотическом шенноновском пределе с учетом (52)–(71) имеет вид

$$\begin{aligned} H_{max}^{\varepsilon}(\rho_{XY}^{\otimes n}|\rho_{Y}^{\otimes n}) &= H(\rho_{XY}^{\otimes n}) - H(\rho_{Y}^{\otimes n}) + \delta(\varepsilon) = \\ &= n\left(h(Q) + \text{const}\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right). \quad (92) \end{aligned}$$

Оценка длины ε-секретного ключа принимает вид

$$\begin{aligned} \ell^{\varepsilon} &= H_{min}^{\varepsilon}(\rho_{XE}^{\otimes n}|\rho_{E}^{\otimes n}) - H_{max}^{\varepsilon}(\rho_{XY}^{\otimes n}|\rho_{Y}^{\otimes n}) = \\ &= n\left(1 - 2h(Q) - 2\text{const}\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right). \quad (93) \end{aligned}$$

В асимптотическом пределе $n \to \infty$, $\varepsilon \to 0$ последнее слагаемое в (93) стремится к нулю, и мы приходим к знаменитой формуле для длины секретного ключа протокола BB84 [4, 17] $\ell^{\varepsilon\to 0} = n(1 - 2h(Q))$. Длина секретного ключа обращается в нуль при ошибке выше критической $Q_c \approx 11\,\%$.

9. ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ИЗМЕРЕНИЙ

В реальной ситуации истинная вероятность ошибки $\overline{Q}$ точно не известна, имеется лишь оценка данной вероятности. Есть различные способы оценки данной вероятности. Первый способ состоит в раскрытии и сравнении части последовательности, посланной Алисой, и последовательности, измеренной Бобом. Пусть оценка вероятности ошибки — доля неправильных отсчетов n_{incorr}, зарегистрированных Бобом из последовательности длины n_1, есть $Q = n_{incorr}/n_1$. Из-за конечной длины последовательности число (частота) неправильных отсчетов флуктуирует.

Второй способ оценки вероятности состоит в следующем. Существующие процедуры коррекции ошибок позволяют сразу проводить коррекцию ошибок без предварительной оценки вероятности ошибки. Пусть проведена чистка ошибок, после коррекции известна оценка вероятности ошибки — известно число исправленных битов. Однако это не означает, что такое число и есть истинное число ошибок в последовательности n_1. Для определенности будем иметь в виду первый способ. При этом для экономии обозначений будем считать, что длина n_1 раскрываемой последовательности для оценки вероятности ошибки совпадает с длиной не раскрываемой последовательности n для получения ключа.

При оценке вероятности ошибки фактически мы имеем дело с бернуллиевской схемой испытаний. Для бернуллиевской схемы испытаний вероятность того, что частота ошибок Q в последовательности длины n отличается от вероятности $\overline{Q}$, есть (см., например, [18])

$$\Pr\{\Omega_1\} = \Pr\{|\overline{Q} - Q| \le \delta(\varepsilon_1)\} \ge \\ \ge 1 - 2\exp\{-2\delta(\varepsilon_1)^2 n_1\} = 1 - \varepsilon_1. \quad (94)$$

Важно отметить, что данная оценка является однородной в том смысле, что вероятность отклонения частоты $\overline{Q}$ от истинной вероятности $\overline{Q}$ не зависит от величины вероятности $\overline{Q}$. По этой причине формулу (94) можно интерпретировать следующим образом: вероятность события, что наблюдаемая величина ошибки попадает в δ-окрестность истинной вероятности $\overline{Q}$ $(Q - \delta(\varepsilon_1), Q + \delta(\varepsilon_1))$, реализуется с вероятностью не менее $1 - \varepsilon_1$.

10. ОЦЕНКА ДЛИНЫ СЕКРЕТНОГО КЛЮЧА: ОДНОФОТОННЫЙ СЛУЧАЙ, ИДЕАЛЬНЫЕ ДЕТЕКТОРЫ, КОНЕЧНЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ

При конечной длине последовательности, когда вероятность ошибки точно не известна, для вычисления сглаженной min-энтропии нужно использовать формулы (52)–(57) для матриц плотности, в которых вместо Q должно быть подставлено $Q_{max} = Q + \delta(\varepsilon_1)$ — чем больше ошибка, тем меньше условная энтропия, тем меньше нехватка информации Евы о ключе. Значение берется на правой границе доверительного интервала в (94). При этом вероятность события Ω_1 не менее $1-\varepsilon_1$. С учетом сказанного для тензорного произведения

$$\rho^{(n)}_{XE|Q_{max}} = \rho^{\otimes n}_{XE|Q_{max}}$$

для сглаженной энтропии с учетом (52)–(57) получаем

$$H^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}_{min}(\rho^{(n)}_{XE|Q\in\delta_Q}|\rho^{(n)}_{E|Q\in\delta_Q}) \ge \\ \ge n\left(H(\rho_{XE|Q_{max}}|\rho_{E|Q_{max}}) - \right. \\ \left. - \mathrm{const}\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right)}\right), \quad Q_{max} = Q + \delta(\varepsilon_1), \quad (95)$$

где Q — наблюдаемая ошибка на приемной стороне, Q_{max} — оценка вероятности ошибки — значение на правой границе доверительного интервала.

В итоге вычисление условной сглаженной энтропии проводится на матрицах плотности $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$, близких в смысле следового расстояния к истинной матрице плотности, находим

$$H^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}_{min}(\rho^{(n)}_{XE|Q\in\delta_Q}|\rho^{(n)}_{E|Q\in\delta_Q}) \ge \\ \ge n\left(1 - h(Q+\delta(\varepsilon_1)) - \mathrm{const}\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right)}\right). \quad (96)$$

Для оценки длины секретного ключа нужно учесть информацию, выдаваемую при коррекции ошибок. В шенноновском пределе аналогично (91)–(93) получаем

$$H^{\varepsilon_1+\varepsilon_2}_{max}(\rho^{(n)}_{XE|Q\in\delta_Q}|\rho^{(n)}_{E|Q\in\delta_Q}) \le \\ \le n\left(h(Q + \delta(\varepsilon_1)) + \mathrm{const}\sqrt{\frac{1}{n}\log\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right)}\right). \quad (97)$$

После этого проверяется факт исправления ошибок. Алиса генерирует открыто случайную битовую строку длиной n и вычисляет бит четности данной строки со своим ключом. Боб поступает аналогично. Биты четности Алисы и Боба открыто сравниваются. Процедура проводится M раз. Если все M сравнений успешны, то вероятность того, что все ошибки действительно исправлены и очищенный ключ Боба X_B совпадает с ключом Алисы X_A, есть

$$\Pr[X_A = X_B] \ge 1 - \varepsilon_{corr}, \quad \varepsilon_{corr} = 1/2^M. \quad (98)$$

Поскольку при такой проверке через открытый канал связи выдается $M = \log(1/\varepsilon_{corr})$ битов информации, длина финального секретного ключа должна быть уменьшена на M битов. Окончательно для оценки длины $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$-секретного ключа получаем

$$\ell^{\varepsilon} = n\left(1 - 2h\left(Q + \delta(\varepsilon_1)\right)\right) - \\ - 2\mathrm{const}\sqrt{n\log\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right)} - \log\left(\frac{1}{\varepsilon_{corr}}\right). \quad (99)$$

Связь между $\delta(\varepsilon_1)$ и ε_1 дается формулой (94).

Формула (99) означает, что если n-битовая строка первичного ключа до коррекции ошибок сжимается при помощи универсальных хеш-функций второго порядка до длины, определяемой (99), то сжатая строка — финальный ключ — будет ε-секретным в смысле следового расстояния.

Из сравнения (93) и (99) видно, что при конечной длине передаваемой последовательности эффективная ошибка Q_{max}, входящая в формулу для длины

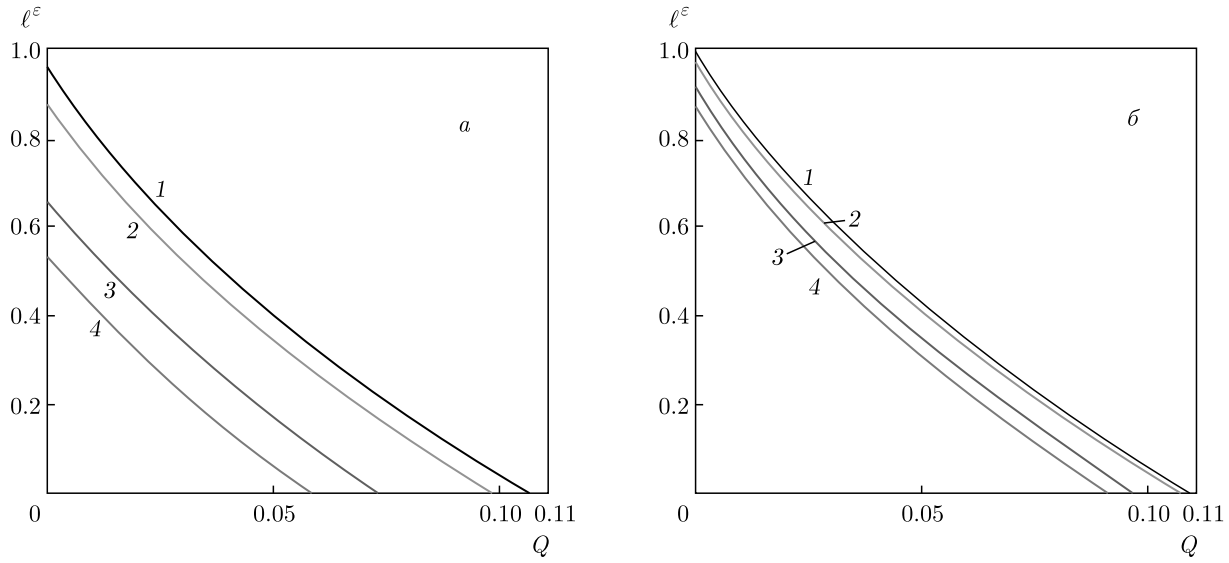


Рис. 1. Зависимости длины секретного ключа в пересчете на одну посылку от наблюдаемой величины ошибки Q: *а*) предел конечных последовательностей, имеется оценка вероятности ошибки, *б*) вероятность ошибки точно известна. Параметр секретности $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-9}$ для всех кривых. Длина последовательности n для оценки параметров и длина последовательности для получения ключа приняты одинаковыми и равными $n = 10^7$ (*1*), 10^6 (*2*), 10^5 (*3*), 10^4 (*4*)

секретного ключа, оказывается большей, чем реальная ошибка Q.

Результат, аналогичный выражению (99), был получен ранее в [5] с использованием энтропийных соотношений неопределенностей. В нашем случае результат получается явным построением атаки Евы на передаваемый ключ, что требуется для последующего вычисления длины ключа в случае неидеальных детекторов с различными квантовыми эффективностями, а также для учета побочных каналов утечки информации к Еве.

11. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ В ОДНОФОТОННОМ СЛУЧАЕ

Для иллюстрации эволюции длины секретного ключа по мере последовательного включения в рассмотрение различных факторов приведем результаты численных расчетов.

Однофотонный случай, предел конечных последовательностей, равные квантовые эффективности детекторов.

На рис. 1 приведены зависимости от Q длины секретного ключа для строго однофотонных информационных состояний в пределе конечных последовательностей (рис. 1*а*) в случае, когда истинная вероятность ошибки неизвестна, а делается ее оценка через наблюдаемую величину ошибки Q. Рисунок 1*б* относится к случаю, когда истинная вероятность ошибки $\overline{Q}$ точно известна.

Как видно из рис. 1, с ростом длины последовательности n, используемой для оценки величины ошибки, критическая наблюдаемая ошибка Q, до которой возможно секретное распределение ключей, увеличивается и принимает асимптотическое значение $Q \approx 11\,\%$. Таким образом, при заданном параметре секретности $\varepsilon_{1,2}$ для достижения большей величины критической ошибки требуется более длинная последовательность для оценки истинной вероятности ошибки.

Однофотонный случай, разные квантовые эффективности детекторов, конечные последовательности.

Отметим, что поиск минимума по одной переменной x проводился с учетом флуктуаций параметра ошибки (см. формулу (78)). Как видно на рис. 2, длина ключа обнаруживает минимум как функция параметра минимизации x. Кроме того, скалярные произведения между состояниями Евы в симметричном случае — одинаковые наблюдаемые ошибки в прямом и сопряженном базисах, $\xi_0 = \xi_1 = 0.5$ — равные квантовые эффективности детекторов, оказываются одинаковыми в минимуме длины секретного ключа. В симметричном случае скалярные произведения $\varepsilon_+(\Phi)$ и $\varepsilon_\times(\Phi)$, $\varepsilon_+(\Theta)$ и $\varepsilon_\times(\Theta)$ оказываются равными $1 - 2\overline{Q}$ ($\overline{Q}$ — ошибка с учетом флук-

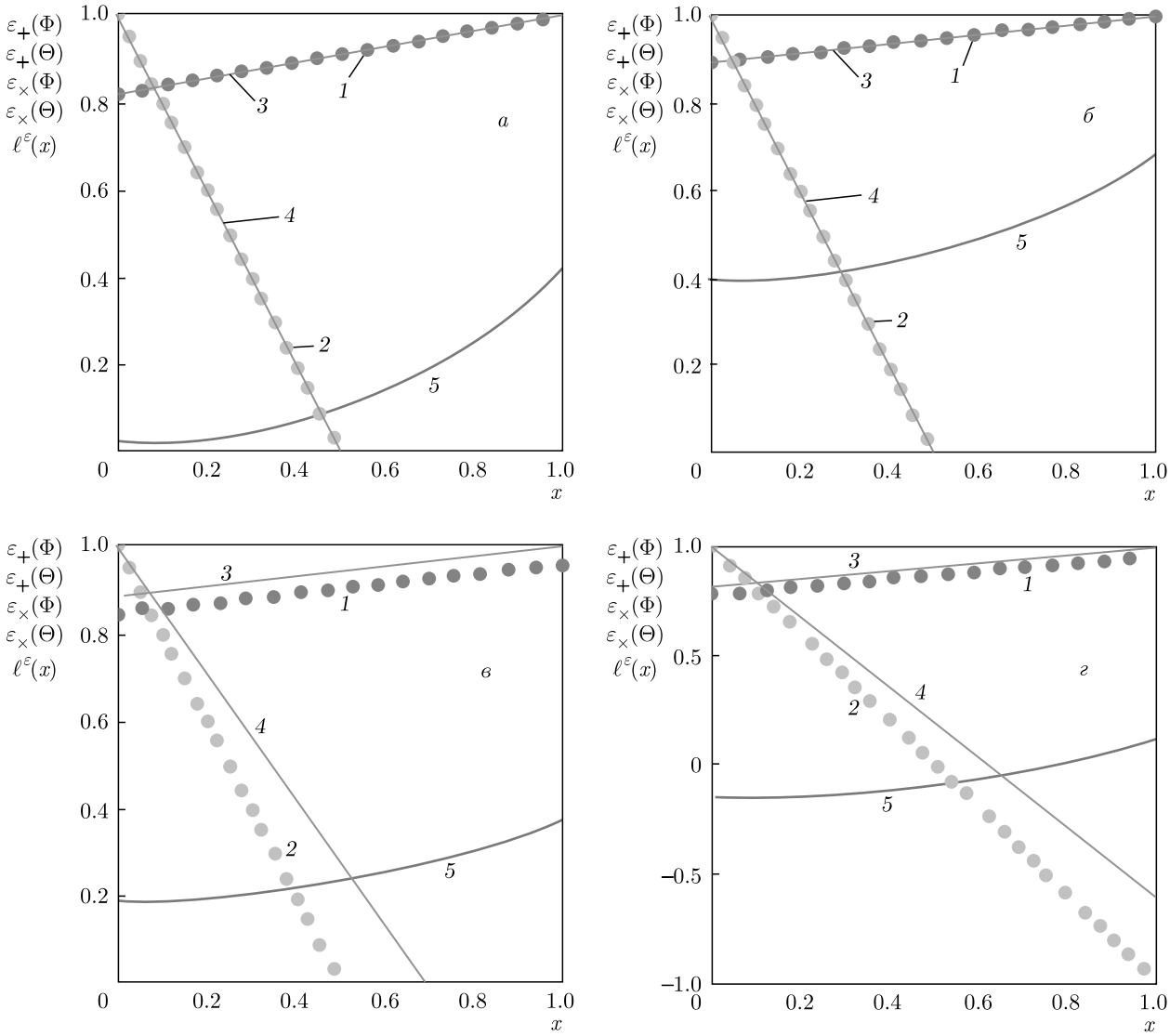


Рис. 2. Зависимости ненаблюдаемых скрытых параметров — скалярных произведений между состояниями Евы в разных базисах (кривые *1–4*), кривые *5* — зависимости длины секретного ключа от параметра оптимизации x (формула (78)). Кривым *1* отвечает зависимость $\varepsilon_+(\Phi)$, *2* — $\varepsilon_+(\Theta)$, *3* — $\varepsilon_\times(\Phi)$, *4* — $\varepsilon_\times(\Theta)$ как функция параметра x. Значения параметров: $\xi_0 = 0.5$, $\xi_1 = 0.5$ для всех кривых рис. *а, б*. Вероятность наблюдаемой ошибки $Q^+ = Q^\times = 0.05$ для всех кривых рис. *а, б*. Длина последовательности $n = 10^4$ для кривых рис. *а*, $n = 10^6$ для кривых рис. *б*. Значения параметров: $\xi_0 = 0.25$, $\xi_1 = 0.75$ для всех кривых рис. *в, г*. Вероятность наблюдаемой ошибки $Q^+ = 0.05$, $Q^\times = 0.07$ для всех кривых рис. *в, г*. Длина последовательности $n = 10^4$ для кривых рис. *г*, $n = 10^6$ для кривых рис. *в*. Параметр секретности для всех кривых $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-9}$

туаций) в разных базисах. Как видно из сравнения рис. 2*а* и *б*, а также рис. 2*г* и *в*, с уменьшением длины последовательности n, используемой для оценки параметров, длина секретного ключа уменьшается из-за большего доверительного интервала при заданном параметре секретности ε. Кроме того, с увеличением разницы квантовых эффективностей детекторов длина секретного ключа уменьшается. Например, из рис. 2*г* видно, что при достаточно большой разности квантовых эффективностей детекторов ($\xi_0 = 0.25$, $\xi_1 = 0.75$) длина ключа в минимуме оказывается отрицательной, что означает невозможность получить секретный ключ при таких параметрах. При длине последовательности

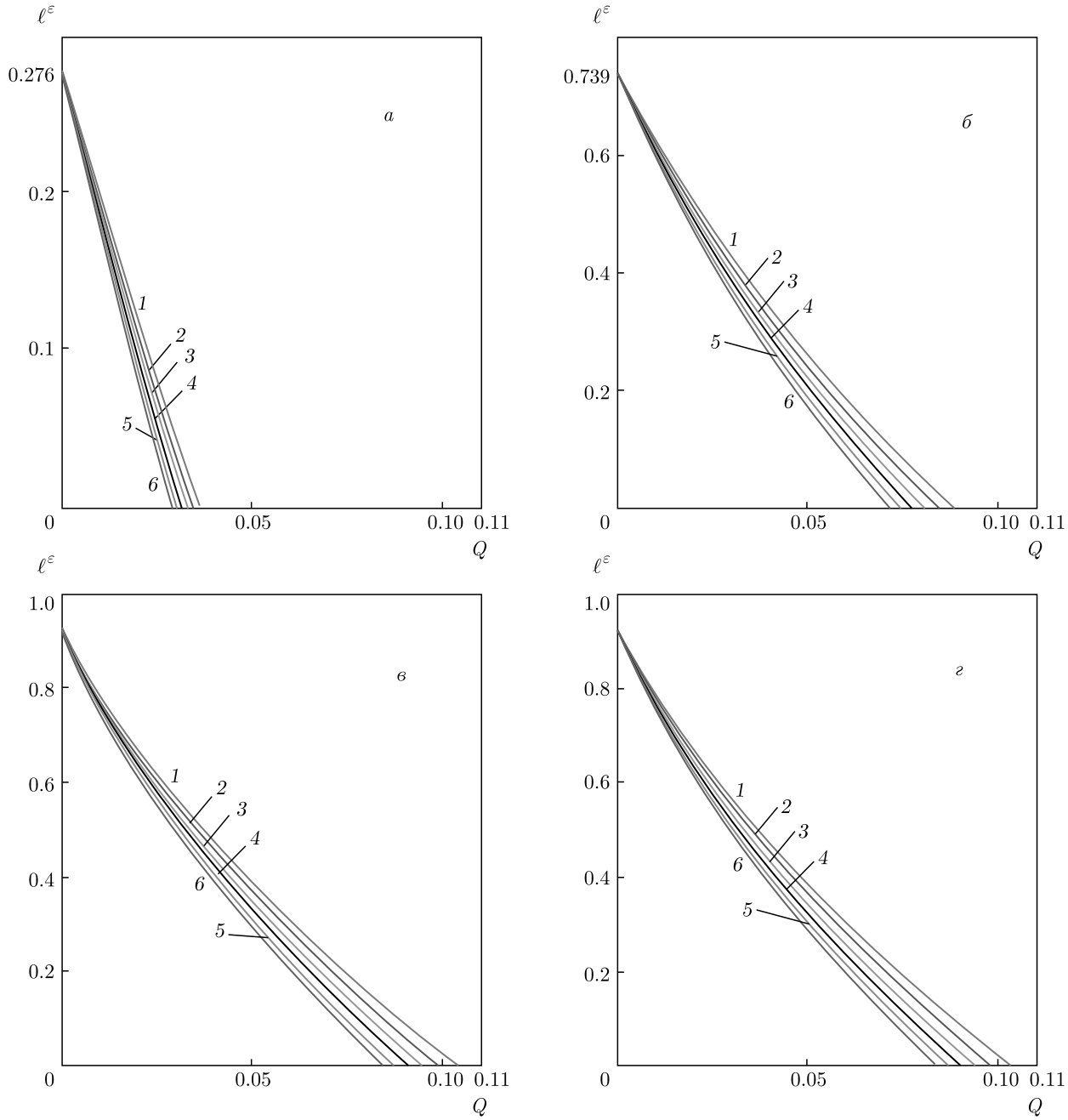


Рис. 3. Зависимости длины секретного ключа от наблюдаемой ошибки Q в базисе $+$ в случае конечной длины последовательности. Параметры для рис. *а, б*: квантовые эффективности детекторов $\xi_0 = 0.25$, $\xi_1 = 0.75$ для всех кривых; наблюдаемая ошибка в базисе $Q^\times = Q$, $1.1Q$, $1.2Q$, $1.3Q$, $1.4Q$, $1.5Q$ соответственно для кривых *1–6*; длина последовательности для оценки параметров $n = 10^4$ (*а*), $n = 10^6$ (*б*). Параметры для рис. *в, г*: *в*) квантовые эффективности детекторов $\xi_0 = 0.5$, $\xi_1 = 0.5$ для всех кривых; *г*) квантовые эффективности детекторов $\xi_0 = 0.45$, $\xi_1 = 0.55$ для всех кривых; наблюдаемая ошибка в базисе $Q^\times = Q$, $1.1Q$, $1.2Q$, $1.3Q$, $1.4Q$, $1.5Q$ соответственно для кривых *1–6*; длина последовательности для оценки параметров рис. *в, г* $n = 10^6$. Параметр секретности для всех рисунков $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-9}$

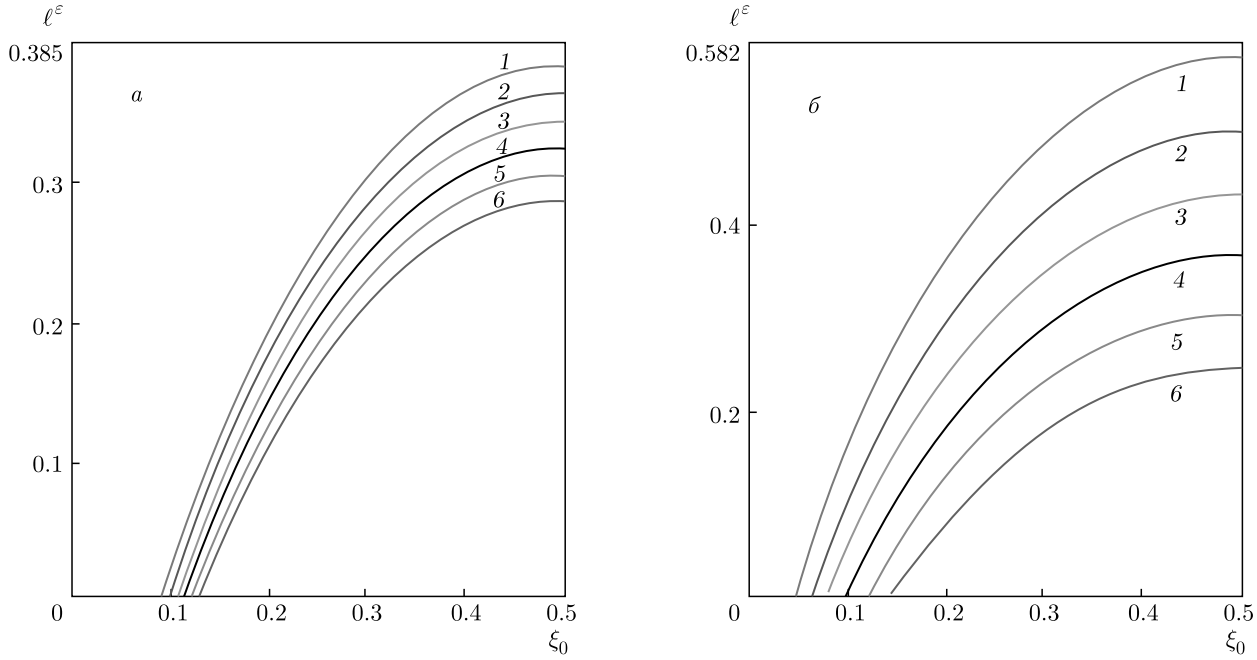


Рис. 4. Зависимости длины секретного ключа от квантовой эффективности детекторов $\xi_0 = \eta_0/(\eta_0+\eta_1)$ при различных значениях наблюдаемой ошибки в разных базисах. Значения используемых параметров: *а*) $Q^+ = 0.05$ для всех кривых, $Q^\times = 0.05,\ 1.1\cdot 0.05,\ 1.2\cdot 0.05,\ 1.3\cdot 0.05,\ 1.4\cdot 0.05, 1.5\cdot 0.05$ соответственно для кривых *1–6*; *б*) $Q^+ = 0.01,\ 0.02,\ 0.03,\ 0.04,\ 0.05,\ 0.06$, $Q^\times = 0.05,\ 1.1\cdot 0.05,\ 1.2\cdot 0.05,\ 1.3\cdot 0.05,\ 1.4\cdot 0.05,\ 1.5\cdot 0.05$ соответственно для кривых *1–6*. Длина последовательности для всех кривых $n = 10^6$, параметр секретности $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-9}$

$n = 10^4$ для оценки параметров доверительный интервал оказывается широким и оценка истинной вероятности ошибки завышенной (ср. рис. 2*в* и 2*г*).

Зависимости длины секретного ключа от наблюдаемой ошибки в однофотонном случае при конечных длинах последовательностей приведены на рис. 3. Однородная оценка параметров по наблюдаемой ошибке проводилась по формуле (94). После этого проводилась минимизация длины ключа по параметру x. Основной вывод из рис. 3 сводится к тому, что критическая наблюдаемая ошибка и длина секретного ключа уменьшаются по мере несимметричности по наблюдаемой ошибке в разных базисах и при разных квантовых эффективностях детекторов. Выход длины секретного ключа на асимптотический режим происходит при длинах n, используемых для оценки истинной вероятности ошибки, т. е. при значениях $n \approx 10^6$ (см. рис. 3*а,б* и рис. 3*в,г*).

Представляет интерес поведение длины секретного ключа в широком диапазоне квантовых эффективностей детекторов. На рис. 4 приведены зависимости от ξ_0 длины секретного ключа в строго однофотонном случае при конечных длинах последовательностей.

Как следует из рис. 4, при данной наблюдаемой вероятности ошибки существует критическое значение разности квантовых эффективностей, при которой еще возможно распределение секретных ключей. При стремлении квантовой эффективности одного из детекторов к нулю длина секретного ключа обращается в нуль при сколь угодно малой ошибке.

12. УЧЕТ НЕОДНОФОТОННОСТИ ИНФОРМАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ, DECOY STATE-МЕТОД ПРИ РАЗНЫХ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТИВНОСТЯХ ДЕТЕКТОРОВ

Как упоминалось выше, секретный ключ набирается из однофотонной компоненты состояний, достигающей приемной стороны. В этом разделе получим оценки для вероятности однофотонной компоненты состояний, когда параметры атаки Евы известны точно. В следующем разделе учтем тот факт, что параметры точно не известны, а имеется лишь оценка параметров. Затем будут учтены поправки, связанные с конечной длиной передаваемых последовательностей.

Исходный Decoy State-метод исходит из следующих посылок [19–22]. Информационными состояниями являются когерентные состояния. Используется несколько когерентных состояний с разными средними числами фотонов. Часть состояний являются информационными, часть — состояниями «ловушками», которые используются для оценки доли однофотонной компоненты регистрируемых состояний и вероятности ошибки в однофотонной компоненте информационных состояний. Фаза когерентных состояний считается полностью рандомизированной — равнораспределенной на отрезке $[0, 2\pi]$. Поскольку фаза когерентных состояний в каждой посылке подслушивателю неизвестна, подслушиватель «видит» в канале не чистые когерентные состояния, а статистическую смесь фоковских состояний с разным числом фотонов. Статистика состояний по числу фотонов является пуассоновской.

Далее для определенности будем рассматривать Decoy State-метод с тремя состояниями (одно информационное, два состояния «ловушки») соответственно со средним числом фотонов $\xi \in \mathcal{I} = \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$. Для матрицы плотности состояний в канале имеем

$$\rho^x(\xi) = e^{-2\xi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\xi)^k}{k!} |\Psi_k^x\rangle_{BB}\langle\Psi_k^x| = \\ = \sum_{k=0}^{\infty} P^{(k)}(\mu) |\Psi_k^x\rangle_{BB}\langle\Psi_k^x|, \tag{100}$$

$$P_k(\xi) = e^{-2\xi} \frac{(2\xi)^k}{k!},$$

$$|\Psi_k^x\rangle_B = \sqrt{\frac{k!}{2^k}} \sum_{m=0}^{k} e^{i\varphi_x m} \frac{|m\rangle_1 \otimes |k-m\rangle_2}{\sqrt{m!(k-m)!}}, \tag{101}$$

где φ_x — относительная фаза состояний, локализованных во временных окнах 1 и 2, в которую кодируется информация о битах ключа, состояния $|m\rangle_1 \otimes |k-m\rangle_2$ — фоковские состояния при фазовом кодировании во временных окнах 1 и 2 (нижние индексы).

Нужно отметить следующее. Состояния в (100), (101) после рандомизации фаз в среднем имеют такой вид в канале связи. При фазовом кодировании число фотонов в двух временных окнах равно 2ξ. Перед регистрацией данные (см., например, [8]) состояния преобразуются на интерферометре Маха – Цандера, затем регистрируются в определенном временном окне, поэтому вероятность регистрации пропорциональна ξ, а не 2ξ. Этот факт учитывается при численных расчетах ниже.

Стандартная квантовомеханическая интерпретация матрицы плотности — квантового ансамбля, сводится к тому, что в канале присутствуют состояния $|\Psi_k^x\rangle_{BB}\langle\Psi_k^x|$ с разными числами фотонов с вероятностями

$$P_k(\xi) = e^{-2\xi} \frac{(2\xi)^k}{k!}.$$

Основная идея метода состоит в том, что подслушиватель, не имея дополнительной информации и обнаружив в канале связи компоненту состояний с данным числом фотонов k, не знает, из какого состояния и с каким средним числом фотонов данная компонента возникла. Основное предположение стандартного Decoy State-метода основано на том, что, обнаружив число фотонов k, подслушиватель действует каждый раз одинаково, т. е. действия подслушивателя зависят только от обнаруженного числа фотонов в состоянии. На формальном уровне действия подслушивателя после обнаружения состояния с данным числом фотонов описываются действием супероператора — вполне положительного отображения — наиболее общего преобразования квантовых состояний в квантовые состояния. Вид супероператора зависит только от обнаруженного числа фотонов в канале.

Супероператор в самом общем виде может быть представлен как

$$\mathcal{T}_{BE}[|\Psi_k^x\rangle_{BB}\langle\Psi_k^x|] = \rho_{k,BE}^x. \tag{102}$$

В результате возникает запутанное состояние Боб–Ева $\rho_{k,BE}^x$. Явный вид состояния в (102) в стандартном Decoy State-методе не требуется. Для оценки доли однофотонной компоненты и вероятности ошибки в ней достаточно только наблюдаемого темпа отсчетов в посылках, отвечающих состояниям с различными средними числами фотонов.

В итоге Боб на приемной стороне измеряет не исходные состояния, а состояния (102).

Измерения Боба на приемной стороне описываются разложением единицы, обычно ортогональным (50), (51). В результате измерений у Боба возникает отсчет, который интерпретируется как логический бит $y = 0$ или $y = 1$.

Пусть Алисой было послано состояние, отвечающее логическому значению бита $x = 0, 1$, тогда условная вероятность того, что Боб зарегистрирует значение y, есть

$$P_{Y|X}^{(k)}(y|X = x) = \mathrm{Tr}_{BE}\{M_y \rho_{k,BE}^x\}. \tag{103}$$

Для Decoy State-метода принципиально важно, что условная вероятность не зависит от ξ — среднего

числа фотонов в квантовом состоянии, а только от обнаруженного числа фотонов в данной посылке. Полный темп отсчетов (условная вероятность пока не нормирована) для посылок, когда посылалось состояние со средним числом фотонов ξ, отвечающее логическому значению бита Алисы x, и когда Боб зарегистрировал логическое значение бита y, с учетом (100), (103) равен

$$P_\xi(y^\alpha|X=x^\alpha) = \\ = \sum_{k=0}^{\infty} P^{(k)}(\xi) P^{(k)}_{Y|X}(y^\alpha|X=x^\alpha). \quad (104)$$

Темп отсчетов (104) зависит от базиса $\alpha = +, \times$ из-за разных квантовых эффективностей детекторов, но не зависит от ξ.

Для дальнейшего рассмотрения будут нужны парциальные темпы отсчетов, а именно, посылались 0 и 1, отсчеты были 0, аналогично, посылались 1 и 0, отсчеты были 1 (как правильные, так и неправильные). Соответствующие условные вероятности в базисе + имеют вид

$$Y^\alpha_k(00) = P^{(k)}_{Y|X}(0^+|X=0^+), \quad (105)$$

$$Y^\alpha_k(10) = P^{(k)}_{Y|X}(1^+|X=0^+), \quad (106)$$

$$Y^\alpha_k(11) = P^{(k)}_{Y|X}(1^+|X=1^+), \quad (107)$$

$$Y^\alpha_k(01) = P^{(k)}_{Y|X}(0^+|X=1^+). \quad (108)$$

Полный условный темп отсчетов есть

$$P^{tot}_\xi(0^\alpha|X=0^\alpha) = e^{-2\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\xi)^k}{k!}Y^\alpha_k(00), \quad (109)$$

$$P^{tot}_\xi(1^\alpha|X=0^\alpha) = e^{-2\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\xi)^k}{k!}Y^\alpha_k(10), \quad (110)$$

$$P^{tot}_\xi(1^\alpha|X=1^\alpha) = e^{-2\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\xi)^k}{k!}Y^\alpha_k(11), \quad (111)$$

$$P^{tot}_\xi(0^\alpha|X=1^\alpha) = e^{-2\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\xi)^k}{k!}Y^\alpha_k(01), \quad (112)$$

$$P^{tot,\alpha}_\xi = P^{tot}_\xi(0^\alpha|X=0^\alpha) + P^{tot}_\xi(1^\alpha|X=0^\alpha) + \\ + P^{tot}_\xi(1^\alpha|X=1^\alpha) + P^{tot}_\xi(0^\alpha|X=^\alpha). \quad (113)$$

Дадим интерпретацию вероятностей в (105)–(113). Состояния, отвечающие 0 и 1, в каждом базисе посылаются равновероятно. Величина

$$e^{-2\xi}\frac{(2\xi)^k}{k!}$$

есть вероятность того, что в канале будет присутствовать компонента состояний с фоковским числом фотонов k при условии, что в канал было послано когерентное состояние со средним числом фотонов ξ. $Y^\alpha_k(ji)$ есть вероятность того, что Бобом будет зарегистрирован отсчет $j = 0, 1$ при условии, что в канал была послана компонента состояний с числом фотонов k, отвечающая логическому биту Алисы i. Данная вероятность не зависит от ξ.

Используем устоявшиеся в Decoy State-методе обозначения для данных вероятностей.

Подчеркнем, что парциальные темпы отсчетов Y_k (в англоязычной версии Yields) не зависят от среднего числа фотонов ξ в состоянии.

Определим парциальный темп ошибочных отсчетов для k-фотонной компоненты состояний, находим

$$\mathrm{Err}^\alpha_k = P^{(k)}_{Y|X}(1^\alpha|0^\alpha) + P^{(k)}_{Y|X}(0^\alpha|1^\alpha) = \\ = Y^\alpha_k(10) + Y^\alpha_k(01). \quad (114)$$

Вероятность ошибки в k-фотонной компоненте состояний

$$Q^\alpha_k = \frac{P^{(k)}_{Y|X}(1^\alpha|0^\alpha) + P^{(k)}_{Y|X}(0^\alpha|1^\alpha)}{P^{(k)}_{Y|X}(1^\alpha|0^\alpha) + P^{(k)}_{Y|X}(0^\alpha|0^\alpha) + P^{(k)}_{Y|X}(0^\alpha|1^\alpha) + P^{(k)}_{Y|X}(1^\alpha|1^\alpha)}. \quad (115)$$

Полный темп ошибочных отсчетов

$$\mathrm{Err}^\alpha_\xi = e^{-2\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\xi)^k}{k!}\,\mathrm{Err}^\alpha_k, \\ Q^{tot,\alpha} = \frac{\mathrm{Err}^\alpha_\xi}{P^{tot,\alpha}_\xi}. \quad (116)$$

12.1. Оценки вероятности однофотонной компоненты состояний и ошибки по Decoy State-методу

Для дальнейшего удобно ввести обозначения (далее $\alpha = +, \times$ — индекс базиса)

$$\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)} = e^{2\xi} P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha),$$
$$\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha} = e^{2\xi}\,\mathrm{Err}_\xi^\alpha\,. \tag{117}$$

Из (109)–(113), (117) получаем оценку вероятности вакуумной компоненты состояний на приемной стороне:

$$Y_0(y^\alpha|X=x^\alpha) \le \max\left\{\frac{2\nu_1\overline{P_{\nu_2}^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)} - 2\nu_2\overline{P_{\nu_1}^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}}{2(\nu_1-\nu_2)}, 0\right\}. \tag{118}$$

Для оценки вероятности однофотонной компоненты с учетом (109)–(113), (117), (118) находим

$$Y_1(y^\alpha|X=x^\alpha) \ge \ge \frac{1}{2(\nu_1-\nu_2) - \dfrac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{2\mu}} \times \times \left\{\left[\overline{P_{\nu_1}^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)} - \overline{P_{\nu_2}^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}\right] - - \frac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{(2\mu)^2}\left[\overline{P_\mu^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)} - - Y_0(y^\alpha|X=x^\alpha)\right]\right\}. \tag{119}$$

Полная вероятность детектирования однофотонной компоненты $Y_1(y^\alpha|X = x^\alpha)$ зависит от детектора. Удобно представить вероятности однофотонной компоненты состояний в следующем виде:

$$Y_1(0^+|X=0^+) = \eta_0\mathcal{Y}_1(1-Q^+),$$
$$Y_1(1^+|X=0^+) = \eta_1\mathcal{Y}_1 Q^+, \tag{120}$$

$$Y_1(1^+|X=1^+) = \eta_1\mathcal{Y}_1(1-Q^+),$$
$$Y_1(0^+|X=1^+) = \eta_0\mathcal{Y}_1 Q^+. \tag{121}$$

Смысл такой параметризации вероятностей следует из унитарной атаки на однофотонную компоненту состояний. Подслушиватель может блокировать часть однофотонных посылок, оставшуюся часть неблокируемых посылок, атакует унитарно. Вероятность неблокируемых посылок есть $\mathcal{Y}_1$. Если, например, в канале присутствовала однофотонная компонента состояния $|0^+\rangle$ в базисе $+$, то после унитарной атаки данное состояние превратится в искаженное состояние (42)–(45), в котором присутствуют компоненты $|0^+\rangle$ и $|1^+\rangle$ (см. формулы (42)–(45)). Компонента $|0^+\rangle$ будет давать отсчет в детекторе $D0$ с вероятностью $\eta_0(1-Q^+)$, а компонента $|1^+\rangle$ — отсчет в детекторе $D1$ с вероятностью $\eta_1 Q^+$. Полное число отсчетов, правильных и ошибочных, от однофотонной компоненты состояний будет равно

$$\mathcal{Y}_1[\eta_0(1-Q^+) + \eta_1 Q^+]$$

полной вероятности регистрации однофотонной компоненты (с точностью до множителя $e^{-2\xi}2\xi/1!$).

Аналогично для других компонент однофотонных состояний. Далее, принимая во внимание формулу (119) для вероятности однофотонной компоненты Y_1, находим

$$(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1 = \sum_{i,j=0,1} Y_1(j^+|X=i^+). \tag{122}$$

В базисе $\times$ имеем

$$Y_1(0^\times|X=0^\times) = \eta_1\mathcal{Y}_1(1-Q_1^\times),$$
$$Y_1(1^\times|X=0^\times) = \eta_0\mathcal{Y}_1 Q_1^+, \tag{123}$$

$$Y_1(1^\times|X=1^\times) = \eta_0\mathcal{Y}_1(1-Q_1^\times),$$
$$Y_1(0^\times|X=1^\times) = \eta_1\mathcal{Y}_1 Q_1^\times, \tag{124}$$

$$(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1 = \sum_{i,j=0,1} Y_1(j^\alpha|X=i^\alpha). \tag{125}$$

Представление (122)–(125) вероятности однофотонной компоненты имеет простой смысл. После обнаружения однофотонной компоненты состояний в канале (данная вероятность зависит от среднего числа фотонов в состоянии и равна $e^{-2\xi}2\xi$) подслушиватель принимает решение, с какой вероятностью блокировать данную компоненту, а с какой вероятностью доставить ее на приемную сторону после унитарной атаки. Величина Y_1 есть вероятность перепосыла искаженной однофотонной компоненты состояний, соответственно величина $\mathcal{Y}_1\eta_0$ есть полная вероятность регистрации однофотонной компоненты детектором с квантовой эффективностью η_0 с учетом правильных и неправильных отсчетов. Вероятность правильных отсчетов среди них будет $\mathcal{Y}_1\eta_0(1-Q^{+,\times})$, соответственно вероятность ошибочных отсчетов в данном детекторе есть $\mathcal{Y}_1\eta_0 Q^{+,\times}$.

Для оценки вероятности ошибки в однофотонной компоненте в базисе $+$, используя (114)–(119), находим

$$(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1 Q_1^+ = Y_1^+(10) + Y_1^+(01) = = \overline{\mathrm{Err}_1^+} \le \frac{\overline{\mathrm{Err}_{\nu_1}^+} - \overline{\mathrm{Err}_{\nu_2}^+}}{2(\nu_1-\nu_2)}. \tag{126}$$

Аналогично для оценки вероятности ошибки в однофотонной компоненте в базисе $\times$ с учетом (114)–(119) получаем

$$(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1 Q_1^{\times} = Y_1^{\times}(10)+Y_1^{\times}(01) = \\ = \overline{\mathrm{Err}_1^{\times}} \le \frac{\overline{\mathrm{Err}_{\nu_1}^{\times}} - \overline{\mathrm{Err}_{\nu_2}^{\times}}}{2(\nu_1-\nu_2)}. \quad (127)$$

Комбинируя (126), (127) и (119), для вероятностей $Q_1^{+,\times}$ получаем

$$Q_1^{+} \le \frac{\overline{\mathrm{Err}_1^{+}}}{(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1}, \quad Q_1^{\times} \le \frac{\overline{\mathrm{Err}_1^{\times}}}{(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1}, \quad (128)$$

$$Y_1^{\alpha}(00)+Y_1^{\alpha}(10)+Y_1^{\alpha}(01)+Y_1^{\alpha}(11) = \\ = (\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1 \ge \frac{1}{2(\nu_1-\nu_2)-\dfrac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{2\mu}} \times \\ \times \left\{ \left[\overline{P_{\nu_1}^{tot,\alpha}} - \overline{P_{\nu_2}^{tot,\alpha}}\right] - \right. \\ \left. - \frac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{(2\mu)^2}\left[\overline{P_{\mu}^{tot,\alpha}} - Y_0^{\alpha}\right]\right\}. \quad (129)$$

В (129) для краткости введены обозначения

$$\overline{P_{\xi}^{tot,\alpha}} = \sum_{y^{\alpha}}\sum_{x^{\alpha}} \overline{P_{\xi}^{tot}(y^{\alpha}|X=x^{\alpha})}, \\ Y_0^{\alpha} = \sum_{y^{\alpha}}\sum_{x^{\alpha}} Y_0(y^{\alpha}|X=x^{\alpha}). \quad (130)$$

Вероятности парциальных и полных вероятностей отсчетов в разных базисах определяются из экспериментальных данных. Формулы (126)–(128) дают вероятность регистрации однофотонной компоненты и вероятность ошибки в ней.

12.2. Определение вероятностей из экспериментальных данных, концентрационные неравенства

Для определения вероятности однофотонной компоненты состояний и вероятности ошибки в ней необходимо знать вероятности отсчетов. В реальности данные вероятности неизвестны, из эксперимента определяются частоты отсчетов для соответствующих вероятностей.

Оценка условных вероятностей в (109)–(113) получается путем раскрытия части переданной последовательности состояний. Пусть Алиса посылает $N_{\xi}^{sent}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})$ состояний $i=0,1$ в базисе $\alpha=+,\times$ со средним числом фотонов ξ. Боб проводит измерения в согласованном базисе и получает $N_{\xi}^{reg}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})$ отсчетов для $j=0,1$. Частота отсчетов равна

$$\widetilde{P_{\xi}^{tot}}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha}) = \frac{N_{\xi}^{reg}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})}{N_{\xi}^{sent}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})}. \quad (131)$$

Частота отсчетов является случайной величиной и подвержена флуктуациям.

Существует две постановки задачи.

1. Точные вероятности известны и требуется определить вероятность того, что при конечной серии испытаний произойдет число отсчетов, количество которых лежит в заданном интервале.

В такой постановке задача относится к области теории вероятностей.

2. Точные значения вероятностей неизвестны и требуется определить вероятность того, что истинная вероятность отсчетов лежит в заданном интервале значений.

Именно такая ситуация имеет место в квантовой криптографии (см. разделы выше). Такая постановка относится к области математической статистики.

Нас интересует вторая постановка задачи, а именно, вычисление вероятности $\Pr\{\Omega_1\}$ события Ω_1, что истинная вероятность лежит в заданном диапазоне значений.

Для решения задачи в такой постановке используются так называемые концентрационные неравенства. Существует обширная литература по данному вопросу и различные типы концентрационных неравенств (см., например, [18] и большое число ссылок в работе).

Удобна следующая формулировка применительно к нашему случаю: пусть ζ_i $(i=1,\ldots,n)$ — независимые случайные величины, $0 \le \zeta_i \le 1$. Пусть эмпирическое математическое ожидание

$$\overline{\zeta} = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\zeta_i\right), \quad (132)$$

тогда имеет место соотношение

$$\Pr\left(|\overline{\zeta}-\mathrm{E}(\overline{\zeta})| \le \delta\right) \ge 1-2e^{-2\delta^2 n}, \quad (133)$$

где $\mathrm{E}(\overline{\zeta})$ — математическое ожидание.

Применительно к нашей ситуации оценка вероятности выглядит следующим образом:

$$\Pr\{|\widetilde{P_{\xi}^{tot}}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha}) - P_{\xi}^{tot}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})| \le \delta(\varepsilon_1)\} \ge \\ \ge 1-2\exp\left(-2\delta^2(\varepsilon_1)N_{\xi}^{sent}(j^{\alpha}|X=i^{\alpha})\right) = \\ = 1-\varepsilon_1. \quad (134)$$

Для получения ε-секретного ключа фиксируется значение ε_1, по этому значению определяется величина $\delta(\varepsilon_1)$ — ширина доверительного интервала, который используется при вычислении ошибки и условной сглаженной min-энтропии.

Важно отметить, что, строго говоря, оценки вероятности должны быть однородными — правые части (94), (133) не должны зависеть от самой неизвестной вероятности, которую нужно оценить.

Для того чтобы проиллюстрировать существенную разницу в оценках при первой постановке задачи (вероятности известны) и второй (вероятности неизвестны, см. выше), приведем оценку вероятности при первой постановке. Наиболее ясно это можно сделать на примере бернуллиевской схемы испытаний. Пусть случайные величины ζ_i имеют бернуллиевское распределение ($\zeta_i = *$ — есть фотоотсчет с вероятностью p, $\zeta_i = \sqcup$ — нет фотоотсчета с вероятностью $1-p$). В этом случае вероятность того, что при n испытаниях число отсчетов $\overline{p} = \tilde{n}p$ будет уклоняться от математического ожидания np не более, чем на δ, есть (см., например, [18])

$$\Pr\{|\overline{p} - p| \le \delta\} \ge 1 - 2\exp\left(-\frac{\delta^2 n}{2p(1-p)}\right). \quad (135)$$

В (135) используем стандартную оценку в правой части, существует множество вариантов с различными функциями вероятностей в правой части [18], но для наших целей достаточно такой оценки. В нашем случае оценка с известным распределением вероятностей выглядит как

$$\Pr\{|\widetilde{P_\xi^{tot}}(j^\alpha|X=i^\alpha) - P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha)| \le \delta(\varepsilon_1)\} \ge \\ \ge 1-2\exp\left(-\frac{\delta^2(\varepsilon_1)N_\xi^{sent}(j^\alpha|X=i^\alpha)}{P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha)(1-P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha))}\right) = 1-\varepsilon_1. \quad (136)$$

Сравнение (134) и (136) показывает, что для того, чтобы получить оценку числа отсчетов за серию испытаний с одинаковой точностью (δ) при известной и неизвестной вероятности, длины серий испытаний должны быть существенно разными. Действительно, при неизвестной вероятности длина серии должна быть

$$N_\xi^{unknown,sent}(j^\alpha|X=i^\alpha) = \\ = N_\xi^{known,sent}(j^\alpha|X=i^\alpha) \times \\ \times \frac{1}{4P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha)(1-P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha))}, \quad (137)$$

где

$$N_\xi^{unknown,sent}(j^\alpha|X=i^\alpha), \quad N_\xi^{known,sent}(j^\alpha|X=i^\alpha)$$

— длина серии испытаний при неизвестной и известной вероятности. Вероятность фотоотсчета $P_\xi^{tot}(j^\alpha|X=i^\alpha)$ имеет порядок $\mu\eta T(L = 100$ км$) \approx \approx 10^{-4}$–$10^{-5}$ (при типичном среднем числе фотонов в информационном состоянии 0.1–0.5, $T(L) = 10^{-dL/10}$, $d \approx 0.2$ дБ/км, L — длина линии, $\eta \approx 0.1$ — квантовая эффективность детекторов). Сказанное означает, что длина серии, используемой для оценки параметров атаки, должна быть в 10^4–10^5 раз больше для достижения одинаковой точности δ, соответственно, параметра ε_1, определяющего секретность ключей. Как увидим ниже, поскольку требуется оценивать не единственный параметр, неточности оценок по отдельным параметрам складываются и длина требуемой серии может возрастать на 6 порядков.

Нам не известны работы, в которых бы оговаривалось данное обстоятельство. Обычно используют оценки (136) или подобные, при этом молчаливо предполагая, что вероятности известны, т. е. используют неоднородную оценку.

Однородность оценки истинной вероятности по наблюдаемой частоте означает вероятность того, что наблюдаемая частота уклоняется от истинной вероятности не более, чем на $\delta(\varepsilon_1)$, не зависит от самой истинной вероятности. Однородная оценка гарантирует, что вероятность $\Pr\{\Omega_1\}$ того, что истинные значения параметров, которые определяют секретность ключа, не выходят из заданного интервала, не менее $1-\varepsilon_1$.

12.3. Учет флуктуаций параметров

В этом разделе получим оценки вероятности однофотонной компоненты и вероятности ошибки в ней, которые затем будут использованы при оценке длины секретного ключа. Считаем, что вероятности априорно неизвестны (см. обсуждение в предыдущем разделе).

Вероятность того, что частота отсчетов $\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}$ (умноженная на коэффициент $e^{2\xi}$) в последовательности длины N_ξ отличается от истинной вероятности $\overline{\widehat{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}}$ на величину не более $\overline{\delta^\alpha_{x,y,\xi}}$, оказывается не менее

$$\Pr\left\{|\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}-\overline{\widehat{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}}|\le\overline{\delta^\alpha_{x,y,\xi}}\right\}\ge 1-2\exp\left\{-2(\delta^\alpha_{x,y,\xi})^2N_\xi\right\}=1-\varepsilon^\alpha_{x,y\xi}, \tag{138}$$

$$\overline{\delta^\alpha_{x,y,\xi}}=e^\xi\delta^\alpha_{x,y,\xi}.$$

Аналогично вероятность того, что частота ошибок $\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}$ в последовательности длины $N_{Err,\xi}$ отличается от истинной вероятности ошибок $\overline{\widehat{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}}$ на величину не более $\delta^\alpha_{Err,\xi}$, не менее, чем

$$\Pr\left\{|\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}-\overline{\widehat{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}}|\le\overline{\delta^\alpha_{Err,\xi}}\right\}\ge$$
$$\ge 1-2\exp\left\{-2(\delta^\alpha_{Err,\xi})^2N_{Err,\xi}\right\}=1-\varepsilon^\alpha_{Err,\xi}, \tag{139}$$

$$\overline{\delta^\alpha_{Err,\xi}}=e^\xi\delta^\alpha_{Err,\xi}.$$

Для дальнейшего нам понадобятся значения параметров на левой и правой границах доверительного интервала. Значения на границах доверительного интервала обозначим как

$$\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}^\pm=\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)}\pm\overline{\delta^\alpha_{x,y,\xi}}, \tag{140}$$

$$\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}^\pm=\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}\pm\overline{\delta^\alpha_{Err,\xi}}. \tag{141}$$

Для вероятности ошибки нужна консервативная оценка в пользу подслушивателя, т. е. необходимо выбирать значение на правой границе, для $(Q_1^{+,\times})^+$ получаем

$$\begin{aligned}(Q_1^+)^+&\le\frac{\overline{\mathrm{Err}_1^+}^+}{(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1^-},\\(Q_1^\times)^+&\le\frac{\overline{\mathrm{Err}_1^\times}^+}{(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1^-}.\end{aligned} \tag{142}$$

Индекс «+» в (140)–(142) отвечает значениям на правой границе доверительного интервала, а индекс «−» — на левой.

При вычислении $\overline{\mathrm{Err}_1^+}^+$ и $\overline{\mathrm{Err}_1^\times}^+$ в (142) используются формулы (128), в которых оценки вероятностей, входящие со знаком «+», берутся на правой границе доверительного интервала, а входящие со знаком «−» берутся на левой границе доверительного интервала.

Аналогично при вычислении оценки вероятности однофотонной компоненты нужно брать ее значение на левой границе доверительного интервала, с учетом (129) находим

$$(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1^-\ge$$
$$\ge\frac{1}{2(\nu_1-\nu_2)-\dfrac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{2\mu}}\times$$
$$\times\left\{\left[\overline{P_{\nu_1}^{tot,\alpha}}^--\overline{P_{\nu_2}^{tot,\alpha}}^+\right]-\frac{(2\nu_1)^2-(2\nu_2)^2}{(2\mu)^2}\times\right.$$
$$\left.\times\left[\overline{P_\mu^{tot,\alpha}}^+-(Y_0^\alpha)^-\right]\right\}. \tag{143}$$

12.4. Матрицы плотности и оценка длины секретного ключа с учетом флуктуаций параметров

Набором наблюдаемых флуктуирующих параметров являются

$$\begin{gathered}\mathcal{Q}=\left\{\overline{P_\xi^{tot}(y^\alpha|X=x^\alpha)},\overline{\mathrm{Err}_\xi^\alpha}\right\},\\ \alpha=+,\times,\quad x,y=0,1.\end{gathered} \tag{144}$$

Вероятность события Ω_1 — все параметры лежат в доверительном интервале — есть

$$\Pr\{\Omega_1\}\ge 1-\sum_{\alpha=+,\times}\varepsilon^\alpha_{Err,\xi}-$$
$$-\sum_{\alpha=+,\times}\sum_{x,y=0,1}\varepsilon^\alpha_{x,y\xi}=1-\varepsilon_{\Omega_1}. \tag{145}$$

Однофотонная компонента частичной матрицы плотности Алиса–Ева, из которой формируется секретный ключ, после первого усечения, с использованием оценок параметров (138)–(143), имеет вид

$$\rho^\alpha_{XE}=|0^\alpha\rangle_{X\,X}\langle 0^\alpha|\otimes[\xi_0^\alpha(1-(Q^\alpha)^+)|\Phi_{0^\alpha}\rangle_Q\times$$
$$\times{}_Q\langle\Phi_{0^\alpha}|+\xi_1^\alpha(Q^\alpha)^+|\Theta_{0^\alpha}\rangle_{Q\,Q}\langle\Theta_{0^\alpha}|]+$$
$$+|1^\alpha\rangle_{X\,X}\langle 1^\alpha|\otimes[\xi_1^\alpha(1-(Q^\alpha)^+)|\Phi_{1^\alpha}\rangle_{Q\,Q}\langle\Phi_{1^\alpha}|+$$
$$+\xi_0^\alpha(Q^\alpha)^+|\Theta_{1^\alpha}\rangle_{Q\,Q}\langle\Theta_{1^\alpha}|]. \tag{146}$$

Частичная матрица плотности Евы после первого усечения

$$\rho_E^\alpha = \big\{(1-(Q_1^\alpha)^+)[\xi_0^\alpha|\Phi_{0^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Phi_{0^\alpha}| + \\ + \xi_1^\alpha|\Phi_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Phi_{1^\alpha}|] + (Q_1^\alpha)^+[\xi_1^\alpha|\Theta_{0^\alpha}\rangle_E \times \\ \times {}_E\langle\Theta_{0^\alpha}| + \xi_1^\alpha|\Theta_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Theta_{1^\alpha}|]\big\}. \quad (147)$$

Оценка числа информационных однофотонных посылок n_μ^α с учетом (138)–(143) дает

$$n_\mu^\alpha = e^{-2\mu}(2\mu)(\eta_0+\eta_1)\mathcal{Y}_1^- N_\mu^\alpha, \quad (148)$$

где N_μ^α — полное число зарегистрированных информационных посылок в базисе $\alpha = +, \times$.

Условная сглаженная энтропия вычисляется на матрице плотности для однофотонных посылок. В (148) n_μ^α — число однофотонных посылок. Второе усечение матрицы плотности возникает при вычислении условной сглаженной min-энтропии от тензорного произведения матриц плотности, с учетом (146), (147) получаем

$$H_{min}^{\varepsilon_{\Omega_1}+\varepsilon_{\Omega_2}}\left((\rho_{XE}^\alpha)^{\otimes n_\mu^\alpha} \,|\, (\rho_E^\alpha)^{\otimes n_\mu^\alpha}\right) \geq \\ \geq n_\mu^\alpha H\left(\rho_{XE}^\alpha|\rho_E^\alpha\right) - \mathrm{const}\sqrt{n_\mu^\alpha \log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}, \quad (149)$$

где

$$\varepsilon_\Omega = \varepsilon_{\Omega_1\cap\Omega_2} = \varepsilon_{\Omega_1} + \varepsilon_{\Omega_2}. \quad (150)$$

Для утечки информации при коррекции ошибок получаем

$$\mathrm{leak}^\alpha \leq N_\mu^\alpha h((Q_\mu^{tot,\alpha})^+) + \\ + \mathrm{const}\sqrt{N_\mu^\alpha \log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}. \quad (151)$$

Считаем для экономии обозначений, что длина серии для оценки различных параметров одинакова и равна N_μ. Правая граница доверительного интервала — величина $(Q_\mu^{tot,\alpha})^+$ в (151) вычисляется с использованием $\delta(N_\mu, \varepsilon_2)$, а оценки величин в (149) вычисляются с использованием $\delta(n_\mu, \varepsilon_2)$ (см. формулы (138), (139)).

Наконец, для длины ε_Ω-секретного ключа в базисе α получаем

$$\ell_{\varepsilon_\Omega}^\alpha \geq \\ \geq H_{min}^{\varepsilon_{\Omega_1}+\varepsilon_{\Omega_2}}\left((\rho_{XE}^\alpha)^{\otimes n_\mu^\alpha} \,|\, (\rho_E^\alpha)^{\otimes n_\mu^\alpha}\right) - \mathrm{leak}^\alpha \geq \\ \geq n_\mu^\alpha\left\{h(\xi_0) - \left[(1-(Q_1^\alpha)^+)h(\Phi^\alpha) + (Q_1^+)^+ h(\Theta^\alpha)\right]\right\} - \\ - N_\mu^\alpha h(Q_\mu^{tot,\alpha,+}) - \mathrm{const}\sqrt{n_\mu^\alpha \log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)} - \\ - \mathrm{const}\sqrt{N_\mu^\alpha \log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}, \quad (152)$$

где

$$h(\xi_0) = -\xi_0\log(\xi_0) - \xi_1\log(\xi_1), \quad \xi_1 = 1-\xi_0, \quad (153)$$

$$h(\Theta^\alpha) = -\lambda_+(\Theta^\alpha)\log(\lambda_+(\Theta^\alpha)) + \\ + \lambda_-(\Theta^\alpha)\log(\lambda_-(\Theta^\alpha)), \quad (154)$$

$$h(\Phi^\alpha) = -\lambda_+(\Phi^\alpha)\log(\lambda_+(\Phi^\alpha)) + \\ + \lambda_-(\Phi^\alpha)\log(\lambda_-(\Phi^\alpha)). \quad (155)$$

Собственные числа вычисляются по формулам (81)–(90), где в качестве вероятностей ошибок Q^α в базисе α используются их оценки из (138)–(143) $(Q^\alpha)^+$.

Финальная длина секретного ключа по двум базисам определяется минимизацией по ненаблюдаемых скрытым параметрам, получаем

$$\ell_{\varepsilon_\Omega}^\Sigma = \min_{x\in[0,1]}\left\{\ell_{\varepsilon_\Omega}^+ + \ell_{\varepsilon_\Omega}^\times\right\}. \quad (156)$$

13. КВАНТОВЫЕ ПОБОЧНЫЕ КАНАЛЫ УТЕЧКИ ИНФОРМАЦИИ

Системы квантовой криптографии являются открытыми системами. Кроме вторжения в квантовый канал связи при передаче информационных состояний подслушиватель может детектировать побочное излучение передающей и приемной аппаратуры, а также активно зондировать состояние элементов аппаратуры через волоконную линию связи. В данном направлении имеются только отдельные разрозненные результаты [23–25], которые не учитывают все критические факторы, в том числе различную квантовую эффективность.

Критическими побочными каналами утечки информации являются следующие: электромагнитное излучение приемной и передающей аппаратуры, активное зондирование фазового модулятора и модулятора интенсивности, обратное переизлучение лавинных детекторов (back-flash radiadion) при регистрации информационных состояний. Состояния во всех перечисленных побочных каналах несут информацию о передаваемом ключе. Генерация случайных чисел, наложение импульсов напряжения на фазовый модулятор, приложение стробирующих импульсов на лавинные детекторы приводит к излучению, состояния излучения различаются при генерации 0 и 1. Поэтому регистрация состояний в побочных каналах дает дополнительную информацию о битах

передаваемого ключа. Аналогично активное зондирование фазового модулятора с последующим измерением отраженного зондирующего излучения также дает информацию о состоянии фазового модулятора, а значит, о битах ключа. При регистрации информационных состояний на приемной стороне происходит образование лавины носителей, которая при рекомбинации приводит к обратному переизлучению в линию связи. Обычно в системах квантовой криптографии используется пара лавинных детекторов, отсчет в одном детекторе интерпретируется как логический 0, во втором — как логическая 1. Поскольку характеристики детекторов всегда несколько различаются, обратное переизлучение также различается при регистрации детектором 0 и 1. Регистрация back-flash-излучения также дает дополнительную информацию о битах ключа.

Важно отметить, что в отличие от вторжения в квантовый канал связи, которое приводит к возмущению информационных состояний и ошибкам на приемной стороне, детектирование (пассивное или активное) в побочных каналах не приводит к возмущению информационных состояний и, соответственно, к ошибкам на приемной стороне. Побочные каналы утечки информации являются дополнительным информационным «бонусом» для подслушивателя. При наличии побочных каналов утечки информации фундаментальная связь между возмущением состояний и извлечением информации из них разрывается. По этой причине фундаментальные энтропийные соотношения неопределенностей [5], которые связывают возмущение состояний с утечкой информации к подслушивателю, оказываются неприменимыми.

Имеется принципиальное отличие состояний в побочных каналах от информационных состояний в квантовом канале. Перед посылкой информационных квантовых состояний, последние контролируемым образом приготавливаются на передающей станции. Иначе говоря, известно, какие состояния посылаются в канал связи, которые будут атаковаться подслушивателем. Поскольку состояния известны, это позволяет связать возмущение исходно известных состояний с утечкой информации из них. Состояния в побочных каналах, вообще говоря, неизвестны. Действительно, побочное излучение передающей и приемной аппаратуры представляет собой источник с макроскопически большим числом степеней свободы, состояния которых точно неизвестно. Все, что можно контролировать, так это интенсивность побочного излучения в разных спектральных диапазонах. Это достигается аккуратным экранированием аппаратуры. По этой причине можно считать, что спектральная функция распределения числа излученных фотонов известна.

Ситуация с состояниями в побочных каналах при активном зондировании более деликатная. Состояния при активном зондировании элементов системы полностью определяются подслушивателем, поэтому напрямую никак не контролируются легитимными пользователями.

Возникает вопрос: как учитывать побочные каналы утечки информации?

Для каналов с активным зондированием возможно только контролировать верхнюю границу интенсивности отраженных зондирующих состояний, в идеале в разных спектральных диапазонах. Уточним, что имеется в виду. Для волоконных систем квантовой криптографии существует верхняя граница интенсивности (или мощности) излучения, при которой волокно еще не начинает плавиться. Поэтому верхнюю границу по интенсивности входного зондирующего излучения можно считать известной для конкретного типа волокна (см., например, [26]). Зная максимальную интенсивность входного излучения, используя асимметричные оптические изоляторы, можно указать верхнюю границу по интенсивности (числу фотонов) выходного зондирующего излучения, которое будет доступно подслушитателю для детектирования. По этой причине далее будем считать эту границу заданной.

Таким образом, кроме информационных состояний подслушиватель имеет в своем распоряжении квантовые состояния в побочных каналах, которые могут совместно измеряться с информационными состояниями. Максимально допустимая информация, которую может получить подслушиватель, достигается на совместных коллективных измерениях информационных состояний и состояний в побочных каналах.

Перейдем к детальному описанию состояний в побочных каналах.

13.1. Побочный канал — зондирование фазового модулятора

При активном зондировании фазового модулятора подслушиватель будет иметь в своем распоряжении кроме информационных состояний еще и отраженные зондирующие состояния, которые зависят от того, в каком состоянии находится фазовый модулятор — какой логический бит кодируется, 0 или 1. В пользу подслушивателя можно считать отраженные состояния чистыми, поскольку чистые со-

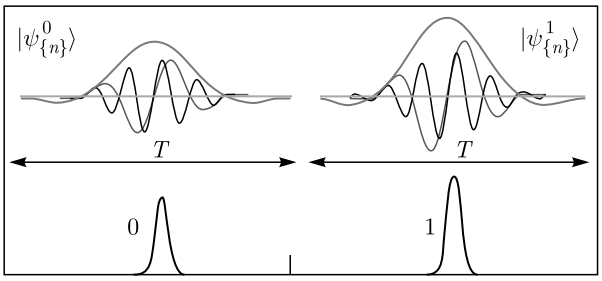


Рис. 5. Схематичное представление состояний в побочном канале, связанном с излучением аппаратуры, в каждом такте передачи квантовых состояний. $|\psi^{0,1}_{\{n\}}\rangle$ — квантовые состояния, возникающие в побочном канале при передаче 0 и 1

стояния более различимы, чем смешанные состояния. В дальнейшем будет видно, что непосредственная структура отраженных от фазового модулятора состояний непринципиальна. В формулу для длины секретного ключа будет входит лишь скалярное произведение (перекрытие) отраженных зондирующих квантовых состояний, отвечающих 0 и 1. Запишем отраженные зондирующие состояния в виде

$$\rho_{PM}^{0^\alpha,1^\alpha} = |\psi_{0^\alpha,1^\alpha}\rangle_{PM\,PM}\langle\psi_{0^\alpha,1^\alpha}|, \tag{157}$$

здесь $|\psi_{0^\alpha,1^\alpha}\rangle_{PM}$ — отраженные зондирующие состояния для 0 и 1 в разных базисах $\alpha = +, \times$. Индекс «PM» символизирует зондирование фазового модулятора (Phase Modulator).

В окончательный ответ для длины секретного ключа будет входить лишь модуль перекрытия состояний $|_{PM}\langle\psi_{0^\alpha,1^\alpha}|\psi_{0^\alpha,1^\alpha}\rangle_{PM}|$.

13.2. Побочный канал — излучение аппаратуры

Излучение аппаратуры приводит к излучению в некотором частотном диапазоне Ω. Ширина спектра излучения Ω определяется наименьшей длительностью импульсов τ при работе управляющей электроники. Подслушиватель для различения состояний излучения в побочном канале проводит измерения в каждом такте длительностью T посылки информационных состояний (см. рис. 5). Максимальная различимость состояний возникает, если состояния в побочном канале в разных тактах не перекрываются между собой.

Для описания квантовых состояний в побочном канале необходимо выбрать набор базисных функций, по которым будет раскладываться квантовое состояние. Таким естественным набором базисных функций являются функции вытянутого сфероида. Удобно выбрать базисные функции максимально локализованными во временном окне $[0, T]$. Условие максимальной локализации состояний во временном окне $[0, T]$, фактически базисных функций $\phi_n(t, c)$, имеющих ширину спектра Ω,

$$\max_{\omega\in[0,\Omega]} \int_0^T |\phi_n(t,c)|^2(t)\,dt, \tag{158}$$

приводит к известному интегральному уравнению [27–29]

$$\lambda_n(c)\phi_n(t,c) = \frac{1}{\pi}\int_0^T \frac{\sin[\Omega(t-t')]}{t-t'} \times \\ \times\, \phi_n(t',c)\,dt', \quad c = \Omega T. \tag{159}$$

Решением являются функции вытянутого сфероида [27–29]. При разных n и n' функции ортогональны как на конечном $[0, T]$, так и на бесконечном $(-\infty, \infty)$ интервалах,

$$\begin{gathered}\int_0^T \phi_n(t,c)\phi_{n'}(t,c)\,dt = \lambda_n(c)\delta_{n,n'}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(t,c)\phi_{n'}(t,c)\,dt = \delta_{n,n'}.\end{gathered} \tag{160}$$

Степень локализации во временном окне $[0, T]$ собственной функции с номером n, являющейся решением уравнения (159), дается ее собственным числом:

$$\int_0^T \phi_n^2(t,c)\,dt = \lambda_n(c). \tag{161}$$

Для дальнейшего удобно перейти к нормированным на отрезке функциям

$$\sqrt{\lambda_n(c)}\,\varphi_n(t) = \phi_n(t,c),$$

параметр c фиксирован. Уникальным свойством волновых функций вытянутого сфероида является их поведение в зависимости от величины параметра ΩT. При значении параметра $\Omega T \gg 1$ имеется $N = \Omega T$ функций, которые локализованы во временном окне с экспоненциальной точностью [29] по параметру ΩT:

$$\lambda_n(c) \sim 1 - \frac{4\sqrt{\pi}8^n c^{n+1/2}}{n!}\,e^{-c}, \quad c = \Omega T. \tag{162}$$

Имеются также примерно $\log(\Omega T)$ функций в переходной области номеров собственных чисел, которые стремятся к нулю. Для остальных номеров

собственные числа почти равны нулю в окне $[0,T]$. Принципиальным фактом при использовании в качестве базисных функций вытянутого сфероида является следующий результат [27]. Для любого $\varepsilon > 0$ имеет место

$$\lim_{\Omega T\to\infty} \lambda_{\Omega T(1-\varepsilon)} = 1, \quad \lim_{\Omega T\to\infty} \lambda_{\Omega T(1+\varepsilon)} = 0. \quad (163)$$

Неформально это означает, что имеется ΩT номеров функций, которые почти целиком локализованы во временном окне T. Для остальных номеров функции равны нулю (при этом они остаются нормированными, нормировка набирается на всем бесконечном интервале). Переходная область по номерам имеет масштаб $\sim \ln(2\pi\Omega T)$, т. е. является крайне узкой — логарифмически узкой по сравнению с ΩT.

Перейдем к построению квантового состояния.

Логика построения квантового состояния с носителем в частотной полосе Ω будет сводиться к следующему. В пользу подслушивателя будем строить состояние так, чтобы из него можно было извлечь максимум информации. Пусть полное число фотонов в состоянии равно M. Данное полное число фотонов нужно таким образом распределить по $N = \Omega T$ одночастичным состояниям, чтобы из него можно было получить максимум информации. Максимум извлекаемой информации достигается на состоянии, в котором различные ортогональные (достоверно различимые) компоненты присутствуют с равной вероятностью. Энтропия такого состояния будет максимальной, соответственно, максимальной будет информация.

В качестве базисных одночастичных состояний будем использовать функции (158) $\phi_n(\omega)$ — фурье-образ от функций в (158). Рассмотрим квантовое состояние поля, которое содержит M фотонов. Число многочастичных ортогональных векторов состояний с M фотонами, локализованных во временном окне T (таких функций $N = \Omega T$), равно числу способов размещения M фотонов по N одночастичным состояниям. Число размещений бозе-частиц по N состояниям равно [30]

$$C^M_{N-1+M} = \frac{(N-1+M)!}{(N-1)!M!}. \quad (164)$$

Вектор состояния, отвечающий размещению M тождественных частиц по N одночастичным состояниям, имеет вид (ниже введено символическое обозначение $\{n\}$ для разбиения числа фотонов $M = n_1 + n_2 + \ldots + n_N$)

$$\begin{aligned}|\psi_{\{n\}}\rangle = \int\limits_{\Omega} \ldots \times \\ \times \int\limits_{\Omega} d\omega_1 d\omega_2 \ldots d\omega_{n_1} d\omega_{n_1+1} d\omega_{n_1+2} \ldots d\omega_{n_2} \ldots \times \\ \times d\omega_{n_{N-1}+1} d\omega_{n_{N-1}+2} \ldots d\omega_{n_N} \times \\ \times \varphi_1(\omega_1)\varphi_1(\omega_2)\ldots\varphi_1(\omega_{n_1})\varphi_2(\omega_{n_1+1}) \times \\ \times \varphi_2(\omega_{n_1+2})\ldots\varphi_2(\omega_{n_2})\ldots\varphi_N(\omega_{n_{N-1}+1}) \times \\ \times \varphi_N(\omega_{n_{N-1}+2})\ldots\varphi_N(\omega_{n_N}) \times \\ \times |\omega_1, \omega_2, \ldots \omega_{n_1}, \omega_{n_1+1}, \omega_{n_1+2}, \ldots \omega_{n_2}, \ldots \omega_{n_{N-1}+1}, \\ \omega_{n_{N-1}+2}, \ldots \omega_{n_N}\rangle. \quad (165)\end{aligned}$$

Максимальное количество информации, которое можно извлечь при измерениях квантового состояния, достигается, если ортогональные компоненты состояний с разными разбиениями числа фотонов M присутствуют с одинаковой вероятностью. С учетом сказанного в пользу подслушивателя считаем, что состояние в побочном канале, связанном с излучением аппаратуры, имеет вид

$$\begin{aligned}\rho^{0^\alpha,1^\alpha}_{GX,GY} = \sum_{M=0}^{\infty} P^{0^\alpha,1^\alpha}_{GX,GY} \frac{1}{N} \times \\ \times \sum_{\{n\}=n_1+n_2+\ldots=M} |\psi_{\{n\}}\rangle\langle\psi_{\{n\}}|, \quad (166)\end{aligned}$$

здесь $P^{0^\alpha,1^\alpha}_{GX,GY}$ — функция распределения по числу фотонов в побочном канале при генерации аппаратурой 0^α или 1^α в базисе α. Данные функции распределения, по сути, описывают распределение фотонов по спектру. Индексы «GX» и «GY» относятся к передающей и приемной аппаратуре соответственно.

Как будет видно ниже, полное число одночастичных ортогональных состояний N, имеющих спектр в частотной полосе Ω и максимально локализованных во временном окне T, в окончательный ответ для длины секретного ключа не входит. Длина ключа зависит лишь от функции распределения по числу фотонов $P^{0^\alpha,1^\alpha}_{GX,GY}$, последняя должна определяться экспериментально для каждой конкретной технической реализации системы.

13.3. Побочный канал — back flash однофотонных детекторов

При построении состояний в побочном канале, связанном с обратным переизлучением детекторов,

применима та же логика, что и в предыдущем разделе. Излучение детектируется подслушивателем в каждом временном такте посылки/регистрации состояний. Аналогично рассуждениям в предыдущем разделе, для квантовых состояний в этом побочном канале утечки информации получаем

$$\rho_D^{0^\alpha,1^\alpha} = \sum_{M=0}^{\infty} P_D^{0^\alpha,1^\alpha} \frac{1}{N} \times \\ \times \sum_{\{n\}=n_1+n_2+\ldots=M} |\psi_{\{n\}}\rangle\langle\psi_{\{n\}}|, \qquad (167)$$

$$N = \frac{(N+M-1)!}{(N-1)!M!}.$$

Индекс «D» обозначает побочный канал переизлучения детекторов. Здесь $P_D^{0^\alpha,1^\alpha}$ — функции распределения числа фотонов при переизлучении детекторов при регистрации 0^α и 1^α в базисах $\alpha = +, \times$. Вид функций распределения по числу фотонов должен определяться экспериментально для данного типа детекторов и конкретной реализации системы.

13.4. Матрицы плотности с учетом побочных каналов

При реализации Decoy State-метода используется модуляция интенсивности состояний при помощи модулятора интенсивности. Существуют реализации систем квантовой криптографии, в которых модуляция интенсивности проводится фазовым модулятором. Далее будем иметь в виду такую реализацию системы. Если модуляция интенсивности информационных состояний проводится модулятором интенсивности, то нужно добавить побочный канал утечки, связанный с модулятором интенсивности, что можно сделать методом, приведенным в работе [7].

Как отмечалось выше, секретный ключ формируется только из однофотонной компоненты состояний, достигающей приемной стороны. Информация, заключенная в многофотонных компонентах информационных состояний, в пользу подслушивателя считается ему известной.

Разумеется, что побочное излучение аппаратуры, зондирование фазового модулятора, измерение обратного переизлучения детекторов имеют место независимо от того, какая компонента информационных состояний приготавливается или регистрируется. Но поскольку информация многофотонных компонент и так считается известной подслушивателю, достаточно «подцепить» состояния в побочных каналах только к однофотонной компоненте информационных состояний.

Матрица плотности с учетом побочных каналов может быть записана в виде

$$\rho^\alpha_{XEG_XG_YPMD} = \Big\{ |0^\alpha\rangle_{XX}\langle 0^\alpha| \otimes \rho^{0^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{0^\alpha}_{PM} \otimes \\ \otimes \Big[\xi_{0^\alpha}(1-Q^\alpha)\rho^{0^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{0^\alpha}_{D} \otimes |\Phi_0\rangle_{EE}\langle\Phi_{0^\alpha}| + \\ + \xi_{1^\alpha} Q^\alpha \rho^{1^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{1^\alpha}_{D} \otimes |\Theta_{0^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Theta_{0^\alpha}| \Big] + \\ + |1\rangle_{XX}\langle 1| \otimes \rho^{1^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{1^\alpha}_{PM} \otimes \\ \otimes \Big[\xi_{1^\alpha}(1-Q^\alpha)\rho^{1^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{1^\alpha}_{D} \otimes |\Phi_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Phi_{1^\alpha}| + \\ + \xi_{0^\alpha} Q^\alpha \rho^{0^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{0^\alpha}_{D} \otimes |\Theta_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Theta_{1^\alpha}| \Big] \Big\}. \qquad (168)$$

Интерпретация (168) имеет простой смысл. Пусть аппаратура Алисы приготавливает состояние 0^α, это приводит к появлению квантового состояния $\rho^{0^\alpha}_{G_X}$ в побочном канале излучения аппаратуры Алисы. Кроме того, подслушиватель может активно зондировать состояние фазового модулятора, и это приводит к тому, что подслушиватель дополнительно имеет в своем распоряжении состояние $\rho^{0^\alpha}_{PM}$.

Далее, если на приемной стороне станции происходит стробирование детектора, например, 0 в базисе α, то это приводит к излучению аппаратуры, что описывается состоянием в побочном канале $\rho^{0^\alpha}_{G_Y}$. Правильное детектирование информационного состояния с вероятностью $(1-Q^\alpha)$ приводит к обратному переизлучению данного детектора в линию связи, которое дается состоянием $\rho^{0^\alpha}_{D}$.

Частичный след (168) по состояниям Алисы дает матрицу плотности Евы с учетом всех каналов утечки информации, находим

$$\rho^\alpha_{EG_XG_YPMD} = \Big\{ (1-Q^\alpha) \Big[\xi_{0^\alpha} \rho^{0^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{0^\alpha}_{PM} \otimes \\ \otimes \rho^{0^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{0^\alpha}_{D} \otimes |\Phi_{0^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Phi_{0^\alpha}| + \\ + \xi_{1^\alpha} \rho^{1^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{1^\alpha}_{PM} \otimes \rho^{1^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{1^\alpha}_{D} \otimes |\Phi_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Phi_{1^\alpha}| \Big] + \\ + Q^\alpha \Big[\xi_{1^\alpha} \rho^{0^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{0^\alpha}_{PM} \otimes \rho^{1^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{1^\alpha}_{D} \otimes |\Theta_{0^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Theta_{0^\alpha}| + \\ + \xi_{0^\alpha} \rho^{1^\alpha}_{G_X} \otimes \rho^{1^\alpha}_{PM} \otimes \rho^{0^\alpha}_{G_Y} \otimes \rho^{0^\alpha}_{D} \otimes \\ \otimes |\Theta_{1^\alpha}\rangle_{EE}\langle\Theta_{1^\alpha}| \Big] \Big\}. \qquad (169)$$

13.5. Собственные числа матриц плотности

Для вычисления сглаженной условной энтропии, фигурирующей в оценке для длины ключа, потре-

буются собственные числа матриц плотности Алисы–Евы и Евы (168), (169), находим две группы собственных чисел матрицы плотности $\rho^{\alpha}_{XEG_XG_YPMD}$:

$$[(1-Q^{\alpha})\xi_{0^{\alpha}}]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{GX}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{GY}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{D}}{N}\right],$$
$$[(1-Q^{\alpha})\xi_{1^{\alpha}}]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{GX}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{GY}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{D}}{N}\right], \quad (170)$$

$$[Q^{\alpha}\xi_{1^{\alpha}}]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{GX}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{GY}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{D}}{N}\right],$$
$$[Q^{\alpha}\xi_{0^{\alpha}}]\cdot\left[\frac{P^{1^{\alpha}}_{GX}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{GY}}{N}\right]\cdot\left[\frac{P^{0^{\alpha}}_{D}}{N}\right]. \quad (171)$$

Собственные числа матрицы плотности $\rho^{\alpha}_{EG_XG_YPMD}$ имеют вид

$$(1-Q^{\alpha})\frac{1}{N}\frac{1}{N}\frac{1}{N}\Lambda^{\pm}_{\Phi^{\alpha}}, \quad Q^{\alpha}\frac{1}{N}\frac{1}{N}\frac{1}{N}\Lambda^{\pm}_{\Theta^{\alpha}}, \quad (172)$$

где

$$\Lambda^{\pm}_{\Phi^{\alpha}}=\frac{1}{2}\left\{1\pm\sqrt{1-\frac{4(\mathcal{A}_{\Phi^{\alpha}}\mathcal{B}_{\Phi^{\alpha}}-\mathcal{E}^2_{\Phi^{\alpha}})}{1-\mathcal{E}^2_{\Phi^{\alpha}}}}\right\},$$
$$\Lambda^{\pm}_{\Theta^{\alpha}}=\frac{1}{2}\left\{1\pm\sqrt{1-\frac{4(\mathcal{A}_{\Theta^{\alpha}}\mathcal{B}_{\Theta^{\alpha}}-\mathcal{E}^2_{\Theta^{\alpha}})}{1-\mathcal{E}^2_{\Theta^{\alpha}}}}\right\}. \quad (173)$$

Как видно из (170)–(172), собственные числа являются N^3-кратно вырожденными. Далее,

$$\mathcal{A}_{\Phi^{\alpha}}=\xi_{0^{\alpha}}P^{0^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{0^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{0^{\alpha}}_{D}(M_D)+$$
$$+\xi_{1^{\alpha}}P^{1^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{1^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{1^{\alpha}}_{D}(M_D)\mathcal{E}^2_{\Phi^{\alpha}}, \quad (174)$$

$$\mathcal{B}_{\Phi^{\alpha}}=\xi_{0^{\alpha}}P^{0^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{0^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{0^{\alpha}}_{D}(M_D)\mathcal{E}^2_{\Phi^{\alpha}}+$$
$$+\xi_{1^{\alpha}}P^{1^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{1^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{1^{\alpha}}_{D}(M_D), \quad (175)$$

$$\mathcal{A}_{\Theta^{\alpha}}=\xi_{1^{\alpha}}P^{0^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{1^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{1^{\alpha}}_{D}(M_D)+$$
$$+\xi_{0^{\alpha}}P^{1^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{0^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{0^{\alpha}}_{D}(M_D)\mathcal{E}^2_{\Theta^{\alpha}}, \quad (176)$$

$$\mathcal{B}_{\Theta^{\alpha}}=\xi_{1^{\alpha}}P^{0^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{1^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{1^{\alpha}}_{D}(M_D)\mathcal{E}^2_{\Theta^{\alpha}}+$$
$$+\xi_{0^{\alpha}}P^{1^{\alpha}}_{GX}(M_{GX})P^{0^{\alpha}}_{GY}(M_{GY})P^{0^{\alpha}}_{D}(M_D), \quad (177)$$

переменные M_{GX}, M_{GY}, M_D отвечают за число фотонов в функциях распределения вероятностей в побочных каналах. Также введены обозначения

$$\mathcal{E}_{\Phi^{\alpha}}={}_{PM}\langle\psi_{0^{\alpha}}|\psi_{1^{\alpha}}\rangle_{PM}|\cdot|{}_{E}\langle\Phi_{0^{\alpha}}|\Phi_{1^{\alpha}}\rangle_{E}|, \quad (178)$$

$$\mathcal{E}_{\Theta^{\alpha}}={}_{PM}\langle\psi_{0^{\alpha}}|\psi_{1^{\alpha}}\rangle_{PM}|\cdot|{}_{E}\langle\Theta_{0^{\alpha}}|\Theta_{1^{\alpha}}\rangle_{E}|. \quad (179)$$

Величины в правой части (170)–(177) зависят от наблюдаемых параметров Q^{α} и скрытых для легитимных пользователей параметров — скалярных произведений (65)–(68) векторов состояний подслушивателя. Учет конечной длины передаваемых последовательностей сводится к тому, что в формулах (168), (169) вместо значений Q^{α} и при вычислении скалярных произведений в (65)–(68) нужно использовать оценки вероятности ошибок. Фактически нужно заменить Q^{α} на $(Q^{\alpha})^{+}$.

После подстановки соответствующих значений параметров, при вычислении длины секретного ключа необходимо сделать поиск минимума по одной переменной $x\in[0,1]$ (см. формулу (78)).

14. УСЛОВНАЯ СГЛАЖЕННАЯ ЭНТРОПИЯ ОДНОФОТОННОЙ КОМПОНЕНТЫ СОСТОЯНИЙ, ОЦЕНКА ДЛИНЫ СЕКРЕТНОГО КЛЮЧА

При вычислении условной энтропии с учетом побочных каналов утечки информации будем считать, что параметры, описывающие состояния в побочных каналах, известны подслушивателю точно. Консервативно в пользу подслушивателя можно считать, что подслушиватель может иметь точную копию аппаратуры, используемой Алисой и Бобом. Имея точную копию аппаратуры, подслушиватель не ограничен во времени, чтобы, проводя длительные измерения, точно определить параметры состояний в побочных каналах. Разумеется, в реальной ситуации у подслушивателя такой возможности нет, и параметры состояний в побочных каналах также подвержены флуктуациям за счет конечной длины последовательностей. Такие флуктуации также могут быть учтены способом, который использовался для оценки параметров выше. Для того чтобы не загромождать изложение излишними выкладками, будем считать, что параметры состояний в побочных каналах известны точно.

Вычисление условной сглаженной min-энтропии для однофотонной компоненты состояний после первого и второго усечений дает

$$H_{min}^{\varepsilon_{\Omega_1}+\varepsilon_{\Omega_2}}\left((\rho_{XE})^{\otimes n_\mu^\alpha}\,|\,(\rho_E)^{\otimes n_\mu^\alpha}\right)\geq$$
$$\geq n_\mu^\alpha\left\{h(\xi_0)+[H(P_{GX}^\alpha)+H(P_{GY}^\alpha)+H(P_D^\alpha)]-\right.$$
$$\left.-\left[(1-(Q_1^\alpha)^+)h(\Phi^\alpha)+(Q_1^\alpha)^+h(\Theta^\alpha)\right]\right\}-$$
$$-\,\mathrm{const}\sqrt{n_\mu^\alpha\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)},\quad(180)$$

где

$$H(P_{GX}^\alpha)=-\sum_M\Big[[\xi_0^\alpha(1-Q^\alpha)+\xi_1^\alpha Q^\alpha]P_{GX}^{0^\alpha}(M)\times$$
$$\times\log\left(P_{GX}^{0^\alpha}(M)\right)+[\xi_1^\alpha(1-Q^\alpha)+\xi_0^\alpha Q^\alpha]P_{GX}^{1^\alpha}(M)\times$$
$$\times\log\left(P_{GX}^{1^\alpha}(M)\right)\Big],\quad(181)$$

$$H(P_{GY,D}^\alpha)=$$
$$=-\sum_M\Big[\xi_0^\alpha P_{GY,D}^{0^\alpha}(M)\log\left(P_{GY,D}^{0^\alpha}(M)\right)+$$
$$+\,\xi_1^\alpha P_{GY,D}^{1^\alpha}(M)\log\left(P_{GY,D}^{1^\alpha}(M)\right)\Big].\quad(182)$$

Далее,

$$h(\Phi^\alpha)=-\sum_{M_{GX}}\sum_{M_{GY}}\sum_{M_D}\left[\Lambda_{\Phi^\alpha}^+\log\left(\Lambda_{\Phi^\alpha}^+\right)+\right.$$
$$\left.+\,\Lambda_{\Phi^\alpha}^-\log\left(\Lambda_{\Phi^\alpha}^-\right)\right],\quad(183)$$

$$h(\Theta^\alpha)=-\sum_{M_{GX}}\sum_{M_{GY}}\sum_{M_D}\left[\Lambda_{\Theta^\alpha}^+\log\left(\Lambda_{\Theta^\alpha}^+\right)+\right.$$
$$\left.+\,\Lambda_{\Theta^\alpha}^-\log\left(\Lambda_{\Theta^\alpha}^-\right)\right]\quad(184)$$

и в (180)–(184) используются оценки параметров из (140)–(143).

Для утечки информации при коррекции ошибок в шенноновском пределе получаем

$$\mathrm{leak}^\alpha\leq N_\mu^\alpha h((Q_\mu^{tot,\alpha})^+)+$$
$$+\,\mathrm{const}\sqrt{N_\mu^\alpha\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}.\quad(185)$$

Наконец, для оценки длины ε_Ω-секретного ключа в двух базисах получаем

$$\ell_\Sigma^{\varepsilon_\Omega}\geq\min_{x\in[0,1]}\left\{\sum_{\alpha=+,\times}H_{min}^{\varepsilon_{\Omega_1}+\varepsilon_{\Omega_2}}\left((\rho_{XE})^{\otimes n_\mu^\alpha}\,|\,(\rho_E)^{\otimes n_\mu^\alpha}\right)\right\}-\sum_{\alpha=+,\times}\left\{N_\mu^\alpha h((Q_\mu^{tot,\alpha})^+)-\mathrm{const}\sqrt{N_\mu^\alpha\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}\right\}-$$
$$-\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{corr}}\right)=n_\mu^\alpha\min_{x\in[0,1]}\left\{\sum_{\alpha=+,\times}\left\{h(\xi_0)+[H(P_{GX}^\alpha)+H(P_{GY}^\alpha)\;+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\;H(P_D^\alpha)]-\left[(1-(Q_1^\alpha)^+)h(\Phi^\alpha)+(Q_1^\alpha)^+h(\Theta^\alpha)\right]\right\}\right\}-\sum_{\alpha=+,\times}\left\{N_\mu^\alpha h((Q_\mu^{tot,\alpha})^+)-\mathrm{const}\sqrt{N_\mu^\alpha\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{\Omega_2}}\right)}\right\}-$$
$$-\log\left(\frac{1}{\varepsilon_{corr}}\right),\quad(186)$$

где N_μ^α — общее число зарегистрированных посылок в базисе α, n_μ^α — число однофотонных посылок в базисе α, $\varepsilon_{corr}=1/2^M$ — параметр корректности при исправлении ошибок, M — число раундов проверки по идентичности очищенных ключей. В формуле (186) считается, что проверка корректности ключей — равенства очищенных ключей Алисы и Боба после исправления ошибок проводится совместно в двух базисах.

Для иллюстрации разработанного метода приведем зависимости длины секретного ключа от длины линии связи с учетом всех факторов: неоднофотонности информационных состояний, различных квантовых эффективностей детекторов, побочных каналов утечки и конечной длины последовательности. Для того чтобы не загромождать изложение, примем в расчет только утечку информации при детектировании излучения передающей аппаратуры Алисы. Для примера будем считать, что побочное излучение подчиняется пуассоновской статистике по числу фотонов k, т. е. функция распределения при приготовлении 0 и 1 на передающей стороне имеет вид

$$P_{GX}^0(k)=e^{-M_0}\frac{M_0^k}{k!},\quad P_{GX}^1(k)=e^{-M_1}\frac{M_1^k}{k!}.\quad(187)$$

Для простоты считаем, что функции распределения в (187) не зависят от базиса.

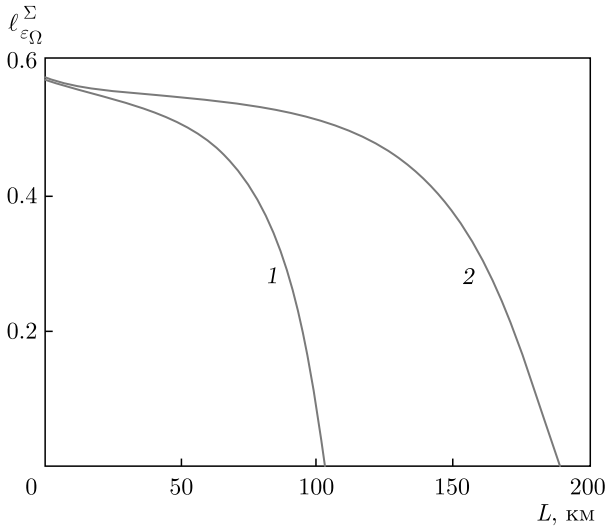


Рис. 6. Зависимости длины секретного ключа от длины линии связи. Параметры для кривых (общие): квантовые эффективности детекторов $\xi_0 = \xi_1$ ($\eta_0 = \eta_1 = 0.15$), среднее число в информационных состояниях $\mu = 0.5$, в состояниях ловушках $\nu_1 = 0.32$, $\nu_2 = 0$, вероятность темновых шумов для обоих детекторов $p_d = 10^{-6}$ отсч./строб. Для кривой *1* оценка параметров по наблюдаемым проводилась с помощью однородной оценки (134), для кривой *2* — с помощью неоднородной оценки (136). Длина последовательности n, используемой для оценок параметров, $n = 10^{10}$ (*1*), 10^6 (*2*), параметры секретности $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-9}$ общие для обеих кривых. Среднее число фотонов в состояниях (см. формулу (187)) в побочном канале выбрано равным $M_0 = M_1 = 0.2$

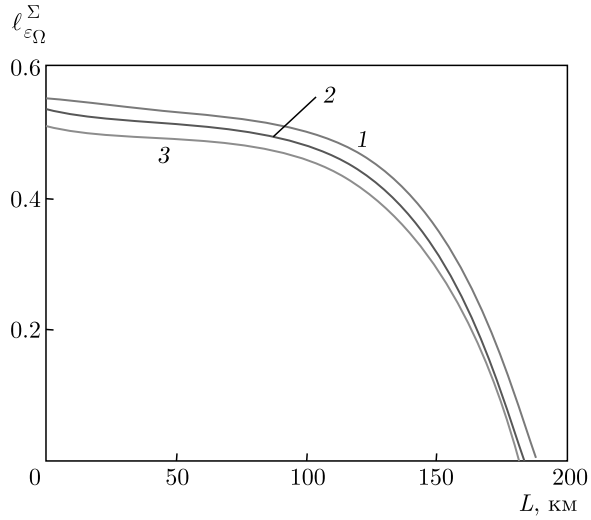


Рис. 7. Зависимости длины секретного ключа от длины линии связи. Параметры для кривых: кривая *1* — квантовые эффективности детекторов $\eta_0 = \eta_1 = 0.15$, $M_0 = 0.2$, $M_1 = 0.4$; кривая *2* — $\eta_0 = 0.1$, $\eta_1 = 0.15$, $M_0 = 0.2$, $M_1 = 0.4$; кривая *3* — $\eta_0 = \eta_1 = 0.15$, $M_0 = 0.2$, $M_1 = 0.6$. Вероятность темновых шумов одинакова для двух детекторов $p_d = 10^{-6}$, $\mu = 0.5$, $\nu_1 = 0.32$, $\nu_2 = 0$. Удельные потери в волоконной линии 0.2 дБ/км. Длина последовательности при оценке вероятностей $n = 10^6$ для всех кривых, использовалась неоднородная оценка вероятностей (136). При вычислениях использовалась минимизация длины секретного ключа с учетом конечных последовательностей и побочных каналов утечки информации

Как видно из сравнения кривых *1* и *2* на рис. 6, дальность секретного распределения ключей существенно зависит от точности оценки истинных вероятностей. При однородной оценке вероятностей длина последовательности n, по которой проводится оценка, на несколько порядков превосходит длину последовательности при неоднородной оценке.

Строго говоря, при оценке вероятностей по наблюдаемым частотам отсчетов требуется однородная оценка, однако на практике почти все системы используют нестрогую неоднородную оценку вероятностей.

На рис. 7 приведены зависимости длины секретного ключа от длины линии связи. Минимизация длины секретного ключа проводилась с использованием неоднородной оценки вероятностей по наблюдаемым частотам. При среднем числе фотонов в побочном канале, связанным с излучением передающей аппаратуры, не превышающем нескольких десятых, влияние утечки по данному каналу на длину секретного ключа является несущественным. Исходя из этого, можно получить степень экранирования аппаратуры, при которой гарантируется такой уровень интенсивности побочного излучения. Кроме того, при длинах последовательностей $n \approx 10^6$, используемых для оценки вероятностей, длина секретного ключа практически выходит на асимптотическую зависимость ($n \to \infty$). Различие квантовых эффективностей детекторов на 10–15 % также не является критичным для длины секретного ключа.

15. ПРЕДЕЛЬНЫЕ СЛУЧАИ

Интересно рассмотреть некоторые предельные случаи, которые позволят оценить характерные величины параметров состояний в побочных каналах, при которых еще возможно секретное распределение ключей. Такие оценки необходимы при экспериментальной реализации систем, например, они позволяют оценить требуемые потери в оптических изоляторах, ограничивающих мощность выходного зондирующего излучения.

15.1. Зондирование фазового модулятора Алисы

Первый пример — активное зондирование фазового модулятора. Пусть выходное зондирующее излучение представляет собой когерентное состояние. Кодирование битов ключа происходит приложением импульсов напряжения на фазовый модулятор. При приложении напряжения на фазовый модулятор происходит изменение фазы отраженного зондирующего состояния. В пользу подслушивателя будем считать, что фаза зондирующего когерентного состояния при двух состояниях фазового модулятора, отвечающих кодированию 0 и 1, изменяется на максимально возможную величину π, что соответствует максимальной различимости отраженных состояний.

В целях иллюстрации считаем, что отраженные состояния, отвечающие 0 и 1, одинаковы в разных базисах. В этом случае подслушиватель будет иметь в своем распоряжении одно из двух состояний (индекс базиса опускаем):

$$|\psi_0\rangle_{PM} = |\alpha_S\rangle_{PM}, \quad |\psi_1\rangle_{PM} = |-\alpha_S\rangle_{PM}, \quad \mu_S = |\alpha_S|^2, \tag{188}$$

где μ_S — среднее число фотонов в отраженном зондирующем когерентном состоянии, индекс «S» отвечает за побочный канал утечки информации (Side Channel).

Матрица плотности с учетом зондирования только фазового модулятора Алисы имеет вид

$$\rho_{XPM} = \frac{1}{2}\left\{|0\rangle_X{}_X\langle 0| \otimes |\psi_0\rangle_{PM}{}_{PM}\langle\psi_0| + |1\rangle_X{}_X\langle 1| \otimes |\psi_1\rangle_{PM}{}_{PM}\langle\psi_1|\right\}, \tag{189}$$

соответственно, матрица плотности Евы имеет вид

$$\rho_{PM} = \frac{1}{2}\left\{|\psi_0\rangle_{PM}{}_{PM}\langle\psi_0| + |\psi_1\rangle_{PM}{}_{PM}\langle\psi_1|\right\}. \tag{190}$$

Условная энтропия, отнесенная к одной посылке, принимает вид

$$H(\rho_{XPM}|\rho_{PM}) = 1 - \chi(\mathcal{E}_{PM}), \tag{191}$$

где

$$\chi(\mathcal{E}_{PM}) = -\frac{1-\epsilon}{2}\log\left(\frac{1-\epsilon}{2}\right) - \frac{1+\epsilon}{2}\log\left(\frac{1+\epsilon}{2}\right) \tag{192}$$

— величина Холево для квантового ансамбля

$$\mathcal{E}_{PM} = \left\{\frac{1}{2}|\psi_0\rangle_{PM}, \frac{1}{2}|\psi_1\rangle_{PM}\right\}. \tag{193}$$

Максимально достижимая классическая информация (192) совпадает с пропускной способностью идеального классически-квантового канала связи с входными состояниями (193) и достигается на коллективных измерениях [31].

В (192) введено обозначение для перекрытия отраженных состояний:

$$\varepsilon = |_{PM}\langle\psi_0|\psi_1\rangle_{PM}| = |\langle\alpha_S| - \alpha_S\rangle| = e^{-2\mu_S}.$$

Оценка длины секретного ключа в пересчете на одну зарегистрированную посылку дает

$$\ell_{PM} = 1 - \chi(\mathcal{E}_{PM}). \tag{194}$$

Для выяснения критической мощности отраженного зондирующего состояниями от фазового модулятора приведем зависимости длины секретного ключа от среднего числа фотонов в отраженном когерентном состоянии (рис. 8*a*). Как следует из рис. 8*a*, при среднем числе фотонов $\mu_S \approx 1$ секретное распределение ключей оказывается уже невозможным, длина секретного ключа $\ell_{PM} \to 0$ без вторжений в квантовый канал связи. Таким образом, для обеспечения секретности ключа требуется уровень отраженного зондирующего излучения $\mu_S \ll 0.1$ фотона. Это достигается асимметричными оптическими изоляторами.

15.2. Регистрация back-flash-излучения детекторов

Рассмотрим предельный случай, когда подслушиватель измеряет только побочное back-flash-излучение лавинных детекторов. Для простоты будем считать, что обратное переизлучение не зависит от базиса.

Матрица плотности Алиса–Ева с учетом только переизлучения детекторов на приемной станции имеет вид

$$\rho_{XED} = \frac{1}{2}\left\{|0\rangle_X{}_X\langle 0| \otimes \rho_D^0 + |1\rangle_X{}_X\langle 1| \otimes \rho_D^1\right\}. \tag{195}$$

Частичная матрица плотности

$$\rho_{ED} = \frac{1}{2}\left\{\rho_D^0 + \rho_D^1\right\}. \tag{196}$$

Подслушиватель имеет дело с квантовым ансамблем

$$\mathcal{E}_D = \left\{\frac{1}{2}, \rho_D^0; \frac{1}{2}, \rho_D^1\right\}.$$

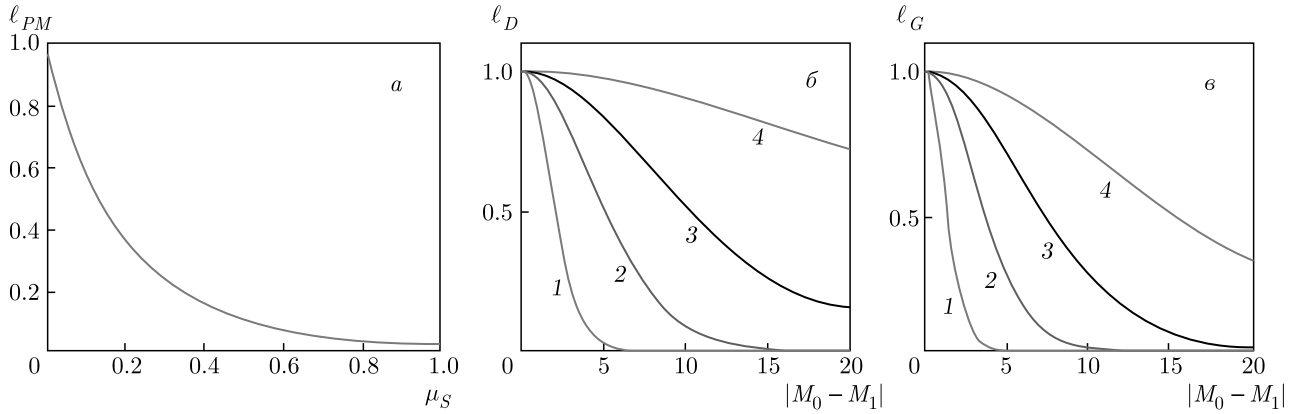


Рис. 8. Зависимости длины секретного ключа: *а*) от среднего числа фотонов μ_S в отраженном от фазового модулятора зондирующем излучении; *б*) от среднего числа фотонов при детектировании переизлучения детекторов на приемной стороне; *в*) от среднего числа фотонов при детектировании излучения передающей и приемной аппаратуры. Параметр $\sigma = 2$ (*1*), 5 (*2*), 10 (*3*), 20 (*4*). Дисперсии состояний в (204) для всех кривых рис. *б,в* выбраны одинаковыми при регистрации 0 и 1

Для подслушивателя возникает ситуация идеального квантово-классического канала побочного канала. Цель подслушивателя, имея в своем распоряжении квантовые состояния в побочном канале, ассоциированные с классическими значениями битов 0 и 1, узнать классические биты посредством измерений квантовых состояний, т. е. получить классическую информацию из квантовых состояний. Максимум классической информации, которую можно получить из квантового ансамбля $\mathcal{E}_D$, дается фундаментальной величиной Холево [31–33]. Для информации Холево (см. [33]) получаем

$$\chi(\mathcal{E}_D) = H\left(\overline{\rho_D}\right) - \frac{1}{2}H(\rho_D^0) - \frac{1}{2}H(\rho_D^1), \qquad (197)$$

где матрицы плотности берутся из (195), (196),

$$\overline{\rho_D} = \frac{\rho_D^0 + \rho_D^1}{2}. \qquad (198)$$

Вычисляя энтропии в (197), получаем

$$H\left(\overline{\rho_D}\right) = -\sum_{M=0}^{\infty} \frac{P_D^0(M) + P_D^1(M)}{2} \times \\ \times \log\left(\frac{P_D^0(M) + P_D^1(M)}{2}\right) - \log\left(\frac{1}{N}\right), \qquad (199)$$

$$H(\rho_D^{0,1}) = -\sum_{M=0}^{\infty} P_D^{0,1}(M)\log(P_D^{0,1}(M)) - \\ - \log\left(\frac{1}{N}\right). \qquad (200)$$

Учитывая, что

$$H(\rho_{XED}|\rho_{ED}) = 1 - \chi(\mathcal{E}_D), \qquad (201)$$

окончательно для величины Холево получаем

$$\chi(\mathcal{E}_D) = \frac{1}{2}\sum_{M=0}^{\infty}\left\{P_D^0(M)\log\left(\frac{2P_D^0(M)}{P_D^0(M)+P_D^1(M)}\right) + \\ + P_D^1(M)\log\left(\frac{2P_D^1(M)}{P_D^0(M)+P_D^1(M)}\right)\right\}, \qquad (202)$$

здесь $P_D^0(M)$, $P_D^1(M)$ — функции распределения числа фотонов обратного переизлучения лавинных детекторов при регистрации соответственно 0 и 1.

Напомним, что подслушиватель при детектировании обратного побочного переизлучения детекторов в линию связи не производит ошибок на приемной стороне, leak = 0.

Для оценки длины секретного ключа находим

$$\ell_D = 1 - \chi(\mathcal{E}_D). \qquad (203)$$

Отметим, что число состояний, локализованных во временном окне T каждого такта посылки информационных состояний N (слагаемое $\log(1/N)$ в (199), (200)), при вычислении условной энтропии сокращается. На рис. 8*б* представлены зависимости длины секретного ключа, если подслушиватель измеряет переизлучение лавинных детекторов. Для иллюстрации считаем, что распределение по числу фотонов при регистрации детектором 0 и 1 имеет гауссовский вид:

$$P_D^0(M) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{(M-M_0)^2}{2\sigma_0^2}\right),$$
$$P_D^1(M) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left(-\frac{(M-M_1)^2}{2\sigma_1^2}\right). \quad (204)$$

Различимость состояний ρ_D^0 и ρ_D^1 в побочном канале зависит от среднего числа фотонов $M_{0,1}$ и дисперсий $\sigma_{0,1}$, определяющих перекрытие состояний. На рис. 8*б* приведены зависимости длины секретного ключа при различных средних числах фотонов и перекрытиях состояний.

Как следует из рис. 8*б*, даже при достаточно большом среднем числе фотонов в переизлученном состоянии при перекрытии (дисперсии) состояний, различимость состояний оказывается малой. Как показывает опыт, если характеристики спектра переизлучения лавинных детекторов из одной серии мало отличаются друг от друга, то данный побочный канал не является столь критичным.

15.3. Детектирование побочного излучения от передающей и приемной аппаратуры

Рассмотрим последний частный пример, когда подслушиватель может одновременно детектировать побочное излучение аппаратуры Алисы и Боба.

Матрица плотности только с учетом побочного излучения от аппаратуры Алисы и Боба имеет вид (считаем для простоты, что излучение не зависит от базиса, поэтому индекс базиса опускаем)

$$\rho_{XEG_XG_Y} = \frac{1}{2}\left\{|0\rangle_X{}_X\langle 0| \otimes \rho_{G_X}^0 \otimes \rho_{G_Y}^0 + \right.$$
$$\left. + |1\rangle_X{}_X\langle 1| \otimes \rho_{G_X}^1 \otimes \rho_{G_Y}^1\right\}. \quad (205)$$

Частичная матрица плотности Евы

$$\rho_{EG_XG_Y} = \frac{1}{2}\left\{\rho_{G_X}^0 \otimes \rho_{G_Y}^0 + \rho_{G_X}^1 \otimes \rho_{G_Y}^1\right\}. \quad (206)$$

Для оценки длины секретного ключа получаем

$$\ell_G = H(\rho_{XG_XG_Y}) - H(\rho_{G_XG_Y}) = 1 - \chi(\mathcal{E}_G), \quad (207)$$

$$\chi(\mathcal{E}_G) = H(\overline{\rho}_{XG_XG_Y}) - $$
$$- \frac{1}{2}\left[H(\rho_{G_X}^0 \otimes \rho_{G_Y}^0) + H(\rho_{G_X}^1 \otimes \rho_{G_Y}^1)\right], \quad (208)$$

где величина Холево для ансамбля $\mathcal{E}_G$

$$\overline{\rho}_{G_XG_Y} = \frac{1}{2}\left\{\rho_{G_X}^0 \otimes \rho_{G_Y}^0 + \rho_{G_X}^1 \otimes \rho_{G_Y}^1\right\}. \quad (209)$$

Вычисление энтропий дает

$$\chi(\mathcal{E}_G) = -\sum_{M_x=0}^{\infty}\sum_{M_y=0}^{\infty} \frac{P_{G_X}^0(M_x)P_{G_Y}^0(M_y) + P_{G_X}^1(M_x)P_{G_Y}^1(M_y)}{2} \times$$
$$\times \log\left(\frac{P_{G_X}^0(M_x)P_{G_Y}^0(M_y) + P_{G_X}^1(M_x)P_{G_Y}^1(M_y)}{2}\right) + \frac{1}{2}\sum_{M=0}^{N}\left[\left(P_{G_X}^0(M)\log(P_{G_X}^0(M)) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + P_{G_X}^1(M)\log(P_{G_X}^1(M))\right) + \left(P_{G_Y}^0(M)\log(P_{G_Y}^0(M)) + P_{G_Y}^1(M)\log(P_{G_Y}^1(M))\right)\right]. \quad (210)$$

Для длины ключа получаем (напомним, что подслушиватель в этом случае не производит ошибок, leak = 0)

$$\ell_G = 1 - \chi(\mathcal{E}_G). \quad (211)$$

Максимум величины (210) достигается на совместных коллективных измерениях побочного излучения передающей и приемной аппаратуры, что находится за пределами современных технологий. Однако знание данной границы является принципиально важным для понимания, поскольку данная граница является фундаментальной верхней границей информации, которую позволяет получить Природа при измерении квантовых состояний в побочном канале утечки информации.

На рис. 8*в* для иллюстрации приведены результаты расчетов длины секретного ключа (211) при совместных коллективных измерениях побочного излучения передающей и приемной аппаратуры. Функции распределения по числу фотонов (210) выбраны гауссовскими, аналогично (204). Как видно из сравнения рис. 8*б* и 8*в*, появление еще одного побочного канала уменьшает длину секретного ключа. Длина ключа зависит от среднего числа фотонов в состояниях, отвечающих приготовлению и регистрации 0 и 1, и дисперсии состояний. Длина ключа обращается в нуль, когда среднее число фотонов и дисперсия оказываются одного порядка величины. В отсутствие других каналов утечки данный факт интуитивно понятен. Однако в общем случае, когда имеется несколько побочных каналов утечки, а так-

же вторжение в квантовый канал, и подслушиватель использует совместные коллективные измерения во всех каналах, ситуация не столь очевидна.

16. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Резюмируем полученные результаты. Разработан метод, который позволяет учесть конструктивным образом все неидеальности реальных систем квантовой криптографии: нестрогую однофотонность информационных состояний, неидеальную и разную квантовую эффективность детекторов, различные побочные каналы утечки информации и конечные передаваемые последовательности.

Результат, который получен в работе, в отличие от многочисленных работ, где рассматривались отдельные разрозненные каналы утечки информации, состоит в том, что с использованием предложенного метода дано доказательство секретности ключей, которое позволяет определить максимально возможную длину секретного ключа при заданных экспериментально наблюдаемых на приемной стороне величинах, а также состояниях в побочных каналах утечки информации. Определение максимально возможной длины секретного ключа проводится минимизацией всего лишь по одному параметру, при этом совместно учитываются все каналы утечки информации.

В заключение во избежание недоразумений отметим следующее. Не нужно думать, что учет побочных каналов утечки информации переводит системы квантовой криптографии из разряда криптографических систем, где секретность ключей гарантируется фундаментальными законами квантовой механики, в разряд систем, где секретность гарантируется техническими ограничениями. Даже при наличии побочных каналов утечки информации секретность ключей по-прежнему гарантируется фундаментальными ограничениями квантовой механики на различимость состояний.

Среднее число фотонов в информационных квазиоднофотонных состояниях, выходящих из передающей станции, также достигается техническими средствами — ослаблением до нужного уровня исходного сигнала. При заданном уровне сигналов их максимально допустимая различимость диктуется квантовой механикой. Точно так же и для состояний в побочных каналах. Верхняя граница интенсивности состояний в побочных каналах достигается техническими средствами при реализации системы — экранированием аппаратуры, использованием асимметричных оптических изоляторов и т. д. При известной верхней границе интенсивности состояний существует фундаментальная верхняя граница информации, которая может быть получена при самых общих измерениях над квантовым ансамблем состояний в побочных каналах. Как было видно из рассмотрения предельных случаев детектирования только побочного излучения, данная фундаментальная граница является границей Холево [31–33].

Благодарности. Выражаем благодарность коллегам по Академии криптографии Российской Федерации за обсуждения и поддержку, а также И. М. Арбекову и С. П. Кулику за многочисленные интересные обсуждения и замечания, позволившие улучшить изложение.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. H. Bennett and G. Brassard, in *Proc. IEEE Int. Conf. on Comp., Sys. and Signal Process.*, Bangalore, India (1984), pp. 175–179.

2. P. Smulders, Computers & Security **9**, 53 (1990).

3. M. G. Kuhn, Technical Report, Cambridge Univ., UCAM-CL-TR-577, ISSN 1476-2986, Number 577 (2003).

4. R. Renner, PhD thesis, ETH Zürich (2005); arXiv/quant-ph:0512258.

5. M. Tomamichel, Ch. Ci Wen Lim, N. Gisin, and R. Renner, arXiv:1103.4130 v2; Nature Commun. **3**, 1 (2012).

6. C.-H. F. Fung, K. Tamaki, B. Qi, H.-K.Lo, and X. Ma, Quant. Inf. Comput. **9**, 131 (2009).

7. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **157**, 963 (2020).

8. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **158**, 1011 (2020).

9. H. P. Yuen, Phys. Rev. A **82**, 062304 (2010); H. P. Yuen, arXiv:1109.1051 [quant-ph]; H. P. Yuen, arXiv:1109.2675 [quant-ph]; H. P. Yuen, arXiv:1109.1066 [quant-ph].

10. R. Renner, arXiv:1209.2423 [quant-ph].

11. И. М. Арбеков, С. Н. Молотков, ЖЭТФ **152**, 62 (2017).

12. J. L. Carter and M. N. Wegman, J. Comp. System Sci. **18**, 143 (1979).

13. K. Kraus, *States, Effects and Operations*: *Fundamental Notions of Quantum Theory*, Springer Verlag (1983).

14. W. F. Stinespring, *Proc. Amer. Math. Soc.* (1955), pp. 211–216.

15. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **153**, 895 (2018).

16. S. N. Molotkov, Laser Phys. Lett. **18**, 045202 (2021).

17. P. Shor and J. Preskill, Phys. Rev. Lett. **85**, 441 (2000).

18. S. Bouceron, G. Lugosi, and P. Massart, *Concentration Inequalities. A Nonasymptotic Theory of Independence*, Clarendon Press, Oxford (2012).

19. Won-Young Hwang, arXiv[quant-ph]:0211153.

20. Xiang-Bin Wang, Phys. Rev. Lett. **94**, 230503 (2005).

21. Hoi-Kwong Lo, Xiongfeng Ma, and Kai Chen, Phys. Rev. Lett. **94**, 230504 (2005).

22. Xiongfeng Ma, Bing Qi, Yi Zhao, and Hoi-Kwong Lo, arXiv[quant-ph]:0503005.

23. K. Tamaki, M. Curty, and M. Lucamarini, New J. Phys. **18**, 065008 (2016).

24. M. Pereira, M. Curty, and K. Tamaki, Nature Parther Journals, Quant. Inf. **62**, 1 (2019).

25. W. Wang, K. Tamaki, and M. Curty, New J. Phys. **20**, 083027 (2018).

26. R. M. Wood, *Laser-Induced Damage of Optical Materials*, Taylor & Francis (2003).

27. H. J. Landau and H. O. Pollak, Bell Syst. Techn. J. **40**, 65 (1961).

28. D. Slepian and H. O. Pollak, Bell Syst. Techn. J. **40**, 43 (1961).

29. W. H. J. Fuchs, J. Math. Anal. Appl. **9**, 317 (1964).

30. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, т. V, ч. I, Наука, Москва (1995).

31. A. S. Holevo, Probl. Inf. Transm. **9**, 177 (1973).

32. А. С. Холево, УМН **53**, 193 (1998).

33. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦНМО, Москва (2010).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 366–371 © 2021

GAMMA-RAYS AND NEUTRINOS FROM PROTON–PROTON INTERACTIONS IN GAMMA-RAY BURSTS

A. Neronov [a,b*], ***Y. Gatelet*** [a]

[a] *APC, University of Paris, CNRS/IN2P3, CEA/IRFU 75205, Paris, France*

[b] *Astronomy Department, University of Geneva CH-1290, Versoix, Switzerland*

Received November 9, 2020,
revised version December 18, 2020.
Accepted for publication December 21, 2020

DOI: 10.31857/S0044451021090030

Expansion of relativistic outflows of gamma-ray bursts (GRB) into medium created by the winds or their progenitor stars is accompanied by interactions of picked-up protons with the medium. These interactions produce neutrinos and γ-rays with energies in the TeV–PeV range. We study if such neutrinos and γ-rays are detectable with neutrino and γ-ray telescopes. We find that neutrino signal can be detectable with IceCube-Gen2 type telescope(s) if the GRB progenitor has been a low-metallicity star with initial mass (40–100)$M_\odot$, or if the progenitor system has been a binary with dense circumstellar environment ($\sim 10^{13}$ cm^{-3}) within the binary system extent. γ-ray emission from pion decays is detectable only in the afterglow phase, because of the pair production opacity of the prompt emission. This emission can contribute to the TeV afterglow flux of GRBs. Detection of the pion decay γ-ray and neutrino emission can serve as a diagnostic of the GRB progenitor evolution during the last years of its life.

Before the gravitational collapse, massive stars experience significant wind-like and explosive mass loss [1]. These stars are perhaps progenitors of long gamma-ray bursts (GRB) [2–4]. GRB relativistic outflow might propagate through matter-rich circumstellar environment created by the stellar wind and interact with this environment [5].

Recent detection of very-high-energy (VHE) γ-ray emission from GRB 180720B [6, 7] and GRB 190114C [8,9] afterglows might potentially carry such signatures. The VHE γ-ray flux can hardly be attributed to the synchrotron emission that presumably forms the bulk of the GRB prompt and afterglow flux [3, 4, 10, 11], because the synchrotron spectrum can hardly extend into the VHE band. Alternatively, the inverse Compton emission [9, 12, 13] produced by electrons with extremely high Lorentz factors possibly accelerated at the forward shock of the GRB outflow is also not directly sensitive to the matter content of the medium through which the GRB outflow propagates.

It is also possible that in exceptional VHE-γ-ray-bright GRBs part of the γ-ray emission is produced by high energy proton interactions. Such emission is also not directly sensitive to the circumstellar environment if proton interact with radiation field through photo-pion production, as suggested in a range of hadronic models of GRBs [14]. To the contrary, proton–proton interactions are directly sensitive to the density of the circumstellar medium.

Proton–proton interactions are conventionally not considered in the GRB afterglow physics because of the assumption of collisionless propagation of the GRB outflow through external medium. However, Refs. [15–18] show that even if particle collisions do not affect the dynamics of the GRB outflow and particle acceleration processes, proton interactions still generate secondary particles taking small fraction of the blast wave energy. If the progenitor stellar system of the GRB has produced strong wind or evolved as a binary system just before the explosion, signatures of the *pp* interactions could be present in the GRB prompt-emission and/or afterglow spectral and timing properties. In what fol-

* E-mail: andrii.neronov@gmail.com

lows we explore these signatures. We show that γ-ray and neutrino emission from pp interactions can reach detectable levels and provide a diagnostic of the presence of dense wind environment around the collapsed star generated by the mass loss prior to the collapse or by interactions with a companion star in a binary system.

The density of the circumstellar medium at the distance r is determined by the mass loss rate at the time

$$t_w = \frac{r}{v_w} \simeq 10 \left[\frac{v_w}{300\ \mathrm{km/s}}\right]^{-1} \left[\frac{r}{10^{16}\ \mathrm{cm}}\right]\ \mathrm{yr} \qquad (1)$$

before the collapse, where v_w is the wind velocity, cf. Refs. [19–23]. Emission from GRB outflow propagating at the distances $\sim 10^{16}$ cm from the collapsed star can potentially probe the history of mass ejection over the last decade of the progenitor star life.

GRB outflow expanding into the circumstellar medium initially goes through the "coasting" stage. During this stage, even if the GRB outflow is not initially loaded with protons, it starts to pick up and accelerate protons from the wind. The amount of material picked up after expansion to the distance r is

$$N(r) = \Omega \int\limits_{R_*}^{r} n(r') r'^2 dr' = \frac{n_0 \Omega R_*^{\gamma} r^{3-\gamma}}{3-\gamma}, \qquad (2)$$

where n_0 is the central wind density, $R_* \sim 10^{12}$ cm and $\gamma \approx 2$ are the characteristic scale and the power-law exponent of the density profile. In the reference frame of the outflow, protons from the medium arrive all from radial direction with energy $E' = \Gamma_0 m_p$ where Γ_0 is the initial bulk Lorentz factor of the outflow. The picked up particles initially form a nearly monoenergetic isotropic distribution sharply peaked at the energy E'. Shock acceleration process may produce protons with still higher energies, so that the spectrum of protons may extend as a powerlaw above the energy E'. A conventional assumption is that the acceleration process results in a powerlaw spectrum $f'(E') \propto (E')^{-p}$, $p \simeq 2$ for $E' > \Gamma_0 m_p$. Uncertainties in the physics of relativistic shock acceleration yield large scatter of possible spectral slopes deviating from $p = 2$ [24].

If most of the kinetic energy of the picked up material is contained in particles with energies $E' \sim \Gamma_0 m_p$ in the comoving frame, the energy distribution of protons in the collapsar frame is peaked at the energy $E \sim \Gamma_0^2 m_p$. The total kinetic energy of the outflow grows as [25] $\mathcal{E}(r) \sim \Gamma_0^2 m_p N$. The total energy of the picked up protons gradually gets comparable to the total energy release of the GRB, $\mathcal{E}_0$. The upper limit on this energy is set by the overall energy liberated in the gravitational collapse, estimated as the gravitational binding energy of material forming the black hole confined to its horizon $R_{bh} \sim G_N M_{bh}/c^2$:

$$E_{grav} \sim G_N M_{bh}^2 / R_{bh} = M_{bh} c^2 \sim 10 M_{\odot} c^2 \sim 2{\cdot}10^{55}\ \mathrm{erg}.$$

As soon as the kinetic energy of the picked up material becomes comparable to the energy of the outflow, it starts to decelerate.

The "coasting" phase of the GRB outflow continues up to the distance r_0 at which $\mathcal{E}(r_0) \sim \mathcal{E}_0$:

$$r_0 = \left(\frac{(3-\gamma)\mathcal{E}_0}{\Gamma_0^2 m_p n_0 \Omega R_*^{\gamma}}\right)^{1/(3-\gamma)}. \qquad (3)$$

The signal from within this distance is expected to arrive within the time interval

$$t_0 \sim \frac{r_0}{2\Gamma_0^2} \qquad (4)$$

from the GRB start, possibly by the end of the prompt emission phase of the GRB. During the subsequent deceleration stage the outflow dynamics follows the Blandford–McKee solution [25] for an adiabatic relativistic blast wave. The bulk Lorentz factor of the blast wave decreases with distance r and new particles picked up by the outflow gain energy $\Gamma(r)^2 m_p$. The particles which were initially picked up still might retain their energy $\sim \Gamma_0 m_p$ in the comoving frame, but in the collapsar frame their energy decreases down to maximum $E_r \sim \Gamma\Gamma_0 m_p$ (as could be found from the Lorentz transformation between the collapsar and comoving frames).

As a result, there is a specific spectrum of protons which establishes in the comoving frame in the absence of additional shock acceleration. Most of the energy distributed among the freshly picked up particles so that $\mathcal{E}_0 \simeq \Gamma^2 m_p N = \Gamma^2 m_p n_0 R_*^2 r$ for $\Gamma \ll \Gamma_0$. The distance dependence of the gamma-factor can be converted into time dependence for the observer's time t using a relation $r(t)$ found from $dr = 2\Gamma^2 dt$ which gives $r = 2\Gamma^2\left((4-\gamma)t - t_0\right)$ so that

$$\Gamma = \left(\frac{(3-\gamma)\mathcal{E}_0}{2^{3-\gamma} m_p n_0 R_*^{\gamma} \Omega \left[(4-\gamma)t - t_0\right]^{3-\gamma}}\right)^{1/(2(4-\gamma))} \qquad (5)$$

scales at $t^{-1/4}$ in the case $\gamma = 2$.

The picked up protons carry the energy of the GRB outflow. They dissipate a part of this energy in pp interactions. The energy output from these interactions is

$$\frac{d\mathcal{E}_{pp}}{dr} = \kappa\sigma_{pp} n \begin{cases} \Gamma_0^2 m_p N, & r < r_0, \\ \mathcal{E}_0, & r > r_0, \end{cases} \quad (6)$$

where $\sigma_{pp} \simeq 5 \cdot 10^{-26}$ cm^2 is the cross-section of pp interactions and $\kappa \simeq 0.5$ is the average inelasticity of pp collisions [26, 27].

We obtain the luminosity of

$$\mathcal{L}_{pp} = 2\kappa\Gamma^2\sigma_{pp} n \mathcal{E}_0 = \\ = 2 \cdot 10^{48} \left[\frac{\Omega}{0.1}\right]^{1/2} \left[\frac{t}{7\ \mathrm{s}}\right]^{-3/2} \left[\frac{\mathcal{E}_0}{10^{54}\ \mathrm{erg/s}}\right]^{1/2} \times \\ \times \left[\frac{n_0}{10^{13}\ \mathrm{cm}^{-3}}\right]^{3/2} \left[\frac{R_*}{10^{12}\ \mathrm{cm}}\right]^3 \frac{\mathrm{erg}}{\mathrm{s}}. \quad (7)$$

The flux decreases as $t^{3/(4-\gamma)}$ at late times. If $\gamma = 2$ (environment created by the wind with constant mass loss rate) then the flux decrease is $t^{-3/2}$.

If the radial density profile of the medium has a shallower slope, e.g. $\gamma = 1$, the overall time dependence of $\mathcal{L}_{pp}$ changes. The luminosity grows as $t^{3-2\gamma} = t$ during the coasting phase and decreases as $t^{-3/(4-\gamma)} = t^{-1}$ during the deceleration phase (see (7)). The shallower profile of the stellar wind density can be e. g. due to the decrease of the mass loss rate of the progenitor star over the last 10 years before the gravitational collapse.

The luminosity $\mathcal{L}_{pp}$ deposited by the proton–proton interactions into neutrinos and electromagnetic channel is detectable by neutrino and gamma-ray telescopes. Most of the neutrino and γ-ray flux is initially concentrated in a decade-wide energy range at the energy $\lesssim 10\,\%$ of the proton energy [28], i. e. at

$$E_{\gamma,\nu} \lesssim 0.1\Gamma_0^2 m_p \simeq 4 \left[\frac{\Gamma_0}{200}\right]^2 \ \mathrm{TeV} \quad (8)$$

if there is no significant acceleration of protons.

Otherwise, if the shock acceleration process is efficient, the spectrum extends to higher energies as a powerlaw with the slope nearly identical to that of the accelerated proton spectrum.

The number of neutrino events per GRB in a detector of volume V is

$$N_\nu \simeq 10^{-2} \left[\frac{A}{10^{37}\ \mathrm{cm}^{-1}}\right]^2 \left[\frac{D}{1\ \mathrm{Gpc}}\right]^{-2} \left[\frac{V_{det}}{1\ \mathrm{km}^3}\right]$$

for a GRB at the distance D, where $A = n_0 R_*^2$. This estimate shows that only exceptional GRBs occurring in dense extended circumstellar environment might yield $N_\nu \sim 1$ neutrino event statistics in neutrino detectors like IceCube, Baikal-GVD, or Km3NET. This might be the case e. g. for GRBs occurring in binary stellar systems, with density $n_0 \sim 10^{13}$ cm^{-3} across large region of the size about the binary separation distance, $R_* \sim 3 \cdot 10^{12}$ cm can yield $N_\nu \sim 1$ neutrino signal. Otherwise, the dense circumstellar environment can also be found around low-metallicity progenitor stars in the mass range $40M_\odot - 100M_\odot$ for which the central wind densities can exceed $3 \cdot 10^{14}$ cm^{-3} [21].

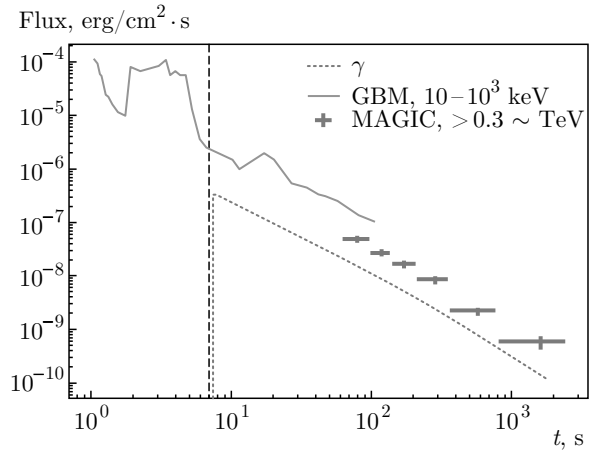


Fig. 1. (Color online) Fermi/GBM (grey solid line) and MAGIC (blue data points) lightcurves of GRB 190114C. Vertical dashed line marks the suggested time scale t_0 given by Eq. (4). Dotted blue line shows possible 0.3–1 TeV γ-ray flux for the reference π^0 decay model of GRB outflow propagating through the wind environment

Pion decay γ-rays which are initially produced in the same energy band as neutrinos do not escape from the source because of the pair production opacity of the GRB outflow, cf. Ref. [29–31]. TeV photons from pp interactions produced in the prompt emission zone are immediately converted into e^+e^- pairs which contribute to the pair loading of the GRB outflow and ultimately contribute to the prompt flux in the energy range in which the pair production optical depth is $\tau_{\gamma\gamma} \lesssim 1$.

γ-rays produced in pp interactions during the deceleration phase of the GRB outflow lag behind the region occupied by the pulse of the prompt emission. Thus, they never interact with the prompt emission photons. During the deceleration phase the luminosity L_ϵ drops by several orders of magnitude, as illustrated by GRB 190114C (Fig. 1). This makes the GRB outflow transparent to the VHE γ-rays. If the luminosity L_ϵ decreases as $L_\epsilon = L_{\epsilon,0}(t/t_0)^{-\delta}$ during the afterglow phase, the optical depth scales as

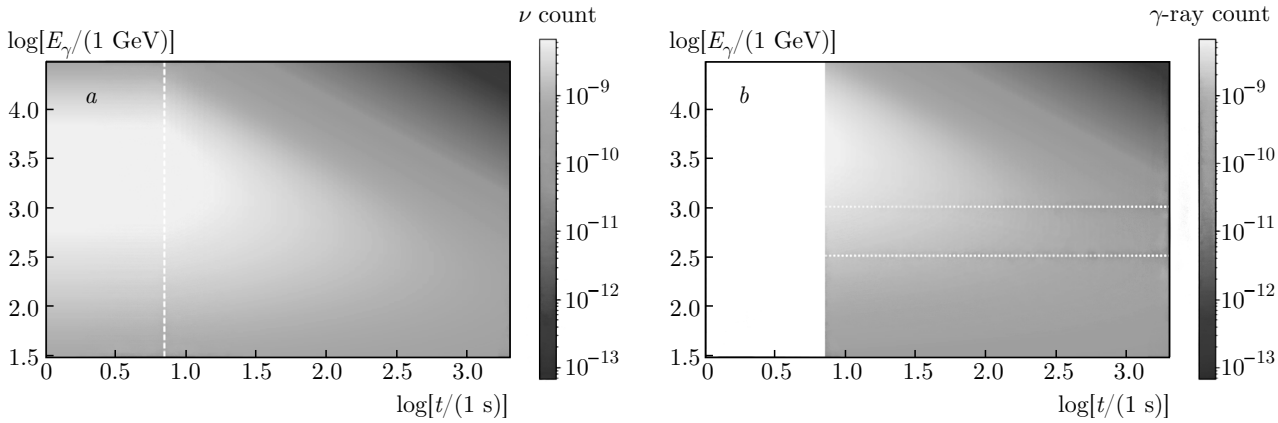


Fig. 2. (Color online) Spectral evolution of neutrino (a) and γ-ray (b) emission from pp interactions. Y axes show the neutrino or photon energy, X axis is time. Color shows the spectral energy density. White vertical line marks the end of the coasting phase. White piece-wise straight lines show the evolution of the peak energy. White horizontal lines mark the energy range of MAGIC detection of GRB 190114C

$$\tau_{\gamma\gamma} \simeq 1 \left[\frac{L_{\epsilon,0}}{10^{51}\ \mathrm{erg/s}}\right] \left[\frac{E_\gamma}{300\ \mathrm{GeV}}\right] \times \times \left[\frac{\Gamma}{200}\right]^{-6} \left[\frac{t}{10\ \mathrm{s}}\right]^{-(1+\delta)} \quad (9)$$

and the outflow is transparent to the TeV γ-rays.

The requirement that opacity for TeV γ-rays decreases to $\tau_{\gamma\gamma} \lesssim 1$ by the time of Cherenkov telescope observations (say, at $t \sim 10^2$ s into the afterglow phase) imposes a restriction on the energy budget of the GRB propagating through relatively dense medium (or, equivalently, on the density of the medium for a GRB with a fixed energy budget) [30]. Re-interpreting the condition $\tau_{\gamma\gamma} \leq 1$ from Eq. (9) as a lower bound on $\Gamma_0 \geq \Gamma$,

$$\Gamma > 200 \left[\frac{L_\epsilon}{10^{51}\ \mathrm{erg/s}}\right]^{1/6} \left[\frac{t}{7\ \mathrm{s}}\right]^{-1/6}, \quad (10)$$

and using a measurement of t_0, one can use Eqs. (3), (4) to estimate a lower bound on the total energy of the outflow $\mathcal{E}_0$:

$$\mathcal{E}_0 = \frac{t_0^{3-\gamma}\Gamma_0^4 m_p n_0 \Omega R_*^2}{(3-\gamma)^{3-\gamma}} > 10^{54} \left[\frac{\Omega}{0.1}\right] \left[\frac{t_0}{7\ \mathrm{s}}\right]^{1/3} \times \times \left[\frac{n_0}{10^{13}\ \mathrm{cm}^{-3}}\right] \left[\frac{R_*}{10^{12}\ \mathrm{cm}}\right]^2 \times \times \left[\frac{L_\epsilon}{10^{51}\ \mathrm{erg/s}}\right]^{2/3} \mathrm{erg}, \quad (11)$$

where we have assumed $t \sim t_0$ for the time moment when $\tau_{\gamma\gamma} \sim 1$ (in general the two times are not necessarily equal).

Using the estimate $D \approx 2.4$ Gpc for the luminosity distance to the GRB190114C at $z = 0.4245$ as a reference, we find an estimate of the flux of the VHE γ-ray signal from the decelerating phase

$$\mathcal{F}_{pp} = \frac{\mathcal{L}_{pp}}{\Omega D^2} \simeq 10^{-8} \left[\frac{\Omega}{0.1}\right]^{-1/2} \times \times \left[\frac{t}{10^2\ \mathrm{s}}\right]^{-3/2} \left[\frac{\mathcal{E}_0}{10^{54}\ \mathrm{erg/s}}\right]^{1/2} \left[\frac{n_0}{10^{13}\ \mathrm{cm}^{-3}}\right]^{3/2} \times \times \left[\frac{R_*}{10^{12}\ \mathrm{cm}}\right]^3 \left[\frac{D}{2.4\ \mathrm{Gpc}}\right]^{-2} \frac{\mathrm{erg}}{\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{s}}. \quad (12)$$

This level of γ-ray flux is not far from the observed flux of GRB190114C in the $10^2 < t < 10^3$ s time interval, as can be seen from Fig. 1 [32] for the reference parameters of the wind density and overall energy output in our reference model. The VHE γ-ray flux of GRB190114C has decreased as $t^{-1.5}$ during the afterglow phase. This is close to the expected luminosity from pp interactions for a GRB outflow expanding into environment with radial density profile with $\gamma = 2$. Figure 2 shows a model of expected time evolution of the VHE γ-ray spectrum of pion decay flux based on AAfrag parameterisation of the differential production cross-sections of pp interactions [27]. The model γ-ray lightcurve in fixed energy range 0.3–1 TeV extracted from the the numerical calculation with AAfrag for the reference model considered in the text is shown in Fig. 1. It shows deviation from the $t^{-3/2}$ powerlaw behavior.

Even though the pion decay emission is not the only possible contribution to the VHE band γ-ray luminosity, the VHE band detection can serve as a selection

criterion of GRBs that might be expanding into dense circumstellar environment and thus can be considered as candidate neutrino sources. This can be used in the multi-messenger neutrino + γ-ray analysis: the sensitivity of the neutrino searches can be improved if only GRBs with VHE γ-ray afterglow detection are used in the stacking analysis of neutrino signal.

GRB 190114C provides a useful example of such an approach. The measured TeV band γ-ray flux provides an upper limit on the pion decay flux in 10^2–10^3 s interval. This in turn provides an upper bound on the neutrino flux, because the two fluxes are comparable during the deceleration phase when the GRB is transparent to the VHE γ-rays. Extrapolating this bound on neutrino flux back in time, to the prompt emission phase during which the VHE γ-ray flux is not detectable, one can find that the VHE γ-ray flux estimate $\sim 10^{-8}$ erg/cm$^2 \cdot$ s some ~ 100 s after the burst (12) suggests an estimate of $\lesssim 0.1$ neutrino events in a 10 km^3 scale neutrino detector (9).

We have considered conditions for observability of γ-ray and neutrino emission from proton–proton interactions in the GRB outflow propagating through the circumstellar medium of the GRB progenitor star. We find that if the star has been suffering from significant mass loss rate, or was a part of a binary system, the *pp* interactions could generate detectable neutrino and γ-ray flux from the GRB afterglow. We have used the stellar evolution modelling of Ref. [21] to derive a possible range of single progenitor star parameters (initial mass and metallicity) in which the neutrino signal from *pp* interactions might be detectable with current and next-generation neutrino telescopes. Applying the estimates of the flux to the GRBs detected in VHE γ-rays by the ground-based γ-ray telescopes we have found that their γ-ray afterglows might have a sizeable contribution of *pp* interactions to their flux. Measurements of the VHE γ-ray flux of GRB 190114C impose upper limits on its neutrino fluence. We have shown that the fluence of neutrinos from *pp* interactions from the GRB propagation through the circumstellar medium in this source is too small to be detectable even with 10 km^3 scale neutrino detector like IceCube-Gen2.

Funding. This work is supported by the Ministry of science and higher education of Russian Federation under the contract 075-15-2020-778 in the framework of the Large scientific projects program within the national project "Science".

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. K. Davidson and R. M. Humphreys, Ann. Rev. Astron. Astrophys. **35**, 1 (1997), https://doi.org/10.1146/annurev.astro.35.1.1, URL https:// doi.org/10.1146/annurev.astro.35.1.1.

2. B. Paczyński, Astrophys. J. **494**, L45 (1998), URL https://doi.org/10.1086%2F311148.

3. T. Piran, Phys. Rep. **314**, 575 (1999); arXiv:astro-ph/9810256.

4. P. Kumar and B. Zhang, Phys. Rep. **561**, 1 (2015); arXiv:1410.0679.

5. P. Meszaros and M. J. Rees, Month. Not. Roy. Astron. Soc. **269**, L41 (1994); arXiv:astro-ph/ 9404056.

6. H. Abdalla, R. Adam, F. Aharonian, F. Ait Benkhali, E. O. Angüner, M. Arakawa, C. Arcaro, C. Armand, H. Ashkar, M. Backes et al., Nature **575**, 464 (2019), URL https://doi.org/10.1038/s41586-019-1743-9.

7. H. Abdalla, R. Adam, F. Aharonian, F. Ait Benkhali, E. O. Angüner, M. Arakawa, C. Arcaro, C. Armand, H. Ashkar, M. Backes et al., Nature (London) **575**, 464 (2019); arXiv:1911.08961.

8. V. A. Acciari, S. Ansoldi, L. A. Antonelli, A. Arbet Engels, D. Baack, A. Babić, B. Banerjee, U. Barres de Almeida, J. A. Barrio, J. Becerra González et al., Nature **575**, 455 (2019), URL https://doi.org/10.1038/s41586-019-1750-x.

9. V. A. Acciari, S. Ansoldi, L. A. Antonelli, A. A. Engels, D. Baack, A. Babić, B. Banerjee, U. Barres de Almeida, J. A. Barrio, J. B. González et al., Nature **575**, 459 (2019), URL https://doi.org/10.1038/s41586-019-1754-6.

10. R. Sari, T. Piran, and R. Narayan, Astrophys. J. Lett. **497**, L17 (1998); arXiv:astro-ph/9712005.

11. L. Nava, Int. J. Mod. Phys. D **27**, 1842003 (2018); arXiv:1804.01524.

12. X.-Y. Wang, R.-Y. Liu, and M. Lemoine, Astrophys. J. **771**, L33 (2013); arXiv:1305.1494.

13. Q.-W. Tang, P.-H. T. Tam, and X.-Y. Wang, Astrophys. J. **788**, 156 (2014); arXiv:1405.0451.

14. E. Waxman and J. Bahcall, Phys. Rev. Lett. **78**, 2292 (1997), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.78.2292.

15. J. I. Katz, Astrophys. J. Lett. **432**, L27 (1994); arXiv: astro-ph/9405033.

16. B. Paczynski and G. Xu, Astrophys. J. **427**, 708 (1994).

17. M. Ostrowski and A. A. Zdziarski, Astrophys. Space Sci. **231**, 339 (1995).

18. F. Halzen and G. Jaczko, Phys. Rev. D **54**, 2779 (1996).

19. A. Heger, S. E. Woosley, C. L. Fryer, and N. Langer, in *From Twilight to Highlight: The Physics of Supernovae*, Springer (2003), pp. 3–12, URL http://dx.doi.org/ 10.1007/10828549_1.

20. M. J. Barlow, L. J. Smith, and A. J. Willis, Month. Not. Roy. Astron. Soc. **196**, 101 (1981).

21. J. J. Eldridge, F. Genet, F. Daigne, and R. Mochkovitch, Month. Not. Roy. Astron. Soc. **367**, 186 (2006), https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/367/1/186/6389625/367-1-186.pdf, URL https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2005.09938.x.

22. K. Belczynski, M. Dominik, T. Bulik, R. O'Shaughnessy, C. Fryer, and D. E. Holz, Astrophys. J. Lett. **715**, L138 (2010); arXiv:1004.0386.

23. P. A. Crowther, Ann. Rev. Astron. Astrophys. **45**, 177 (2007), https://doi.org/10.1146/annurev.astro.45.051806.110615, URL https://doi.org/10.1146/annurev.astro.45.051806.110615.

24. L. Sironi, U. Keshet, and M. Lemoine, Space Sci. Rev. **191**, 519 (2015); arXiv:1506.02034.

25. R. D. Blandford and C. F. McKee, Phys. Fluids **19**, 1130 (1976).

26. S. R. Kelner, F. A. Aharonian, and V. V. Bugayov, Phys. Rev. D **74**, 034018 (2006); arXiv:astro-ph/0606058.

27. M. Kachelrieß, I. V. Moskalenko, and S. Ostapchenko, Comput. Phys. Comm. **245**, 106846 (2019); arXiv: 1904.05129.

28. S. R. Kelner, F. A. Aharonian, and V. V. Bugayov, Phys. Rev. D **74**, 034018 (2006); arXiv:astro-ph/0606058.

29. P. Bhattacharjee and N. Gupta, Astropart. Phys. **20**, 169 (2003); arXiv:astro-ph/0211165.

30. E. Derishev and T. Piran, Astrophys. J. **880**, L27 (2019), URL http://dx.doi.org/10.3847/2041-8213/ab2d8a.

31. M. Ajello, M. Arimoto, M. Axelsson, L. Baldini, G. Barbiellini, D. Bastieri, R. Bellazzini, A. Berretta, E. Bissaldi, R. D. Blandford et al., Astrophys. J. **890**, 9 (2020); arXiv:1909.10605.

32. MAGIC Collaboration, V. A. Acciari, S. Ansoldi, L. A. Antonelli, A. A. Engels, D. Baack, A. Babić, B. Banerjee, U. Barres de Almeida, J. A. Barrio et al., Nature (London) **575**, 459 (2019); arXiv:2006.07251.

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 372–392 © 2021

О РЕАКЦИИ РАЗВАЛА В ТРЕХЧАСТИЧНЫХ КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМАХ С ПРИЛОЖЕНИЕМ К ОПИСАНИЮ ПРОЦЕССОВ ДИССОЦИАТИВНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ И ПЕРЕЗАРЯДКИ В АНТИПРОТОННОЙ ФИЗИКЕ

А. М. Будылин [a], ***Я. Ю. Коптелов*** [a,b], ***С. Б. Левин*** [a*]

[a] *Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет*
199034, Санкт-Петербург, Россия

[b] *Санкт-Петербургский электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ленина*
197376, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 23 марта 2021 г.,
после переработки 23 мая 2021 г.
Принята к публикации 30 мая 2021 г.

Предлагается новый подход к описанию реакции развала в системах трех заряженных квантовых частиц при наличии кулоновских парных потенциалов притяжения. Предполагается, что аналитическая форма асимптотики волновой функции на бесконечности в конфигурационном пространстве является известной. При этом впервые предлагается упрощенная форма асимптотики, связанная с выделением основных вкладов, порождаемых бесконечной совокупностью парных асимптотических каналов рассеяния. Предложенный подход представляется нам принципиальным для описания реакции развала в многочастичных системах. Рассматривается возможность приложения развитого подхода для описания процессов диссоциативной рекомбинации и перезарядки в экспериментах по накоплению антиатомов.

DOI: 10.31857/S0044451021090042

1. ВВЕДЕНИЕ

Мы рассматриваем задачу рассеяния трех трехмерных квантовых заряженных частиц при наличии парных кулоновских потенциалов притяжения. Для определенности полагаем, что парные короткодействующие потенциалы отсутствуют, хотя их аккуратный учет не является принципиальной проблемой в рамках предлагаемой нами схемы. Кроме того, мы предполагаем, что массы частиц равны, что также не является принципиальным ограничением предлагаемого метода, а лишь позволяет избежать более громоздких вычислений. На примере такой упрощенной задачи мы хотим продемонстрировать новый подход к задаче рассеяния трех заряженных квантовых частиц при энергиях выше порога развала. Предлагаемый подход позволяет контролировать точность описания реакции развала в задаче трех тел. Мы надеемся также, что подход окажется полезен и в более общей ситуации рассеяния в системе нескольких частиц (больше трех), по крайней мере, для двухкластерного рассеяния.

Задача трехчастичного квантового рассеяния является одной из фундаментальных физических задач. Ее решение, как решение модельной задачи, определяет протекание многих макроскопических процессов в физике и химии. В случае быстро убывающих парных потенциалов эта задача была решена в знаменитой работе Фаддеева [1] более полувека назад. В случае медленно (кулоновским образом) убывающих парных потенциалов многие существенные вопросы стационарной постановки были решены или обсуждались в последующих работах Фаддеева, Меркурьева [2–4] и их учеников, а также в огромном количестве работ, инициированных первыми результатами.

Тем не менее, несмотря на существенные продвижения, достигнутые за прошедшее с тех пор время, квантовая задача рассеяния трех заряженных частиц до сих пор оставляет ряд не решенных до конца вопросов. Основная проблема связана с отсутствием так называемой асимптотической свободы час-

* E-mail: s.levin@spbu.ru

тиц на бесконечности. Это делает неприменимым (по крайней мере в исходной классической форме) подход Фаддеева, основанный на асимптотическом разделении волновой функции на компоненты. При этом существенно усложняется структура асимптотики волновой функции на бесконечности.

Другая проблема, специфичная для реакции развала кластера, находящегося в связанном кулоновском состоянии, налетающей заряженной частицей связана с наличием бесконечного числа уровней возбуждения кластера и уровней перекластеризации. Каждый уровень возбуждения (или перекластеризации) порождает свой канал рассеяния. Чем ниже полная положительная энергия системы, тем более существенной при описании характеристик рассеяния становится роль парных возбуждений с высокими значениями парного главного квантового числа. Отметим, что размерность матрицы рассеяния становится фактически бесконечной, что существенно усложняет оценки точности при вычислении характеристик рассеяния.

Необходимо отметить работы [5–7], в которых проблема бесконечного числа парных кулоновских каналов рассеяния в процессах трехчастичного развала решается путем «дискретизации континуума», т. е. введения конечного базиса для описания асимптотики решения задачи рассеяния. Несмотря на хорошее совпадение некоторых численных построений с экспериментом, существенные вопросы, связанные с таким подходом, остаются. Эти вопросы касаются оценок погрешности описания динамики заведомо бесконечномерной системы с помощью конечного «штурмовского базиса». Отметим, что при описании низкоэнергетического рассеяния такие оценки становятся принципиальными. Они отвечают на вопрос о том, сколько уровней парных возбуждений должно быть учтено явно для описания процесса развала с фиксированной точностью. Более того, возникает вопрос о том, можно ли в принципе ограничиться рассмотрением конечного числа уровней возбуждения при описании процессов развала с контролируемой точностью в рамках квантовомеханической модели. А если нет, то как именно в рамках конечномерной конструкции описать не учитываемое явно бесконечное число степеней свободы системы. Фактически вопрос сводится к доказательству справедливости штурмовского базиса или к построению его обоснованной альтернативы.

Отметим работу [8], посвященную построению асимптотики решения задачи рассеяния трех заряженных кулоновских частиц, а также построению кулоновской функции Грина. Здесь также не рассматривается влияние рассеяния бесконечного числа парных кулоновских уровней возбуждения на структуру асимптотики решения задачи. Соответственно, остается без ответа вопрос о количестве парных состояний дискретного спектра, которые нужно учесть явно для достижения определенной точности вычислений.

В настоящей работе мы отвечаем на поставленные выше вопросы. Мы показываем, что для описания с контролируемой точностью процессов развала в трехчастичной кулоновской системе невозможно ограничиться лишь конечным числом парных кулоновских возбуждений. Дополнительный бесконечный набор не учтенных явно процессов должен учитываться с помощью введения некоторого «эффективного состояния», которое удается построить явно. Детали построения описаны, например, в работе [9]. Здесь отметим лишь, что эффективное состояние определяется методом перевала при анализе спектрального разложения асимптотики собственных функций непрерывного спектра трехчастичного оператора в асимптотической области «почти разделения переменных». Это эффективное состояние и является обоснованной альтернативой упомянутому выше штурмовскому базису. Точность предложенных построений регулируется параметром, описывающим количество учтенных явно уровней возбуждения парной подсистемы, и соответствующей областью применимости эффективного состояния. Мы следуем идеям дифракционного подхода в задаче рассеяния, предложенного в работах [10–12] для случая короткодействующих парных потенциалов и одномерных частиц. На основе принципа локального поля, сформулированного Фоком в асимптотической теории дифракции [13], идеи дифракционного подхода были развиты позднее для случая кулоновских парных потенциалов отталкивания для одномерных и трехмерных частиц в работах [14–17].

Отметим также, что развиваемые в работе идеи, на наш взгляд, сохраняют актуальность и для многочастичных (больше трех) квантовых реакций взаимодействия. А именно, предложенный еще Фоком метод локального поля и развитый в более поздних работах дифракционный подход позволяют при взаимодействии сложных многочастичных квантовых систем выделять наборы эффективных состояний, заменяющих в локальных областях конфигурационного пространства сложную динамику с бесконечным числом степеней свободы. Выделение таких состояний эквивалентно выделению в сложной системе простой конечномерной модели, сохраняющей

основные черты исходной системы и допускающей стандартное решение.

В заключение мы рассматриваем приложение развитого в работе метода к описанию процессов диссоциативной рекомбинации и перезарядки в экспериментах по проверке CPT-симметрии (заряд–четность–время), проводившихся в CERN в течение последних нескольких лет [18].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать процессы рассеяния $2 \to 2$ и $2 \to 3$, предполагая для определенности, что в начальном состоянии имеются заряженная частица и двухчастичный кластер в кулоновском связанном состоянии. Будем предполагать, что полная энергия системы допускает развал, т. е. допустимы процессы $2 \to 3$. Будем искать решение уравнения Шредингера для такой трехчастичной системы, полагая, что это решение обладает на бесконечности в конфигурационном пространстве определенной асимптотикой. Нам известна структура (анзац) асимптотики, каждый член которой отвечает некоторому процессу рассеяния, $2 \to 2$ или $2 \to 3$. Нам не известны амплитуды рассеяния (коэффициенты в этих асимптотических членах), определяемые интегральными операторами. При этом каждая амплитуда рассеяния однозначно определяется некоторой весовой функцией (плотностью в структуре этих интегральных операторов). Интегральные операторы по построению учитывают вырождение парных связанных состояний с фиксированной энергией [19], а также вырождение состояний непрерывного спектра.

Нашей целью является нахождение полного набора амплитуд рассеяния, отвечающих различным процессам. Отметим, что для математически корректного учета бесконечного числа парных кулоновских возбуждений в процессах $2 \to 2$ будет определено упомянутое выше эффективное состояние, что позволит сделать задачу рассеяния эффективно-конечномерной. Это эффективное состояние может рассматриваться как замена конструкций, определенных с помощью штурмовского базиса в работах [5–7]. При этом будет найдено и решение трехчастичного уравнения Шредингера. Задача может быть решена в три этапа.

На первом этапе мы построим матричное интегральное уравнение, которое свяжет полный набор упомянутых выше плотностей, отвечающих процессам $2 \to 2$, с амплитудой рассеяния $2 \to 3$. Отметим, что амплитуда рассеяния $2 \to 3$ является гладкой функцией точки на пятимерной сфере единичного радиуса. Уравнение будет построено на основе многомерной формулы Грина. Идея этих построений близка, например, работе [7], однако имеет и свои отличительные черты. Мы обсудим разрешимость построенного уравнения.

Основываясь на предыдущем шаге, на следующем этапе мы построим и решим неоднородную граничную задачу для амплитуды рассеяния $2 \to 3$ в шестимерном шаре большого радиуса ρ с граничным условием типа модифицированного условия излучения.

Наконец, на третьем этапе мы восстановим все амплитуды рассеяния $2 \to 2$, воспользовавшись результатами решения граничной задачи (амплитуда рассеяния $2 \to 3$). Этот результат позволяет модифицировать свободный член в неоднородной граничной задаче, решаемой на втором шаге, и повторить этапы два и три. Таким образом, мы приходим к итеративной процедуре, позволяющей уточнить решение с контролируемой точностью за определенное число шагов.

Упомянутая выше процедура сводится к нахождению парных амплитуд рассеяния $2 \to 2$, отвечающих дискретному спектру в подсистемах, по известным данным рассеяния на непрерывном спектре. В некотором роде такая процедура известна в теории рассеяния как процедура «одевания».

3. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

3.1. Уравнение и граничные условия

Пусть в начальном состоянии частицы в паре σ находятся в связанном состоянии с главным квантовым числом l. Пусть H — оператор Гамильтона системы трех заряженных частиц:

$$H = -\Delta_{\mathbf{x}} - \Delta_{\mathbf{y}} + \sum_{\alpha=1}^{3} v_\alpha(\mathbf{x}_\alpha), \quad v_\alpha(\mathbf{x}_\alpha) = \frac{c_\alpha}{x_\alpha},$$

$$x_\alpha = |\mathbf{x}_\alpha|, \quad c_\alpha \in \mathbb{R}.$$

Пусть $\rho = \sqrt{x_\alpha^2 + y_\alpha^2}$ — гиперрадиус системы трех частиц, $(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)$, $\alpha = 1, 2, 3$ — пары якобиевых координат, $(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{p}_\alpha)$ — соответствующие им пары импульсов, $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha \in \mathbb{R}^3$.

Будем искать решение уравнения Шредингера

$$H\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = E\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}), \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\beta \\ \mathbf{y}_\beta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_\beta \\ \mathbf{p}_\beta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}, \mathbf{P} \in \mathbb{R}^6 \tag{1}$$

с асимптотикой

$$\Psi(\mathbf{X},\mathbf{P}) \underset{X\to\infty}{\sim} \Psi^{(0)} + \Psi^{(02)} + \Psi^{(03)}, \qquad (2)$$

где

$$\Psi^{(0)} = \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' \exp[i\langle \mathbf{p}'_{l\sigma}, \mathbf{y}_\sigma\rangle + iw_{l\sigma}(\mathbf{y}_\sigma, p_{l\sigma})] \times \\ \times \varphi_{l\sigma}(\mathbf{x}_\sigma, \hat{\mathbf{k}}'_{l\sigma}) a^0_{l\sigma}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}'),$$

$$\Psi^{(02)} = \sum_{\alpha=1}^{2} \Psi^{(02)}_\alpha, \quad \Psi^{(02)}_\alpha = \\ = \sum_{j=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' \exp[i\langle \mathbf{p}'_{j\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle + iw_{j\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p_{j\alpha})] \times \\ \times \varphi_{j\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}) a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}'), \qquad (3)$$

$$\Psi^{(03)} \underset{w}{\to} A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{\exp[i\sqrt{E}X + iW_0(\mathbf{X},\mathbf{P})]}{X^{5/2}}.$$

Здесь введены обозначения

$$d\hat{\mathbf{P}} \equiv d\hat{\mathbf{k}}\, d\hat{\mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{k}} \equiv \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \hat{\mathbf{p}} \equiv \frac{\mathbf{p}}{p}.$$

В дальнейшем символ «шляпка» также будет использоваться для обозначения единичного вектора.

Асимптотика (2) в слабом смысле определяет структуру решения задачи рассеяния. Необходимо отметить, что структура расходящейся волны $\Psi^{(03)}$ должна быть модифицирована в областях, определяемых условиями $x_\alpha < y_\alpha^\nu$, $0 < \nu < 1$, $\alpha = 1,2,3$. Структура искаженных плоских волн (частью слабой асимптотики которых является выражение для $\Psi^{(03)}$) с учетом модификации подробно описана в работах [15,17,20]. В работе [17] показано, что такая модификация сводится к аналитической замене

$$\mathbf{x}_\alpha \to -i\frac{\nabla_{\mathbf{k}_\alpha}\psi_c(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)}{\psi_c(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)}, \qquad (4)$$

где функция $\psi_c(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)$ является решением уравнения Шредингера в парной подсистеме. Такую модификацию в дальнейшем мы и будем иметь в виду.

3.2. Обсуждение структуры анзаца

Отметим, что асимптотика (2) содержит разложение по всевозможным парным состояниям, допустимым в данной реакции рассеяния (процессы $2 \to 2$, второе слагаемое $\Psi^{(02)}$ в (2)). Такие разложения допустимы в тех асимптотических областях конфигурационного пространства, в которых исходный оператор Шредингера допускает определенные упрощения. В данном случае таким упрощением является почти разделение переменных. Подробнее об этом будет сказано ниже. Сейчас мы лишь отметим, что выделение различных асимптотических областей в конфигурационном пространстве с последующим упрощением решения в этих областях приведет к возможности свести набор упрощенных решений в единое решение во всем пространстве. Эти рассуждения, как уже было сказано выше, основаны на принципе локального поля, сформулированном и использованном Фоком в асимптотической теории дифракции [13].

В данной задаче мы принимаем во внимание, что лишь две парные подсистемы в произвольной системе трех заряженных частиц могут порождать двухчастичные связанные состояния. Вклад в асимптотику вносит также расходящаяся шестимерная сферическая волна с гладкой амплитудой (процесс $2 \to 3$, третье слагаемое $\Psi^{(03)}$ в (2)), а, кроме того, и начальное состояние, вклад которого отражен в первом слагаемом $\Psi^{(0)}$ в формуле (2).

Приведем использованные обозначения. Функция

$$\varphi_{n\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}) = \exp\left(-x_\alpha \frac{|c_\alpha|}{2n}\right) \times \\ \times L_{n-1}\left(\frac{|c_\alpha| x_\alpha}{2n}(1 - \langle \hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}, \hat{\mathbf{x}}_\alpha\rangle)\right),$$

где L_n — полиномы Лагерра, а $\langle \hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}, \hat{\mathbf{x}}\rangle$ обозначает скалярное произведение векторов $\hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}$ и $\hat{\mathbf{x}}$, описывает двухчастичное кулоновское связанное состояние с главным квантовым числом n в паре α с энергией $\kappa_n = -c_n^2/4n^2$ в следующем смысле.

Как показано в Приложении, такая функция играет роль производящей функции в разложении вида $\Psi^{(02)}$, а само разложение может рассматриваться как набор производящих интегралов. Согласно уравнению (74) Приложения, интегрирование функции $\varphi_{n\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha})$ по $d\hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}$ с некоторой гладкой функцией a_n, заданной на единичной сфере $\mathbb{S}^2_{\hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha}}$, представляет собой суперпозицию всех возможных двухчастичных кулоновских состояний с квантовыми числами (n, l, m) при фиксированном главном квантовом числе n. Структура коэффициентов в такой суперпозиции n^2 слагаемых полностью определяется структурой функции a_n.

Именно в этом смысле $\Psi^{(02)}$ является спектральным разложением трехчастичных собственных функций непрерывного спектра по полному набору состояний двухчастичных подсистем. Асимптотические области конфигурационного простран-

ства, в которых такие разложения применимы, подробно обсуждались в работе [19]. Ранее они использовались в [2].

Более точно, каждое кулоновское парное связанное состояние с главным квантовым числом n имеет вырождение кратности n^2, каждый асимптотический канал рассеяния вырожден также по направлению импульса $\mathbf{p}_{n\alpha}$. Это совокупное вырождение отражено в интегрировании по $d\hat{\mathbf{P}}'$ по «четырехмерной сфере» $\mathbb{S}^2 \times \mathbb{S}^2$ с неизвестной плотностью $a_{n\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$. Отметим, что нахождение полного набора плотностей $a_{n\alpha}$ в совокупности с амплитудой трехчастичного развала системы определяет, в смысле сказанного выше, полный набор амплитуд рассеяния и, тем самым, решает задачу. Еще раз подчеркнем, что нахождение такого полного набора амплитуд или, точнее, эквивалентного ему набора и является целью данной работы.

Предложенный нами анзац не является вполне стандартным в следующем смысле. Во-первых, падающая волна $\Psi^{(0)}$ задается плотностью $a^0_{l\sigma}$. В смысле обсуждавшегося выше эта функция задает начальное состояние кластера с главным квантовым числом l в паре σ. С нашей точки зрения, такой «вероятностный» способ задания начального состояния (не требующий задания фиксированного набора квантовых чисел) является наиболее естественным в квантовомеханической постановке задачи. Очевидно, что можно подобрать и такую плотность $b^0_{l\sigma}$, которая отвечала бы именно одному фиксированному набору квантовых чисел.

Во-вторых, как уже обсуждалось выше, спектральное разложение трехчастичного состояния системы по набору парных состояний (слагаемое $\Psi^{(02)}$) содержит не только расходящиеся волны по переменной $\mathbf{y}_\alpha$ (как это принято в стандартных разложениях), но и сходящиеся волны. Иначе говоря, разложение строится по набору плоских волн, который включает в себя как расходящиеся, так и сходящиеся волны. Отметим, что такой выбор разложения обусловлен, с математической точки зрения, полнотой набора собственных функций парного оператора Шредингера. С физической точки зрения, включение в разложение сходящихся волн обусловлено дальнодействием парных кулоновских потенциалов. Иными словами, таким образом мы учитываем ненулевую вероятность процессов перестройки в кулоновской системе трех тел даже на больших расстояниях. В то же время распределение амплитуд в сходящихся и расходящихся волнах определяется структурой плотностей $a_{n\alpha}$ и должно быть найдено в процессе решения задачи.

Мы используем также следующие обозначения. Импульс $\mathbf{p}'_{n\alpha} = \sqrt{E-\kappa_n}\,\hat{\mathbf{p}}'_{n\alpha}$, интегрирование ведется по $d\hat{\mathbf{P}}' = d\hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha} d\hat{\mathbf{p}}'_{n\alpha}$. Фазовые функции $w_{n\alpha}(y_\alpha, p_{n\alpha})$ и $W_0(\mathbf{X}, P)$ определены следующим образом:

$$w_{n\alpha}(y_\alpha, p_{n\alpha}) = -\frac{c^{eff}_\alpha}{2p_{n\alpha}} \ln y_\alpha,$$

$$W_0(\mathbf{X}, P) = -\frac{X}{2\sqrt{E}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{c_\alpha}{x_\alpha} \right) \ln X.$$

Еще раз отметим, что функция W_0 в асимптотических областях, в которых одна из парных координат Якоби x_α становится существенно меньше других, должна быть модифицирована в соответствии с результатами работ [17, 20]. Выражение для c^{eff}_α в общей ситуации имеет вид

$$c^{eff}_\alpha = \frac{c_\beta}{|\omega_{\beta\alpha}|} + \frac{c_\gamma}{|\omega_{\gamma\alpha}|}.$$

Здесь $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ — четная перестановка номеров парных подсистем. Коэффициенты $\omega_{\alpha\beta}$ являются коэффициентами матрицы преобразования координат Якоби,

$$\mathbf{x}_\beta = \sigma_{\alpha\beta}\mathbf{x}_\alpha + \omega_{\alpha\beta}\mathbf{y}_\alpha.$$

Например, в рассматриваемом нами случае частиц равных масс при $\alpha = 1$ имеем

$$\mathbf{x}_2 = -\frac{1}{2}\mathbf{x}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1, \quad \mathbf{x}_3 = -\frac{1}{2}\mathbf{x}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1,$$

$$c^{eff}_1 = \frac{2}{\sqrt{3}}(c_2 + c_3).$$

Отметим, что вследствие экспоненциального убывания функции $\varphi_{n\alpha}$ по переменной x_α асимптотика решения при $\rho \to \infty$ оказывается эквивалентной асимптотике при $y_\alpha \to \infty$ для любого конечного значения n.

Выражение для $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ является гладкой функцией, описывает амплитуду шестимерной расходящейся волны и подлежит определению. Неизвестные плотности $a_{n\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$ также подлежат определению.

3.3. Схема решения

Ниже, воспользовавшись многомерной формулой Грина, определим уравнения, которые связывают плотности $a_{n\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$ и трехчастичную амплитуду $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$. Учитывая эти связи, мы предложим процедуру нахождения амплитуды $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ путем решения граничной задачи в шаре большого радиуса ρ с граничными условиями типа модифицированного условия излучения. Решив поставленную

граничную задачу для функции $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ в первом приближении, мы сможем восстановить плотности $a_{n\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$ и, как было отмечено выше, определим амплитуды также во всех парных каналах рассеяния. Найденные амплитуды позволят скорректировать начальные данные для граничной задачи и повторить описанную процедуру. Число коррекций решения определяется необходимой точностью решения поставленной задачи.

Параллельно мы определим волновую функцию трехчастичной системы во всем пространстве.

Данный подход в некотором смысле связан с известным R-матричным подходом [21], однако несомненно имеет и свои отличительные черты. Преимущество данного метода заключается в том, что мы учитываем бесконечное число парных каналов рассеяния с помощью явного выделения их совокупного вклада в асимптотику (2).

3.4. Выделение асимптотических вкладов в структуре спектральных разложений

Начнем с того, что запишем выражение (3) для $\Psi_\alpha^{(02)}$, отвечающее набору всевозможных связанных состояний в парной подсистеме α с кулоновским потенциалом притяжения, следующим образом:

$$\begin{aligned}
&\Psi_\alpha^{(02)} = \\
&= \sum_{j=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' \exp[i\langle \mathbf{p}'_{j\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle + iw_{j\alpha}(y_\alpha, p_{j\alpha})] \times \\
&\qquad \times \varphi_{j\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}) a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') \sim \\
&\sim \sum_{j=1}^{N_\alpha} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' \exp[i\langle \mathbf{p}'_{j\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle + iw_{j\alpha}(y_\alpha, p_{j\alpha})] \times \\
&\qquad \times \varphi_{j\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}) a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') + \\
&\qquad + \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' \Psi_{c,\alpha}^{acc}(\mathbf{X}, \sqrt{E}\hat{\mathbf{P}}') a_\alpha^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}'). \quad (5)
\end{aligned}$$

На этом шаге происходит выделение из бесконечной суммы слагаемых, в которую раскладывается решение уравнения Шредингера в соответствующей области конфигурационного пространства[1)], одного эффективного состояния, определяющего совокупный вклад в разложение всех высоковозбужденных состояний в выделенной паре частиц с индексом α. Точность такого разбиения определяется величиной параметра N_α. Оценка значения этого параметра дана ниже.

[1)] Полный набор областей описан в следующем разделе.

Данное разложение представляет собой спектральное разложение решения по собственным функциям парной подсистемы в соответствующей области. При этом можно сказать, что выделенное эффективное состояние соответствует спектральной окрестности точки накопления дискретного спектра оператора Шредингера соответствующей парной подсистемы.

Механизм выделения асимптотического члена в выражении (5) связан со сложной структурой асимптотики функций $\varphi_{n\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{n\alpha})$ (а фактически — полиномов Лагерра) по совокупности больших значений переменных n и x_α [22]. Более точно: при увеличении x_α основной вклад в полное выражение (5) вносят слагаемые, отвечающие все большим значениям индекса «n». Таким образом, выделение асимптотики функциональной суммы (5) по переменной x_α приводит к выделению совокупного вклада слагаемых, отвечающих большим значениям индекса «n».

Значение параметра N_α определяется структурой асимптотической области конфигурационного пространства, в которой используется асимптотика (5).

4. ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА И ПОСТРОЕНИЕ «ЭФФЕКТИВНОГО» КАНАЛА РАССЕЯНИЯ

4.1. Постановка вспомогательной задачи

Рассмотрим теперь вспомогательную задачу о распространении решения уравнения Шредингера (1) типа искаженной шестимерной плоской волны, являющейся приближенным решением в области конфигурационного пространства, где все частицы хорошо разделены (забегая вперед, назовем эту область Ω_{BBK}), в область, где частицы выбранной пары α с парным кулоновским потенциалом притяжения сближаются, а третья частица по-прежнему находится далеко (назовем эту область Ω_α^+).

На первый взгляд, такая вспомогательная задача (задача $3 \to 3(2)$) не связана с задачей рассеяния $2 \to 2(3)$, которую мы исследуем. Однако это не так в следующем смысле.

Ниже показано, что в области Ω_α^+ оператор Шредингера асимптотически упрощается и допускает почти разделение переменных. Напомним, что решение типа искаженной плоской волны, так называемое BBK-приближение, $\Psi_c^{BBK}(\mathbf{X}, \mathbf{P})$, было исследовано в работе [23] (см. также [2]), хотя использова-

лось и ранее. С точностью до нормировки оно имеет вид

$$\Psi_c^{BBK}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim \\ \sim e^{i\langle \mathbf{X},\mathbf{P}\rangle} D(\mathbf{x}_1,\mathbf{k}_1)D(\mathbf{x}_2,\mathbf{k}_2)D(\mathbf{x}_3,\mathbf{k}_3). \quad (6)$$

Здесь

$$D(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \Phi(-i\eta, 1, ixk - i\langle \mathbf{x},\mathbf{k}\rangle), \\ \mathbf{x},\mathbf{k}\in\mathbb{R}^3, \quad \eta = \frac{c}{2k}, \quad (7)$$

Φ — вырожденная гипергеометрическая функция [24].

В смысле сказанного выше, решение типа $\Psi_c^{BBK}(\mathbf{X},\mathbf{P})$ в пересечении областей Ω_{BBK} и Ω_α^+ может быть разложено по базису собственных функций оператора Шредингера парной подсистемы α. Главный вклад разложения по совокупности парных высоковозбужденных (отвечающих большим значениям главного квантового числа n) состояний может быть отсуммирован в некоторое эффективное состояние, допускающее следующее представление:

$$\tilde{\Psi}_c^{acc} \sim U(\mathbf{y}_\alpha,\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\Lambda(|c_\alpha|x_\alpha). \quad (8)$$

Функции $U(\mathbf{y}_\alpha,\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}}_\alpha)$ и $\Lambda(|c_\alpha|x_\alpha)$ будут явно определены ниже.

Это эффективное состояние заменяет разложение искаженной шестимерной плоской волны по бесконечному ($n > N_\alpha \gg 1$) вырожденному набору состояний двухчастичного дискретного спектра.

Воспользовавшись принципом локального поля, мы покажем, что разложение решения задачи рассеяния $3 \to 3(2)$ типа шестимерной расходящейся волны с произвольной амплитудой в области Ω_α^+ по полному набору собственных функций парного оператора Шредингера также допускает выделение некоторого эффективного состояния. А само это состояние (8) связано со структурой определенного выше в (5) (для исходной задачи рассеяния $2 \to 2(3)$) асимптотического выражения для $\Psi_{c,\alpha}^{acc}$ с помощью интегрального оператора. В этом и заключается основной результат данного раздела.

4.2. Основные результаты, полученные ранее на пути решения вспомогательной задачи

Вернемся теперь к решению вспомогательной задачи. Для этого воспользуемся принципом локального поля, установленным Фоком в 1947 году и использованным им при развитии асимптотической теории дифракции. Этот же принцип был использован [15, 17] для системы трех трехмерных одноименно заряженных частиц.

Следуя работе [15], введем набор асимптотических областей конфигурационного пространства в терминах введенных выше пар координат Якоби $(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha)$ (как и выше, индекс $\alpha = 1,2,3$ нумерует парные подсистемы):

$$\Omega_\alpha = \Big\{(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha), \quad y_\alpha^\mu < x_\alpha < y_\alpha, \\ \frac{1}{2} < \mu < 1, \quad y_\alpha \to \infty\Big\}, \quad (9)$$

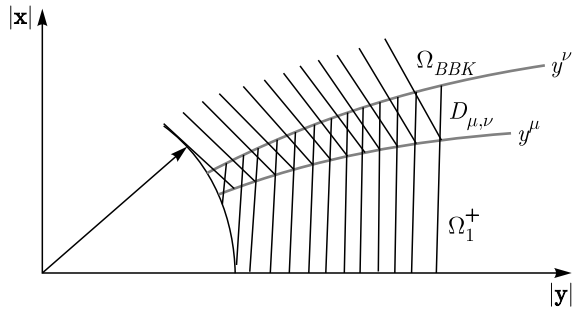
$$\Omega_{BBK} = \bigcup_{\alpha=1}^{3} \Omega_\alpha, \quad (10)$$

$$\Omega_\alpha^+ = \{(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha), \quad x_\alpha \le y_\alpha^\nu, \\ 0 < \nu < 1, \quad y_\alpha \to \infty\}, \quad (11)$$

$$D_{\mu,\nu}^\alpha = \Big\{(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha), \quad y_\alpha^\mu < x_\alpha < y_\alpha^\nu, \\ \frac{1}{2} < \mu < \nu < 1, \quad y_\alpha \to \infty\Big\}. \quad (12)$$

Отметим, что область Ω_{BBK} (10) отвечает ситуации, когда все три заряженные частицы хорошо разделены. В этой области применимо приближенное решение уравнения Шредингера Ψ^{BBK}, описанное, например, в работе [23], где, в частности, предложена рекуррентная процедура улучшения точности этого приближения. При этом границы параболических областей Ω_α (9) выбраны так, чтобы невязка приближенного решения Ψ^{BBK} в этих областях убывала быстрее кулоновского потенциала.

Параболические области Ω_α^+ (11) соответствуют асимптотическим конфигурациям, в которых сумма трех парных кулоновских потенциалов допускает разделение переменных с точностью до короткодействующей поправки. При этом короткодействующая поправка всюду является поправкой следующего порядка малости по величине $1/y_\alpha$ ($y_\alpha \gg 1,\ y_\alpha \gg x_\alpha$) к основной части потенциала, допускающей разделение переменных. Область $D_{\mu,\nu}^\alpha$ является пересечением области Ω_{BBK} и области Ω_α^+. Упрощенная схема выделения асимптотических областей при $\alpha = 1$ приведена на рисунке. В дальнейшем мы будем, где это возможно, опускать индекс «α», полагая $\alpha = 1$. Рассмотрим теперь область Ω_1^+. В ней полный потенциал в уравнении Шредингера в старшем порядке допускает следующее упрощение:



$$V = V_{sep} + O\left(\frac{x}{y^2}\right), \quad V_{sep} = \frac{c_1}{x_1} + v^{eff}(y),$$
$$v^{eff} = \frac{c^{eff}}{y}, \quad c^{eff} = \frac{2(c_2+c_3)}{\sqrt{3}}. \tag{13}$$

При этом поправка $O\left(x/y^2\right)$ в данной области убывает быстрее кулоновского потенциала при $y \to \infty$. Скорость убывания поправки регулируется границами области в определении (11). Таким образом, в области Ω_1^+ уравнение Шредингера в старшем порядке имеет вид

$$\left[-\Delta_{\mathbf{x}} - \Delta_{\mathbf{y}} + v_1(x) + v^{eff}(y)\right]\Psi^{sep} = E\Psi^{sep} \tag{14}$$

и тем самым допускает разделение переменных. Мы обсудим ниже границы применимости такого приближения.

Представление Ψ^{sep} для решения уравнения (14) с разделением переменных строится как произведение решений $\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k})$ и $\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p})$ при условии $k^2+p^2=E$, умноженное на произвольную весовую функцию R импульсных переменных:

$$\Psi^{sep}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k}' \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{x},\mathbf{k}')\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}') \times$$
$$\times\, \delta(k'^2 + p'^2 - E) R_c(\mathbf{P},\mathbf{P}') + \sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{k}}' \times$$
$$\times \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{p}' \varphi_n(\mathbf{x},\hat{\mathbf{k}}')\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}')\delta\left(p'^2 - \frac{c_1^2}{4n^2} - E\right) \times$$
$$\times\, R_n(\mathbf{P},\mathbf{p}',\hat{\mathbf{k}}'), \quad (\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \Omega_1^+. \tag{15}$$

Здесь функции $\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \psi(\mathbf{x},\mathbf{k})$ и $\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p})$ абсолютно непрерывного спектра удовлетворяют двухчастичным кулоновским уравнениям соответственно

$$h_x\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \left(-\Delta_{\mathbf{x}} + v_1(x)\right)\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \\ = k^2\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k}), \tag{16}$$

$$h_y\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}) = \left(-\Delta_{\mathbf{y}} + v^{eff}(y)\right)\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}) = \\ = p^2\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}). \tag{17}$$

При этом весовая функция $R = R_c$, а $k^2 > 0$.

Функция $\psi_c(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \varphi_n(\mathbf{x},\hat{\mathbf{k}})$ — функция дискретного спектра оператора h_x, определенная в Приложении. Здесь весовая функция $R = R_n$, а двухчастичный спектральный параметр k^2 принимает бесконечный набор дискретных значений $-c^2/4n^2$, $n = 1, 2, \ldots$ Таким образом, условие $k^2 + p^2 = E$ отражает закон сохранения энергии, а импульсы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$ принимают все возможные допустимые значения, определяемые структурой спектра операторов h_x и h_y (16), (17).

Иными словами, как уже отмечалось выше, приближенное представление для искомого решения Ψ^{sep} уравнения Шредингера исходной задачи трех тел в области Ω_1^+ является фактически разложением по собственным функциям (спектральным разложением) оператора Шредингера парной подсистемы с индексом «1». Коэффициентами этого разложения являются некоторые весовые функции R_c и R_n, не зависящие от координат $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$. Весовая функция R_c отвечает непрерывному спектру оператора h_x, а весовая функция R_n — дискретному спектру оператора h_x. Вырождение двухчастичного кулоновского связанного состояния с фиксированным главным квантовым числом учитывается, как показано в Приложении, с помощью интегрирования по единичной сфере $\mathbb{S}^2_{\hat{\mathbf{k}}}$. Детали построения функции Ψ^{sep} могут быть найдены в работе [19]. Весовые функции R_n, $n \gg 1$ определяются единственным образом из условия согласования приближенного решения Ψ^{sep} и приближенного решения Ψ_c^{BBK} в области $D_{\mu,\nu}$ (12), в которой оба эти приближенные решения справедливы.

4.3. Структура функции $\tilde{\Psi}_c^{acc}$

Как отмечалось выше, чтобы построить выражение для $\tilde{\Psi}_c^{acc}$, нам нужно провести процедуру согласования решения типа спектрального разложения Ψ^{sep} (5) и решения типа Ψ_c^{BBK} в асимптотической области $D_{\mu,\nu}$ (при больших значениях переменной x). Отметим, что этот шаг аналогичен процедуре нахождения амплитуд рассеяния в спектральном разложении решения полной задачи рассеяния, однако не эквивалентен этой процедуре. Различие заключается в том, что на данном (элементарном) этапе мы строим не полное решение задачи рассеяния, которое мы не знаем, а лишь, с определенной точностью, собственную функцию непрерывного спектра трехчастичного оператора, продолжая внутрь параболической области Ω_1^+ искаженную плоскую волну Ψ_c^{BBK}. Для нахождения коэффициентов разложе-

ния R_n в выражении для Ψ^{sep} мы приравниваем в области $D_{\mu,\nu}$ представления Ψ_c^{BBK} и Ψ^{sep}:

$$\Psi^{sep}|_{D_{\mu,\nu}} \sim \Psi_c^{BBK}|_{D_{\mu,\nu}}. \tag{18}$$

Фактически мы согласовываем их слабые асимптотики, существенно уменьшая число степеней свободы в исследуемых выражениях. В этом смысле мы повторяем идеологию, изложенную в работе [15]. Пользуясь ортогональностью функций, образующих спектральное разложение Ψ^{sep}, мы домножаем уравнение (18) на одну из базисных функций вида Ψ_n^*,

$$\Psi_n(\mathbf{X},\mathbf{P}') = \exp[i\langle \mathbf{p}'_n, \mathbf{y}\rangle + iw_n(\mathbf{y}, p_n)]\varphi_n(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{k}}'_n),$$

$$n > N \gg 1,$$

и интегрируем по пространственной переменной. Продолжая функцию Ψ_c^{BBK} регулярным образом внутрь параболической области Ω_1^+ как функцию $\tilde{\Psi}_c^{BBK}$, мы находим коэффициенты разложения R_n в терминах скалярных произведений $\langle \Psi_n, \tilde{\Psi}_c^{BBK}\rangle_{\mathbb{R}^6}$. Как показано в работе [19], в старшем порядке справедливо равенство

$$\langle \Psi_n, \tilde{\Psi}_c^{BBK}\rangle_{\mathbb{R}^6} \sim \langle \Psi_n, \tilde{\Psi}_c^{BBK}\rangle_{D_{\mu,\nu}} = \langle \Psi_n, \Psi_c^{BBK}\rangle_{D_{\mu,\nu}}.$$

Таким образом, структура спектрального разложения в параболической области Ω_1^+ позволяет, согласно результатам работы [19], получить для функции $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ (8) следующее выражение:

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{1}{2p'_n} \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{k}}' \times$$
$$\times \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{p}}'_n \varphi_n(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{k}}')\psi_c^{eff}(\mathbf{y}, \mathbf{p}'_n) R_n(\mathbf{P}, \mathbf{p}'_n, \hat{\mathbf{k}}'), \tag{19}$$

$$(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \Omega_1^+, \quad p'_n = \sqrt{E + \frac{c_1^2}{4n^2}}.$$

Напомним, что функция φ_n имеет вид

$$\varphi_n(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{k}}) = \exp\left(-\frac{|c_1|}{2n}x\right) L_{n-1}\left(\frac{|c_1|}{n} x \sin^2\frac{\theta}{2}\right),$$

$$\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1 - \langle \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{x}}\rangle}{2}.$$

Выражение для ядра $R_n(\mathbf{P}, \mathbf{p}'_n, \hat{\mathbf{k}}')$ в смысле сказанного выше определено в работе [19]. Для полноты изложения приведем полученные в [19] результаты и список использованных обозначений:

$$\tilde{R}_n(\mathbf{P}, t, \varphi, \hat{\mathbf{k}}') = \frac{\varpi_0^{(in)(\mathbf{P})}}{n^3(B_2 \ln n + B_1)} \left(t - \frac{p}{\sqrt{E}}\right)_+^{ib} \times$$
$$\times \mathrm{ce}_{2l}(\varphi, s) Z^{in}(\mathbf{P}, \hat{\mathbf{k}}') + \frac{\varpi_0^{(out)}(\mathbf{P})}{n^3(B_2 \ln n + B_1)} \times$$
$$\times \left(t - \frac{p}{\sqrt{E}}\right)_+^{ib} \mathrm{ce}_{2l}(\varphi, s) Z^{out}(\mathbf{P}, \hat{\mathbf{k}}'). \tag{20}$$

Знак «тильда» в выражении для $\tilde{R}_n$ отражает переход к сферическим координатам для векторной переменной $\mathbf{p}'_n$. Здесь использованы также обозначения

$$Z^{in(out)}(\mathbf{P}, \hat{\mathbf{k}}') = -\frac{N_c^{(1)}\Gamma(3 + i\eta)}{k^{4+i\eta}} \times$$
$$\times \left[e^{\pi\eta/2} \langle \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{L}_{in(out)}(\mathbf{P})\rangle \Phi\left(3 + i\eta, 1, i\frac{|c_1|}{2k}(1 + \langle \hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}\rangle)\right) - \right.$$
$$\left. - e^{-\pi\eta/2} H^{in(out)}(\mathbf{P}, \hat{\mathbf{k}}') \right],$$

где

$$H^{in(out)}(\mathbf{P}, \hat{\mathbf{k}}') \equiv \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{x}} \langle \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{L}_{in,(out)}(\mathbf{P})\rangle \times$$
$$\times \Phi\left(3 + i\eta, 1, -i\frac{|c_1|}{2k}(1 - \langle \hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{x}}\rangle)\right) s_c(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{k}).$$

В выражении (20) $t = \langle \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}'_n\rangle$, переменная φ — угол между векторами $[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{k}}]$ и $[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{p}}'_n]$, отсчитываемый в положительном направлении при условии, что тройка векторов $[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{k}}]$, $[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{p}}'_n]$ и $\hat{\mathbf{p}}$ является положительно ориентированной,

$$\varpi_0^{in(out)}(\mathbf{P}) = B_0^{in(out)}(\mathbf{P}) \frac{|c_1|^3 E^{1+ib/2} e^{\pi b/2}}{2^5 \pi^2 A_0^{(2l)} \Gamma(1 + ib)}.$$

Здесь b — параметр, $b = \eta^{eff} - \omega$, $\omega = \eta_2 + \eta_3$, η_j $(j = 1, 2, 3)$ и η^{eff} — соответствующие параметры Зоммерфельда. Обозначение $\left(t - p/\sqrt{E}\right)_+^{ib}$ введено для обобщенной функции χ_+^λ [25]. Функция $\mathrm{ce}_{2l}(\varphi, s)$ — функция Матье [26]:

$$\mathrm{ce}_{2l}(\varphi, s) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r}^{(2l)} \cos(2r\varphi), \tag{21}$$

коэффициенты разложения $A_{2r}^{(2l)}$ определяются рекуррентным образом согласно выражению (8.60) в [24], s — некоторый вещественный параметр.

Использованы также обозначения

$$B_0^{in}(\mathbf{P}) = A_0 \Gamma(-i\eta_2)\Gamma(-i\eta_3) e^{-\pi\omega/2} \times$$
$$\times (1 - e^{2\pi\eta_2})(1 - e^{2\pi\eta_3}) \times$$
$$\times \left[\frac{\sqrt{3}}{2} k_2 \left(1 - \langle \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{k}}_2\rangle\right)\right]^{i\eta_2} \left[\frac{\sqrt{3}}{2} k_3 \left(1 + \langle \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{k}}_3\rangle\right)\right]^{i\eta_3},$$

$$\mathbf{L}_{in}(\mathbf{P}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\eta_2\frac{\hat{\mathbf{k}}_2-\hat{\mathbf{p}}}{1-\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_2\rangle}+\eta_3\frac{\hat{\mathbf{k}}_3+\hat{\mathbf{p}}}{1+\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_3\rangle}\right),$$

$$B_0^{out}(\mathbf{P}) = A_0\Gamma(-i\eta_2)\Gamma(-i\eta_3)e^{-\pi\omega/2}\times \times(1-e^{2\pi\eta_2})(1-e^{2\pi\eta_3})\times \times\left[\frac{\sqrt{3}}{2}k_2\left(1+\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_2\rangle\right)\right]^{i\eta_2}\left[\frac{\sqrt{3}}{2}k_3\left(1-\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_3\rangle\right)\right]^{i\eta_3},$$

$$\mathbf{L}_{out}(\mathbf{P}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\eta_2\frac{\hat{\mathbf{k}}_2+\hat{\mathbf{p}}}{1+\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_2\rangle}+\eta_3\frac{\hat{\mathbf{k}}_3-\hat{\mathbf{p}}}{1-\langle\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{k}}_3\rangle}\right),$$

где $A_0 = -N_0^{(23)}/4\pi^2$. Постоянная $N_0^{(23)} = N_c^{(2)}N_c^{(3)}$ выражается через составляющие

$$N_c^{(j)} = (2\pi)^{-3/2}e^{-\pi\eta_j/2}\Gamma(1+i\eta_j).$$

Подставляя выражение (20) с соответствующими обозначениями в представление (19) и выделяя основной вклад, согласно работам [9, 19] получаем

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})\times \times\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n^4(B_2\ln n+B_1)}(8\pi n|c_1|t_n)^{-1/2}\times \times\left(\frac{|c_1|t_n}{4}\right)^{-1/4}\left(1-\frac{|c_1|t_n}{4}\right)^{-1/4}\times \times\cos\left(2n\left[\arccos\sqrt{\frac{|c_1|t_n}{4}}-\sqrt{\frac{|c_1|t_n}{4}}\times \times\sqrt{1-\frac{|c_1|t_n}{4}}\right]\right) \quad (22)$$

в терминах обозначения $t_n = x/n^2$. Здесь B_1 и B_2 — вещественные постоянные. Функция $U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})$ — гладкая функция своих аргументов. Мы не приводим здесь ее явное представление вследствие громоздкости выражения. Для изложения дальнейших результатов нам будет достаточно упомянутых выше свойств функции U. При построении выражения (22) нам нужна асимптотика полиномов Лагерра по переменной x при больших значениях индекса «n». Как было показано в работе [22], вклад в асимптотику такого типа вносят четыре области изменения переменной x (в зависимости от соотношения величин x и n): окрестности нуля, область колебаний, переходная область и область монотонности. Отметим, что основной вклад в выражение (22) вносит область колебаний. В работе [9] было показано, что вклады областей окрестности нуля, переходной и монотонности являются лишь поправочными.

Выделим теперь, следуя результатам работы [9], асимптотику этого выражения.

4.4. Выделение асимптотики функции $\tilde{\Psi}_c^{acc}$

Сформулируем следующее утверждение: используя метод Пуассона, можно переписать выражение (22) в виде

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})\frac{1}{2\sqrt{\pi}R^{3/2}}\times \times\sum_{l=-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\int_0^d ds\frac{\exp[iR\Phi_l^+(s)]+\exp[iR\Phi_l^-(s)]}{B_1+B_2\ln\left(\frac{R}{2\sqrt{s}}\right)}\times \times\frac{\chi_d^{\delta}(s)}{(1-s)^{1/4}}, \quad R\equiv\sqrt{|c_1|x}, \quad x\gg 1. \quad (23)$$

Мы используем здесь обозначения

$$\Phi_l^{\pm}(s) \equiv \frac{\pi}{\sqrt{s}}\left(l+\frac{1}{2}\right)\pm \pm\frac{1}{\sqrt{s}}\left(\arccos\left(\sqrt{s}\right)-\sqrt{s(1-s)}\right), \quad (24)$$

функция $\chi_d^{\delta}(s)$ является срезающей функцией в круге радиуса δ с центром в точке $s=d$ в комплексной плоскости s. Выход с вещественной оси в комплексную плоскость s окажется эффективным в дальнейших вычислениях. Вещественные постоянные B_1, B_2 были определены в работе [9] при решении модельной задачи:

$$B_1 = -0.31, \quad B_2 = -0.67.$$

Уводя контур интегрирования по переменной s в верхнюю или нижнюю полуплоскость, нетрудно показать, что только слагаемые с $l=0$ и $l=-1$ порождают ненулевой вклад в исходное выражение. Вклад остальных слагаемых оказывается экспоненциально малым. Это означает, что основной вклад в выражение (23) имеет вид

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) \sim U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})\frac{1}{4\sqrt{\pi}R^{5/2}}\hat{\Upsilon}(R)+ +U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})\frac{1}{4\sqrt{\pi}R^{5/2}}\hat{\Upsilon}^*(R), \quad (25)$$

где

$$\hat{\Upsilon}(R) \equiv -ie^{2iR}\int_0^{\infty}\frac{dte^{-t/3}}{C(R)-D\ln t}\left(1+O\left(\frac{1}{R}\right)\right). \quad (26)$$

Здесь использовано обозначение

$$C(R) = B_1+\frac{3}{2}B_2\ln R-B_2\ln 2+iB_2\frac{\pi}{4}, \quad D = \frac{1}{2}B_2. \quad (27)$$

Таким образом, мы приходим к выводу, что в областях типа (11) конфигурационного пространства, в которых справедливо почти разделение переменных в окрестностях экранов σ при $y \gg x$ (где $\mathbf{y}$ и $\mathbf{x}$ — якобиевы переменные, отвечающие выделенной парной подсистеме с потенциалом кулоновского притяжения), полный вклад парных состояний дискретного спектра в трехчастичную собственную функцию непрерывного спектра имеет вид

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}})\frac{\sin(2R)}{2\sqrt{\pi}R^{5/2}} \times \\ \times \int\limits_0^\infty \frac{dte^{-t/3}}{C(R)-D\ln t}\left(1+O\left(\frac{1}{R}\right)\right). \quad (28)$$

Проводя дальнейшие упрощения, получим

$$\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = \frac{3}{2\sqrt{\pi}}U(\mathbf{y},\mathbf{P},-\hat{\mathbf{x}}) \times \\ \times \frac{\sin(2\sqrt{|c_1|x})}{C\left(\sqrt{|c_1|x}\right)(|c_1|x)^{5/4}}\left(1+O\left(\frac{1}{\ln(|c_1|x)}\right)\right) \quad (29)$$

в области, ограниченной соотношением

$$1 \ll x \le \frac{4(N+1)^2}{|c_1|}, \quad N \gg 1, \quad y^\mu < x < y^\nu, \\ \frac{1}{2} < \mu < \nu < 1. \quad (30)$$

Соотношение (30) позволяет установить ограничения на величину параметра N. Заменяя величину x на y^ν и помня, что гиперрадиус системы

$$\rho = y\left(1+O\left(\frac{x^2}{2y^2}\right)\right),$$

получаем искомое ограничение

$$N \ge \frac{\sqrt{|c|}}{2}\rho^{\nu/2}. \quad (31)$$

Отметим, что чем больше парных состояний будет учтено явно в сумме (5) (т. е. с ростом параметра N), тем более широкой будет область применимости выражения (29). При этом само выражение (29) окажется старшим порядком асимптотики при больших значениях координаты x, а область применимости асимптотики с ростом N будет смещаться в область больших значений x. С другой стороны, структура асимптотики (29) не зависит явно от параметра обрезания ряда N и является, таким образом, координатной асимптотикой по переменной x (отвечающей полному кулоновскому дискретному спектру оператора Шредингера подсистемы $\alpha = 1$) в асимптотической области Ω_1^+. Отметим, что вклад непрерывного спектра парной подсистемы с индексом $\alpha = 1$ в области Ω_1^+ описывается независимо (вследствие ортогональности вкладов дискретного и непрерывного спектров в спектральном разложении) методами работ [17, 20].

Отметим также осцилляторный характер и медленное степенное убывание на бесконечности полученного выражения, что делает необходимым учет данного асимптотического вклада на фоне экспоненциально убывающих явно учтенных членов суммы (5).

4.5. Положение $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ в иерархии асимптотических вкладов

Необходимо сказать несколько слов о месте полученного выражения $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ в иерархии вкладов различной природы, представляющих асимптотику решения типа искаженной плоской волны в области Ω_1^+, а точнее — в переходной области $D_{\mu,\nu}^1$ (12). Напомним, что область $D_{\mu,\nu}^1$ характеризуется следующим соотношением координат Якоби:

$$y \gg 1, \quad 1 \ll x \ll y, \quad y^\mu < x < y^\nu, \\ \frac{1}{2} < \mu < \nu < 1. \quad (32)$$

Асимптотика решения в этой области описывается выражением (15). Вклад непрерывного спектра оператора Шредингера (16) парной подсистемы (первое слагаемое в выражении (15)) является старшим. Как уже было упомянуто выше, этот вклад описан, например, в работах [17, 20]. Для его выделения рассматривалась слабая асимптотика приближенного решения по большой переменной y. При этом для согласования слабых асимптотик решений Ψ_c^{BBK} и Ψ^{sep} оказывалось достаточным фиксировать коэффициенты порядка $1/y$ и порядка x/y^2, пренебрегая членом следующего порядка малости $1/y^2$.

Полученные нами выражения (28), (29) для $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ также записываются в виде слабой асимптотики по большой переменной y. Одновременно это выражение отвечает асимптотике по второй, подчиненной, координате Якоби x второго слагаемого в выражении (15). Тем самым оно отражает вклад в асимптотику трехчастичного состояния типа искаженной плоской волны спектральной окрестности точки накопления дискретного спектра выделенной парной подсистемы. Определим переходную область $D_{\mu,\nu}^1$ более точно:

$$\frac{1}{2} < \nu < \frac{4}{5}.$$

В этом случае, согласно выражению (29), мы фиксируем коэффициент в слабой асимптотике по y, убывающей как

$$\frac{1}{y^2} < \frac{1}{yx^{5/4}} < \frac{1}{y^{13/8}}.$$

Таким образом, найденный нами асимптотический вклад $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ является всюду в области $D^1_{\mu,\nu}$ поправочным по отношению ко вкладу непрерывного спектра оператора Шредингера парной подсистемы, но старшим по отношению к членам, которыми мы пренебрегли в процедуре согласования асимптотик.

Отметим, что при выходе из области $D^1_{\mu,\nu}$ в область Ω_{BBK} вклад выражения $\tilde{\Psi}_c^{acc}$ становится пренебрежимо малым.

4.6. Формулировка результата

Мы выделили асимптотику по переменной x разложения решения (ведущего себя в области Ω_{BBK}, как искаженная шестимерная плоская волна Ψ_c^{BBK}) по состояниям дискретного спектра парной подсистемы в области Ω_1^+.

Таким образом, полное представление решения типа Ψ_c^{BBK}, продолженного из области Ω_{BBK} в область Ω_1^+, состоит из трех вкладов. Первый вклад отвечает непрерывному спектру парной подсистемы $\alpha = 1$ (первое интегральное слагаемое в представлении (15)). Второй вклад представляет собой конечный набор интегральных слагаемых, отвечающих разложению по состояниям дискретного спектра подсистемы с главными квантовыми числами $n = 1, 2, \ldots, N_1$ (суммирование по конечному набору значений главного квантового числа n во втором слагаемом в представлении (15)). Третий вклад (суммирование по оставшемуся бесконечному набору значений главного квантового числа n во втором слагаемом в представлении (15)) отвечает разложению по бесконечному набору состояний дискретного спектра подсистемы с главными квантовыми числами $n > N_1$ (описан в выражении (29)). Как уже говорилось выше, структура первого вклада (непрерывный спектр парной подсистемы) была подробно исследована в работах [15, 17].

Рассмотрим слабую асимптотику решения уравнения Шредингера (1) типа искаженной шестимерной плоской волны Ψ_c, определенного в области Ω_{BBK} как Ψ_c^{BBK} и продолженного в область Ω_1^+ как Ψ^{sep}. Для этого проинтегрируем функцию Ψ_c с некоторой гладкой функцией $a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$ по пятимерной сфере. В области Ω_{BBK} получим следующее выражение:

$$\int\limits_{\mathbb{S}^5} d\tau \Psi_c(\mathbf{X}, \mathbf{P}') a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') = \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{k}}' \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{p}}' \times$$
$$\times \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} d\psi \Psi_c(\mathbf{X}, \mathbf{P}') a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}'), \quad X \to \infty. \quad (33)$$

Мы использовали здесь обозначение $\psi = \operatorname{arctg}(k'/p')$. Выражение (33) содержит интеграл по всем допустимым состояниям шестимерного импульса $\mathbf{P}'$, $P'^2 = k'^2 + p'^2 = E$, отвечающим искаженной плоской волне в асимптотической области Ω_{BBK}, где $\Psi_c \sim \Psi_c^{BBK}$. Такой интеграл порождает в асимптотической области Ω_{BBK} в старшем порядке суперпозицию расходящейся и сходящейся шестимерных волн с гладкими амплитудами, вид которых определяется видом функции $a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$:

$$\int\limits_{\mathbb{S}^5} d\tau \Psi_c^{BBK}(\mathbf{X}, \mathbf{P}') a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')|_{\Omega_{BBK}} \sim$$
$$\sim \tilde{A}_+(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{\exp\left[i\sqrt{E}X + iW_0(\mathbf{X}, \mathbf{P})\right]}{X^{5/2}} +$$
$$+ \tilde{A}_-(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{\exp\left[-i\sqrt{E}X - iW_0(\mathbf{X}, \mathbf{P})\right]}{X^{5/2}}. \quad (34)$$

Мы используем при интегрировании метод стационарной фазы. Асимптотика вырожденных гипергеометрических функций в выражении для Ψ_c^{BBK} порождает лишь логарифмическую поправку к главному линейному члену $\langle \mathbf{P}', \mathbf{X} \rangle$ с большим параметром X. Поэтому основной вклад в интеграл (34) дает стационарная точка $\psi_0 = \arcsin(x/X)$.

В промежуточной области $D^1_{\mu,\nu}$, определенной в выражении (12), справедливо (со сколь угодно хорошей точностью) приближенное равенство

$$\Psi_c^{BBK}(\mathbf{X}, \mathbf{P}) \sim \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k}' \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}') \psi_c^{eff}(\mathbf{y}, \mathbf{p}') \times$$
$$\times \delta(k'^2 + p'^2 - E) R_c(\mathbf{P}, \mathbf{P}') + \sum_{n=1}^{N_1} \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{k}}' \times$$
$$\times \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{p}' \varphi_n(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{k}}') \psi_c^{eff}(\mathbf{y}, \mathbf{p}') \delta\left(p'^2 - \frac{c_1^2}{4n^2} - E\right) \times$$
$$\times R_n(\mathbf{P}, \mathbf{p}', \hat{\mathbf{k}}') + \tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X}, \mathbf{P}), \quad (35)$$

где функция $\tilde{\Psi}_c^{acc}(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ определена в выражении (29).

Подставим теперь правую часть равенства (35) в представление (34), сохраняя в полученной слабой асимптотике лишь расходящуюся волну. Получим равенство

$$\tilde{A}_+(\hat{\mathbf{X}},\mathbf{P})\frac{\exp\left[i\sqrt{E}X+iW_0(\mathbf{X},\mathbf{P})\right]}{X^{5/2}}=\int\limits_{\mathbb{R}^3}d\mathbf{k}'\times$$
$$\times\int\limits_{\mathbb{R}^3}d\mathbf{p}'\psi(\mathbf{x},\mathbf{k}')\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}')\delta({k'}^2+{p'}^2-E)B_c^+(\mathbf{P},\mathbf{P}')+$$
$$+\sum_{n=1}^{N_1}\int\limits_{\mathbb{S}^2}d\hat{\mathbf{k}}'\int\limits_{\mathbb{R}^3}d\mathbf{p}'\varphi_n(\mathbf{x},\hat{\mathbf{k}}')\psi_c^{eff}(\mathbf{y},\mathbf{p}')\times$$
$$\times\delta\left({p'}^2-\frac{c_1^2}{4n^2}-E\right)B_n^+(\mathbf{P},\mathbf{p}',\hat{\mathbf{k}}')+$$
$$+\frac{3}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sin(2\sqrt{|c_1|x}\,)}{C(\sqrt{|c_1|x}\,)(|c_1|x)^{5/4}}\times$$
$$\times\int\limits_{\mathbb{S}^5}d\tau U^{out}(\mathbf{y},P\hat{\mathbf{P}}'',-\hat{\mathbf{x}})a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}''). \quad (36)$$

Мы используем обозначения

$$B_c^+(\mathbf{P},\mathbf{P}')=\int\limits_{\mathbb{S}^5}d\tau R_c^{out}(P\hat{\mathbf{P}}'',\mathbf{P}')a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}''),$$

$$B_n^+(\mathbf{P},\mathbf{p}',\hat{\mathbf{k}}')=\int\limits_{\mathbb{S}^5}d\tau R_n^{out}(P\hat{\mathbf{P}}'',\mathbf{p}',\hat{\mathbf{k}}')a_1^{acc}(\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}'').$$

Таким образом, согласно выражению (36), расходящаяся искаженная шестимерная волна с произвольной гладкой амплитудой представима в области $D^1_{\mu,\nu}$ в виде разложения по конечному базису со сколь угодно хорошей точностью. Поскольку структура базиса не меняется при переходе к слабым асимптотикам, продолжение внутрь области Ω_1^+ осуществляется автоматически.

На основании сказанного можно сделать вывод, что состояние $\tilde{\Psi}^{acc}_{c,1}$ (29) по структуре совпадает с определенным выше в (5) выражением для $\Psi^{acc}_{c,1}$.

Таким образом, основной результат вспомогательной задачи получен.

4.7. Обсуждение

Акцентируем внимание на особенностях полученного результата. Частично эти особенности уже обсуждались выше. Выражение (28) возникло в процессе согласования двух приближенных решений уравнения Шредингера. Однако одно из этих решений (Ψ_c^{BBK} — решение типа искаженной плоской волны) может уточняться, например, согласно процедуре, предложенной в работе [23]. Короткодействующая поправка к потенциалу в асимптотических областях Ω_α^+ может быть сделана сколь угодно малой. Таким образом, описанная выше процедура позволяет продолжить собственные функции абсолютно непрерывного спектра типа искаженных плоских волн (а также их слабые асимптотики) из асимптотической области конфигурационного пространства Ω_{BBK} (10) в асимптотические области вида Ω_α^+ (11).

В случае, когда в паре с индексом «α» кулоновский потенциал является притягивающим, выше изложена процедура описания вклада дискретного кулоновского спектра парной подсистемы в асимптотику продолжения искаженных плоских волн (шестимерных расходящихся искаженных волн) в область Ω_α^+. Процедура описания вклада непрерывного кулоновского спектра парной подсистемы в асимптотику продолжения искаженных плоских волн (искаженных расходящихся волн) в область Ω_α^+ была дана в работах [15, 17]. В случае, когда индекс «α» соответствует паре одноименно заряженных частиц (случай кулоновского отталкивания), очевидно, нужно воспользоваться лишь процедурой описания вклада непрерывного спектра.

Наиболее важным сейчас для нас является тот факт, что при описании процедуры построения вклада дискретного спектра парной подсистемы в асимптотику продолжения искаженных расходящихся волн в области Ω_α^+ выделяется совокупный вклад парных высоковозбужденных состояний (эффективное состояние) и тем самым полный базис состояний оказывается конечным. Размерность такого эффективного базиса также обсуждалась выше.

Ниже излагается пример возможного приложения описанной выше процедуры к численным расчетам характеристик физической системы.

5. ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ

Для приложения метода к численным расчетам мы вернемся к асимптотическим граничным условиям (2), понимая их в смысле изложенного выше. Приведем еще одно замечание, которое касается первого слагаемого в выражении (2), отвечающего начальному состоянию. Будем в дальнейшем считать, что плотность $a^0_{l\sigma}(\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}')$ является известной функцией и тем самым начальное состояние системы определено.

Перейдем к построению системы связей между плотностями $a_{n\alpha}(\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}')$ и амплитудой $A(\hat{\mathbf{X}},\mathbf{P})$.

5.1. Построение уравнений для неизвестных плотностей $a_{n\alpha}$

Из соображений удобства введем следующую систему обозначений:

$$\psi_{n\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha) = \exp\left[i\langle \mathbf{p}_{n\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle + iw_{n\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p_{n\alpha})\right] \times \\ \times \varphi_{n\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}_{n\alpha}),$$

$$\tilde{\psi}_{n\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha) = \psi_{n\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\zeta(\rho), \quad \rho = \sqrt{x^2+y^2}.$$

Здесь функция $\zeta(\rho) \in C^2_{[0,\infty)}$ является так называемой срезающей функцией гиперрадиуса ρ и определяется следующим образом:

$$\zeta(\rho) = \begin{cases} 0 \text{ при } 0 \le \rho \le \rho_1 - \varepsilon, \\ \text{монотонно возрастает при} \\ \rho_1 - \varepsilon \le \rho \le \rho_2 + \varepsilon, \\ 1 \text{ при } \rho_2 + \varepsilon \le \rho \le \infty. \end{cases} \tag{37}$$

Здесь $1 \ll \rho_1 < \rho_2 < \infty$, $0 < \varepsilon < 1$.

Рассмотрим систему уравнений

$$\begin{aligned} (H-E)\Psi &= 0, \\ (H-E)\tilde{\psi}^*_{m\alpha} &= -Q_{m\alpha}, \end{aligned} \tag{38}$$

где $Q_{m\alpha}$ — невязка функции $\tilde{\psi}^*_{m\alpha}$, определенной выше. Домножим первое уравнение системы (38) на функцию $\tilde{\psi}^*_{m\alpha}$, а второе — на функцию Ψ и вычтем первое уравнение из второго. Проинтегрируем полученное равенство в шестимерном шаре большого радиуса ρ (область D). Воспользовавшись формулой Грина, придем к уравнению

$$\int\limits_{\partial D} \left(\tilde{\psi}^*_{m\alpha}\frac{\partial}{\partial n}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial n}\tilde{\psi}^*_{m\alpha}\right) d\tau = \\ = -\int\limits_D Q_{m\alpha}\Psi d\mathbf{X}. \tag{39}$$

Повторив проведенную процедуру в случае $m = 1, 2, \ldots, N_\alpha+1$, получим систему $N_\alpha+1$ уравнений вида (39). Отметим, что в смысле сказанного мы рассматриваем в качестве базисной функции с индексом $N_\alpha+1$ эффективное состояние, определенное выше:

$$\psi_{N_\alpha+1\,\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha) \equiv \Psi^{acc}_{c\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha).$$

Отметим также, что интеграл по ∂D является интегралом по границе области D, т. е. интегралом по поверхности пятимерной сферы радиуса ρ. Оператор $\partial/\partial n$ является оператором дифференцирования по нормали к поверхности интегрирования. В этом смысле мы можем заменить оператор $\partial/\partial n$ оператором $\partial/\partial X$.

Положим вначале $\alpha \ne \sigma$. Подставляя представление (2) в уравнение (39), получаем

$$\sum_{j=1}^{N_\alpha+1} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') \int\limits_{\partial D} d\tau \times \\ \times \left[\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\frac{\partial}{\partial n}\psi_{j\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}'_\alpha) - \psi_{j\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}'_\alpha) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial n}\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\right] + \int\limits_{\partial D} d\tau A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \times \\ \times \left\{\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\frac{\partial}{\partial n}\frac{\exp\left(i\sqrt{E}X + iW_0\right)}{X^{5/2}} - \right. \\ \left. - \frac{\exp\left(i\sqrt{E}X + iW_0\right)}{X^{5/2}}\frac{\partial}{\partial n}\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\right\} = \\ = -\int\limits_D d\mathbf{X}\, A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})\frac{\exp\left(i\sqrt{E}X + iW_0\right)}{X^{5/2}} Q_{m\alpha}(\mathbf{X}, \mathbf{P}) - \\ - \sum_{j=1}^{N_\alpha+1} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') \times \\ \times \int\limits_D d\mathbf{X} Q_{m\alpha}(\mathbf{X}, \mathbf{P})\psi_{j\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}'_\alpha). \tag{40}$$

Напомним, что расходящаяся шестимерная искаженная волна должна быть модифицирована с помощью замены (4) в областях Ω^+_α, как уже было отмечено выше.

Полагая $m = 1, 2, \ldots, N_\alpha+1$, получим систему $N_\alpha+1$ тождеств вида (40). Будем рассматривать систему тождеств (40) как систему уравнений относительно плотностей $a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}')$, $j = 1, 2, \ldots, N_\alpha+1$. Отметим, что полученная система уравнений может рассматриваться как матричное уравнение Фредгольма второго рода с компактным ядром, что позволяет доказать существование и единственность решения.

Простые вычисления показывают, что элементарная площадь поверхности пятимерной сферы радиуса ρ имеет вид

$$d\tau = \rho^5\cos^2\omega\sin^2\omega\sin\theta_x \times \\ \times \sin\theta_y d\omega d\theta_x d\varphi_x d\theta_y d\varphi_y. \tag{41}$$

Здесь пары переменных θ_x, φ_x и θ_y, φ_y являются угловыми переменными, определяющими положение

точки на двумерных сферах радиусов соответственно x_α и y_α. Здесь введены также обозначения

$$x_\alpha = \rho \sin\omega, \quad y_\alpha = \rho\cos\omega, \quad 0 \le \omega \le \frac{\pi}{2}.$$

Отметим, что все слагаемые в первой сумме уравнения (40) экспоненциально убывают по переменной $\mathbf{x}_\alpha$, переменная $\rho \gg 1$. Это ведет к существенным упрощениям в старшем порядке выражений:

$$0 \le \omega \le \varepsilon \ll 1, \quad \frac{\partial}{\partial n}(\ldots) \sim \langle \nabla(\ldots), \hat{\mathbf{y}}\rangle. \tag{42}$$

Проинтегрируем первые два слагаемых в левой части уравнения (40) по $d\hat{\mathbf{p}}'_\alpha$, принимая в расчет сказанное выше:

$$\begin{aligned}\Xi = \sum_{j=1}^{N_\alpha+1} \int\limits_{\mathbb{S}^2\times\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{P}}' a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}') \int\limits_{\partial D} d\tau \times \\ \times \left[\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\frac{\partial}{\partial n}\psi_{j\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}'_\alpha) - \right. \\ \left. - \psi_{j\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}'_\alpha)\frac{\partial}{\partial n}\tilde{\psi}^*_{m\alpha}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{P}_\alpha)\right] \sim \\ \sim \sum_{j=1}^{N_\alpha+1} \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha} \frac{2\pi}{\rho}\left(1 + \frac{p_{m\alpha}}{p'_{j\alpha}}\right) \times \\ \times \int\limits_{\partial D} d\tau\ \varphi_{j\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha})\ \varphi_{m\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}_{m\alpha}) a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha) \times \\ \times \exp\left\{i(p'_{j\alpha} y_\alpha - \langle \mathbf{p}_{m\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle)\right\} \times \\ \times \exp\left\{i[w_{j\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p'_{j\alpha}) - w_{m\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p_{m\alpha})]\right\}.\end{aligned} \tag{43}$$

Анализ интеграла по $d\tau$ в $\mathbb{S}^5$ проведем с помощью представления (41), заменяя в старшем порядке $\sin\omega \sim \omega$, $\cos\omega \sim 1$, при условии $\varepsilon\rho \gg 1$ (42).

Таким образом,

$$\begin{aligned}\Sigma \equiv \int\limits_{\partial D} d\tau\ \varphi_{j\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha})\ \varphi_{m\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, \hat{\mathbf{k}}_{m\alpha}) \times \\ \times a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha)\ \exp\left[i(p'_{j\alpha} y_\alpha - \langle \mathbf{p}_{m\alpha}, \mathbf{y}_\alpha\rangle)\right] \times \\ \times \exp\left\{i[w_{j\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p'_{j\alpha}) - w_{m\alpha}(\mathbf{y}_\alpha, p_{m\alpha})]\right\} \sim \\ \sim \rho^5 \int\limits_0^\varepsilon \omega^2 d\omega \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\phi_x \sin\theta_x d\theta_x \times \\ \times \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\phi_y \sin\theta_y d\theta_y \varphi_{j\alpha}(\rho\omega\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}) \times \\ \times \varphi_{m\alpha}(\rho\omega\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{k}}_{m\alpha}) a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha) \times \\ \times \exp\left(i(\rho p'_{j\alpha} - \rho\langle \mathbf{p}_{m\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha\rangle)\right] \times \\ \times \exp\left\{i[w_{j\alpha}(\rho, p'_{j\alpha}) - w_{m\alpha}(\rho, p_{m\alpha})]\right\}.\end{aligned} \tag{44}$$

После замены переменной $t = \rho\omega$ и удобного в данном случае переобозначения $\hat{\mathbf{t}} \equiv \hat{\mathbf{x}}$ выражение (44) факторизуется следующим образом:

$$\Sigma \sim \rho^2 \Sigma^{(1)} \Sigma^{(2)}. \tag{45}$$

Здесь

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1)} \equiv \int\limits_0^\infty t^2 dt \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{t}} \exp\left(-\frac{t}{2j}|c_\alpha|\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{t}{2m}|c_\alpha|\right) L_{j-1}\left(\frac{t|c_\alpha|}{2j}(1 - \langle \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{t}}\rangle)\right) \times \\ \times L_{m-1}\left(\frac{t|c_\alpha|}{2m}(1 - \langle \hat{\mathbf{k}}_{m\alpha}, \hat{\mathbf{t}}\rangle)\right),\end{aligned} \tag{46}$$

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2)} \equiv \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{y}} a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha) \times \\ \times \exp\left[i(\rho p'_{j\alpha} - \rho\langle \mathbf{p}_{m\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha\rangle)\right] \times \\ \times \exp\left\{i[w_{j\alpha}(\rho, p'_{j\alpha}) - w_{m\alpha}(\rho, p_{m\alpha})]\right\}.\end{aligned} \tag{47}$$

Заметим, что интегралы $\Sigma^{(1)}$ (46) являются соотношением ортогональности по индексам «j» и «m» как интегралы от произведения собственных функций дискретного спектра парного кулоновского оператора Шредингера, отвечающих различным главным квантовым числам. Это свойство подробно обсуждалось в работе [19]. Как было показано в работах [9,19], при больших значениях индекса «m» (или «j») ортогональность асимптотически выполняется и по направлению. Таким образом, при $m \gg 1$ или(и) $j \gg 1$

$$\Sigma^{(1)} \sim C_m \delta_{mj} \delta(\hat{\mathbf{k}}'_{m\alpha} - \hat{\mathbf{k}}_{m\alpha}), \tag{48}$$

где C_m — некоторая постоянная, зависящая от главного квантового числа и приведенная в работе [19]. Интеграл (47) описывается методом стационарной фазы следующим образом:

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2)} \sim \int\limits_{\mathbb{S}^2} d\hat{\mathbf{y}}\ \exp\left[i(\rho p'_{j\alpha} - \rho\langle \mathbf{p}_{m\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha\rangle)\right] \times \\ \times \exp\left\{i[w_{j\alpha}(\rho, p'_{j\alpha}) - w_{m\alpha}(\rho, p_{m\alpha})]\right\} \times \\ \times a_{j\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{j\alpha}, \hat{\mathbf{y}}_\alpha)|_{j=m} \sim \\ \sim \frac{2\pi i}{p_{m\alpha}\rho}\ a_{m\alpha}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{k}}'_{m\alpha}, \hat{\mathbf{p}}_{m\alpha}).\end{aligned} \tag{49}$$

Подставляя выражения (48) и (49) в выражение (43) для Ξ, получаем

$$\Xi \sim \frac{8\pi^2}{\sqrt{E}}\, i C_m a_{m\alpha}(\hat{\mathbf{P}}_\alpha, \hat{\mathbf{P}}_\alpha), \tag{50}$$

что определяет асимптотически (по номеру главного квантового числа) диагональную структуру оператора в уравнении (40), если рассматривать это равенство как уравнение относительно плотностей $a_{m\alpha}(\hat{\mathbf{P}}_\alpha, \hat{\mathbf{P}}_\alpha)$, $m = 1, 2, \ldots, N_\alpha+1$, $N_\alpha \gg 1$. Нетрудно показать, например, аналогично тому, как это было продемонстрировано в (41)–(50) для первого слагаемого в левой части (40), что при $\rho \to \infty$ остальные слагаемые уравнения (40) в старшем порядке также не зависят от ρ.

Возвращаясь к системе уравнений (40) для векторной функции

$$\hat{\mathbf{a}}_\alpha = \begin{pmatrix} a_{1\alpha} \\ a_{2\alpha} \\ \ldots \\ a_{N_\alpha+1\,\alpha} \end{pmatrix}, \tag{51}$$

получим уравнение следующего вида:

$$\hat{\mathbf{a}}_\alpha + \mathbf{B}_\alpha \hat{\mathbf{a}}_\alpha = \mathbf{S}_\alpha. \tag{52}$$

Здесь $\mathbf{B}_\alpha$ — ограниченный матрично-значный интегральный оператор с размерностью матрицы $(N_\alpha + 1) \times (N_\alpha + 1)$. Матричные элементы этого оператора являются интегральными операторами с ядрами, заданными на пятимерной сфере (на компактном носителе), а $\mathbf{S}_\alpha$ — неоднородный член. Полученное уравнение является интегральным уравнением Фредгольма второго рода. Описанные выше свойства ядер гарантируют существование и единственность решения этого уравнения.

Отметим, что при $\alpha = \sigma$ уравнение (40), а следовательно, и уравнение (52) будут содержать дополнительные члены, отвечающие вкладу начального состояния. Однако принципиально структура уравнения типа (52) меняться не будет.

Совокупность интегральных уравнений вида (52) при $\alpha = \sigma$ и $\alpha = \beta \neq \sigma$ позволяет установить связь между вектор-функцией $\hat{\mathbf{a}}_{\alpha(\beta)}$ (51) и амплитудой $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ рассеяния $2 \to 3$. Здесь индексы «σ» и «β» нумеруют две возможные парные подсистемы с кулоновскими потенциалами притяжения.

Запишем решение уравнения (52) как

$$\hat{\mathbf{a}}_\alpha = \hat{\Lambda}_\alpha A, \tag{53}$$

где оператор $\hat{\Lambda}_\alpha$ действует как матрично-значный интегральный оператор на единичной сфере $\mathbb{S}^5_X$. При этом, как было упомянуто выше, мы различаем случаи $\alpha = \sigma$ и $\alpha = \beta \neq \sigma$.

6. ПОСТРОЕНИЕ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ АМПЛИТУДЫ $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$

Проведем итеративную самосогласованную процедуру построения решения задачи рассеяния. Эта процедура содержит несколько шагов.

6.1. Первое приближение

В качестве первого приближения зададим полное распределение плотностей $a_{j\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{P}')$ и $a_{j\sigma}(\mathbf{P}, \mathbf{P}')$ следующим образом:

$$a_{j\alpha} = 0, \quad \alpha \neq \sigma, \quad 1 \le j \le N_\alpha + 1, \tag{54}$$

$$a_{j\sigma} = 0, \quad 1 \le j \le N_\beta + 1, \quad j \neq l; \quad a_{l\sigma} = a^0_{l\sigma}, \tag{55}$$

где плотность $a^0_{l\sigma}$ соответствует фиксированной плотности падающей волны, описанной в уравнении (2).

Определив полный набор плотностей, мы, таким образом, фиксируем в первом приближении полный набор амплитуд рассеяния процессов $2 \to 2$ в выражениях для $\Psi^{(0)}$ (2) и $\Psi^{(02)}$ (5).

Будем искать решение уравнения (1) в виде

$$\Psi = \chi + \varphi. \tag{56}$$

Здесь первое слагаемое χ содержит асимптотику всех возможных парных каналов рассеяния на бесконечности в конфигурационном пространстве:

$$\chi = \zeta(\rho) \left(\Psi^{(0)} + \Psi^{(02)} \right). \tag{57}$$

Срезающая функция $\zeta(\rho)$ описана в уравнении (37). Функция φ, как следует из уравнения (56), является дополнением определенной выше функции χ до точного решения Ψ задачи рассеяния. Согласно приведенному в (2) анзацу, асимптотика φ на бесконечности совпадает с асимптотикой расходящейся шестимерной сферической волны и тем самым с выражением для $\Psi^{(03)}$ (2). Поскольку параметры ρ_1, ρ_2 срезающей функции ζ велики, выражение для $\Psi^{(02)}$ закономерно является асимптотическим (2). Следовательно, выражение для χ (57) полностью определено.

Построим теперь граничную задачу в шестимерном шаре большого радиуса ρ:

$$\begin{gathered} (H - E)\varphi = -Q, \quad X \le \rho, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial n} - i \left(\sqrt{E} - \frac{1}{2\sqrt{E}} \left[\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{c_\alpha}{x_\alpha} \right] \right) \varphi|_{X=\rho} = \\ = O\left(\rho^{-7/2}\right), \quad \mathbf{X} \notin \left(\mathbb{S}^5_\rho \cap \Omega^+_\gamma\right), \quad \gamma = 1, 2, 3. \end{gathered} \tag{58}$$

Здесь функция Q — невязка выражения χ,

$$Q \equiv (H - E)\chi.$$

Граничное условие типа условия излучения, заданное на пятимерной сфере радиуса ρ, должно модифицироваться внутри каждой из параболических областей Ω_γ^+ (11), т. е. на поверхностях

$$\mathbb{S}_\rho^5 \cap \Omega_\gamma^+, \quad \gamma = 1, 2, 3,$$

в соответствии с результатами работ [15, 17].

Техника решения граничной задачи такого типа успешно использовалась, хотя и в более простом случае задачи рассеяния трех одномерных квантовых частиц с финитными парными потенциалами, в работах [27, 28].

Решение граничной задачи (58) порождает следующий шаг итеративной процедуры, поскольку позволяет выделить амплитуду развала $2 \to 3$ $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ в соответствии с соотношением

$$\Psi^{(03)}(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = \varphi(\mathbf{X}, \mathbf{P}), \quad X \gg 1. \tag{59}$$

Выражение для $\Psi^{(03)}$ было определено ранее в уравнении (2).

6.2. Коррекция решения

Вернемся теперь к описанной выше процедуре, основанной на многомерной формуле Грина и ведущей к построению системы уравнений (52). Отметим, что в соответствии с решением граничной задачи (58) и уравнением (59) свободный член $\mathbf{S}_\alpha$, ($\alpha \neq \sigma$, $\alpha = \sigma$) системы уравнений (52) на данном шаге меняется. Решая систему уравнений (52) для скорректированного свободного члена $\mathbf{S}_\alpha^{(1)}$ ($\alpha \neq \sigma$, $\alpha = \sigma$), мы получим новый набор плотностей $\hat{a}_\alpha$ ($\alpha \neq \sigma$, $\alpha = \sigma$). Этот шаг позволяет скорректировать слагаемое Ψ^{02} в уравнении (2) в соответствии с уравнением (5). Это, в свою очередь, позволяет определить новое приближение для функции $\chi = \chi^{(1)}$ в соответствии с уравнением (57).

Вновь повторяя процедуру решения граничной задачи (58), мы приходим к новому приближению для расходящейся волны $\varphi^{(1)}$.

Отметим, что в основе изложенной выше процедуры лежит вариационный подход, связанный с перераспределением плотности вероятности обнаружения системы частиц в некотором состоянии между всеми возможными процессами рассеяния, учитываемыми с контролируемой точностью. Эта вероятностная трактовка задачи и определяет сходимость изложенной выше процедуры. Число шагов итеративной процедуры определяет также точность полученного результата.

7. ОБСУЖДЕНИЕ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Предложенные в работе методы позволяют свести задачу рассеяния трех заряженных квантовых частиц (при наличии парных кулоновских потенциалов притяжения) при энергии выше порога развала для процессов $2 \to 2(3)$ к модельной задаче с конечным числом асимптотических каналов рассеяния. При этом в каждой парной подсистеме α, отвечающей кулоновскому потенциалу притяжения, состояния с главным квантовым числом меньше $N_\alpha \gg 1$ учитываются явно. Вклад остальных высоковозбужденных состояний заменяется некоторым эффективным состоянием. Это эффективное состояние строится на основе выражений (28)–(30), полученных в ходе решения вспомогательной задачи рассеяния $3 \to 2(3)$, с учетом преобразования (36). Величина параметра N_α определяется условием (31). Такая редукция заведомо бесконечномерной задачи к конечномерной модели является новой и позволяет естественным образом контролировать точность вычислений.

Предложенный метод, идейно близкий методу локального поля Фока, основан на согласовании приближенных решений уравнения Шредингера Ψ_c^{BBK} и Ψ^{sep} в области $D_{\mu,\nu}$, в которой оба эти решения справедливы. Особо отметим, что оба приближенных решения допускают процедуру уточнения. Для решения типа Ψ_c^{BBK} такая процедура подробно описана в работе [23]. Для решения типа Ψ^{sep} процедура уточнения связана с учетом поправочного потенциала вида

$$V_{corr} = C\frac{x}{y^2}.$$

С одной стороны, наличие такого потенциала в представлении (13) разрушает процедуру деления переменных в редуцированном операторе Шредингера. Однако данный потенциал является в области Ω_α^+ лишь поправочным к главной части оператора, допускающей деление переменных. Таким образом, учет потенциала V_{corr} приводит лишь к возникновению медленно меняющегося дополнительного слагаемого в фазовой функции. Такое слагаемое оказывается решением некоторого аналога градиентного уравнения и может быть найдено обычным методом характеристик в асимптотической области конфигурационного пространства Ω_α^+. Добавим, что учет

потенциала V_{corr} в структуре, например, эффективного состояния должен строиться на основе двухмасштабных разложений ($x \gg 1$, $y \gg 1$, $y \gg x$).

Отметим также, что учет спиновых степеней свободы и, например, аннигиляционного канала рассеяния не влияет на полученные в работе результаты, касающиеся структуры состояния Ψ_c^{ass}. Причина этого заключается именно в том, что речь в этом случае идет о дополнительных степенях свободы системы, усложнении матричной структуры полного решения, но не сказывается на структуре асимптотики пространственных степеней свободы решения.

Отметим также, что предложенный нами метод может быть непосредственно применен для вычисления наблюдаемых в задачах квантового рассеяния в системах нескольких частиц при энергиях выше порога развала. Нам представляется, что метод был бы особенно эффективен при низких и ультранизких энергиях. Возможно, например, изучение задачи рассеяния электрона на электрон-позитронной паре. Рассмотрение систем частиц разных масс должно повлечь несущественные технические изменения в уравнениях.

Рассмотрим одну из возможных областей применения предложенного метода.

8. ПРИЛОЖЕНИЕ МЕТОДА В АНТИПРОТОННОЙ ФИЗИКЕ

Техника антипротонных экспериментов активно развивается уже несколько десятнков лет. В настоящее время антиводородные атомы достаточно легко формируются на Антипротонном деселераторном комплексе в CERN [29]. Деселераторный комплекс проводил в последнее время несколько экспериментов, направленных на высокоточные измерения физических свойств антиводородного атома для проверки комбинированной CPT-симметрии и первого прямого измерения эффекта действия гравитационных сил на антиматерию.

Тем не менее описание результатов эксперимента не всегда однозначно. Построение адекватных моделей, охватывающих все стороны проводимых исследований, также остается незавершенным, что безусловно связано со сложностью протекающих процессов. В ходе эксперимента антиатомы или же захватываются в магнитных полях [30], или формируют пучок, который извлекается из области формирования в почти свободную среду [31]. В обоих случаях требуются антиводородные атомы в основном состоянии для того, чтобы выполнить необходимые измерения. Они, однако, формируются в большинстве случаев в высоковозбужденных состояниях.

В самом деле, основные механизмы формирования антипротоннных атомов — так называемая трехчастичная рекомбинация, в процессе которой принимают участие два позитрона и антипротон (дополнительный позитрон уносит излишек энергии), и так называемая перезарядка, в процессе которой позитроний Ps (связанное состояние электрона и позитрона) в возбужденном состоянии передает свой положительный заряд антипротону, а оставшийся электрон уносит излишек энергии. Первый механизм является почти непрерывным процессом, который имеет место, пока позитронная и антипротонная плазмы поддерживаются в процессе взаимодействия (обычно несколько сотен миллисекунд [31]), и порождает широкое распределение высоковозбужденных ридберговских атомов на всех подуровнях [32]. Механизм перезарядки может приводить к импульсному формированию атомов позитрония, контролируемому временем лазерного возбуждения. При механизме перезарядки распределение главного квантового числа n формируемых атомов антиводорода частично определяется распределением главного квантового числа атомов позитрония. Типичные экспериментальные величины $n \sim \sim 30$ [33,34], но с широким распределением подуровней.

В итоге оба процесса формируют высоковозбужденные антиатомы с широким распределением всех (l, m) угловых моментов. Наиболее заселенными при этом являются состояния с высокими значениями главного квантового числа n. Более точные характеристики распределения оказываются важными для предсказания дальнейшего хода эксперимента, в частности, для оценок времени жизни антиатомов до перехода в основное состояние в зависимости (в случае процессов перезарядки) от значения главного квантового числа, отвечающего исходному состоянию позитрония Ps.

Отметим, что развитые в данной работе методы расчета характеристик трехчастичного рассеяния заряженных частиц позволяют точно (в рамках описанной точности модели) предсказать заселенность уровней антиатомов, в том числе с высокими значениями главных квантовых чисел в зависимости от номера главного квантового числа, отвечающего исходному состоянию заряженного кластера (Ps) до взаимодействия. В самом деле вычисление амплитуды рассеяния выделенного асимптотического состояния Ψ_c^{ass} позволяет, проведя его парциальный анализ, вычислить распределение состояний с

квантовыми числами (l, m). Вычисление корреляционной функции

$$\langle \Psi_c^{ass}, \varphi_n \rangle$$

позволяет найти заселенности уровней с любым (сколь угодно большим) главным квантовым числом n антиатома с последующим вычислением распределения заселенности состояний с квантовыми числами (l, m).

Указанная методика может существенно повысить точность предсказания характеристик эксперимента по увеличению продуктивности процессов создания антиатомов в высоковозбужденных состояниях с последующим их радиационным переходом в основное состояние.

В этом смысле предлагаемая методика расчетов применима к описанию любых процессов трехчастичной рекомбинации и трехчастичной перезарядки при энергиях эксперимента выше порога развала.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Определение ядра $\varphi_n(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{k}})$ производящего интеграла

Рассмотрим собственную функцию абсолютно непрерывного спектра $\tilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ кулоновского двухчастичного оператора Шредингера, определенную стандартным образом с точностью до нормировки (нормировочный коэффициент положен равным единице),

$$\tilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \Phi(-i\gamma, 1, ikx(1 - \langle \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{x}} \rangle)), \qquad (60)$$

и проведем ее парциальный анализ (разложение по сферическим функциям). В ситуации, когда функция является инвариантной относительно поворота системы координат (в данном случае угловая зависимость содержится лишь в скалярном произведении $\langle \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{x}} \rangle$), такой анализ эквивалентен разложению по полиномам Лежандра [35].

Для того чтобы провести такое разложение, воспользуемся преобразованием Куммера (9.212.1) [24]

$$\Phi(a, c, z) = e^z \Phi(c - a, c, -z),$$

что позволяет переписать выражение (60) в виде

$$\tilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{ikx} \Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - t)), \qquad (61)$$

где $t = \langle \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{x}} \rangle$. Теперь угловая зависимость сосредоточена только в вырожденной гипергеометрической функции. Проведем ее разложение в ряд по ортогональным полиномам Лежандра P_l. Согласно, например, (8.904) [24], это разложение принимает вид

$$\Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - t)) = \\ = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \Phi_l(k, x) P_l(t). \qquad (62)$$

Здесь $\Phi_l(k, x)$ — парциальные компоненты функции $\Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - t))$, которые, согласно условиям ортогональности полиномов Лежандра, вычисляются следующим образом:

$$\Phi_l(k, x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} dt\, \Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - t)) P_l(t). \qquad (63)$$

Для вычисления интеграла в (63) воспользуемся гипергеометрическим разложением

$$\Phi(a, 1, b(1 - t)) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j}{(j!)^2} b^j (1 - t)^j, \\ a = 1 + i\gamma, \quad b = -ikx, \quad (a)_j = \frac{\Gamma(a + j)}{\Gamma(a)}, \qquad (64)$$

в терминах которого

$$\Phi_l(k, x) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j}{(j!)^2} b^j \int_{-1}^{1} dt (1 - t)^j P_l(t). \qquad (65)$$

Делая в интеграле замену переменной $s^2 = (1 - t)/2$, вычислим его явно и получим новое гипергеометрическое разложение, ведущее к следующему предельному соотношению для парциальной компоненты:

$$\Phi_l(k, x) = \frac{(-1)^l}{\Gamma(l + 2)} \lim_{u \to -m} \frac{1}{\Gamma(u)} \times \\ \times {}_2F_2(a, 1; u, l + 2; 2b), \quad m = l - 1, \qquad (66)$$

где ${}_2F_2$ — гипергеометрическая функция. Воспользуемся теперь выражением

$$\lim_{u \to -m} \frac{1}{\Gamma(u)} {}_2F_2(A, B; u, D; z) = \\ = \frac{(A)_{m+1} (B)_{m+1}}{(D)_{m+1}} \frac{z^{m+1}}{(m + 1)!} \times \\ \times {}_2F_2(A + m + 1, B + m + 1; m + 2, D + m + 1; z), \qquad (67)$$

где

$$A = a, \quad B = 1, \quad m = l - 1, \quad D = l + 2, \quad z = 2b.$$

Подставляя выражение (67) в (66), получим окончательное выражение для парциальной компоненты:

$$\Phi_l(k,x) = \frac{\Gamma(i\gamma+l+1)}{\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(2l+2)}(2ikx)^l \times \times \Phi(i\gamma+l+1, 2l+2, -2ikx). \quad (68)$$

Подставляя полученное соотношение в разложение (61), (62) для собственной функции непрерывного спектра кулоновского двухчастичного оператора Шредингера, получаем

$$\tilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}) = e^{ikx}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\Gamma(i\gamma+l+1)}{\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(2l+2)}(2ikx)^l \times \times \Phi(i\gamma+l+1, 2l+2, -2ikx)P_l(t). \quad (69)$$

Рассмотрим теперь аналитическое продолжение построенной нами функции в верхнюю полуплоскость комплексной плоскости k при

$$k = k_n = i\frac{|\alpha|}{2n}, \quad \alpha < 0,$$

$$i\gamma = i\,\frac{\alpha}{2k}\Big|_{k=k_n} = i\frac{\alpha}{2k_n} = -n, \quad n = 1,2,3,\ldots$$

Здесь $k_n^2 = -|\alpha|/4n^2$ — энергия двухчастичного связанного состояния, отвечающего главному квантовому числу n. В этом случае выражение (69) принимает вид

$$\tilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) = \exp\left(-\frac{|\alpha|}{2n}x\right) \times \times \sum_{l=0}^{\infty}\beta_{nl}\frac{2l+1}{\Gamma(2l+2)}\left(-\frac{|\alpha|}{n}x\right)^l \times \times \Phi\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{|\alpha|}{n}x\right)P_l(t). \quad (70)$$

Мы понимаем здесь вектор $\mathbf{k}_n$ как вектор с направлением, совпадающим с направлением исходного вектора $\mathbf{k}$ $(\hat{\mathbf{k}}_n = \hat{\mathbf{k}})$, и длиной, принимающей чисто мнимое значение в верхней полуплоскости комплексной плоскости k $(k_n = i|\alpha|/2n)$. Здесь коэффициент β_{nl} определяется следующим образом:

$$\beta_{nl} = (1-n)(2-n)\ldots(l-n). \quad (71)$$

Отметим, что, согласно (71), коэффициент β_{nl} обращается в нуль при $l \geq n$. Таким образом, выражение (70) оказывается конечной суммой слагаемых и может быть записано в виде

$$\tilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) = \exp\left(-\frac{|\alpha|}{2n}x\right) \times \times \Phi\left(1-n, 1, \frac{|\alpha|}{2n}x(1-\langle\hat{\mathbf{k}},\hat{\mathbf{x}}\rangle)\right) = = 4\pi\exp\left(-\frac{|\alpha|}{2n}x\right)\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}\beta_{nl}\frac{1}{(2l+1)!} \times \times \left(-\frac{|\alpha|}{n}\right)^l x^l\Phi\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{|\alpha|}{n}x\right) \times \times Y_l^m(\hat{\mathbf{x}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}), \quad (72)$$

где Y_l^m — соответствующие сферические функции. Последнее равенство справедливо в силу теоремы сложения сферических гармоник (5.17.9) [35],

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l\left(\langle\hat{\mathbf{k}},\hat{\mathbf{x}}\rangle\right) = \sum_{m=-l}^{l}Y_l^m(\hat{\mathbf{x}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}).$$

Наконец, введем функцию

$$\varphi_n(\mathbf{x},\hat{\mathbf{k}}) \equiv \tilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) \quad (73)$$

согласно выражению (72). Мы предъявили функцию, парциальные компоненты которой с точностью до нормировки совпадают с кулоновскими радиальными функциями дискретного спектра [36]

$$R_{nl} = \rho^l e^{-\rho/2}\Phi(-n+l+1, 2l+2, \rho),$$
$$l = 0,1,2,\ldots,n-1$$

при фиксированном главном квантовом числе n.

Интегрируя функцию φ_n по $d\hat{\mathbf{k}}$ на единичной сфере с некоторой гладкой функцией $\hat{a}(\hat{\mathbf{k}})$, получим стандартное разложение вида

$$\int\limits_{\mathbb{S}^2}\varphi_n(\mathbf{x},\hat{\mathbf{k}})\hat{a}(\hat{\mathbf{k}})\,d\hat{\mathbf{k}} = = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}D_{nlm}R_{nl}(x)Y_l^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (74)$$

по полному набору кулоновских парных состояний дискретного спектра, отвечающих фиксированному главному квантовому числу n. При этом набор амплитуд D_{nlm} будет полностью определяться аналитическим видом функции $\hat{a}(\hat{\mathbf{k}})$.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках гранта РНФ 17-11-01003-П.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. D. Faddeev, *Mathematical Aspects of the Three-Body Problem of the Quantum Scattering Theory*, Daniel Davey and Co., Jerusalem (1965), p. 114.

2. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, Москва (1985).

3. С. П. Меркурьев, ЯФ **24**, 289 (1976).

4. С. П. Меркурьев, ТМФ **32**, 187 (1977).

5. I. Bray and A. T. Stelbovics, Phys. Rev. Lett. **69**, 53 (1992).

6. I. Bray and A. T. Stelbovics, Phys. Rev. A **48**, 4787 (1993).

7. A. S. Kadyrov, I. Bray, A. M. Mukhamedzhanov, and A. T. Stelbovics, Ann. Phys. **324**, 1516 (2009).

8. A. S. Kadyrov, A. M. Mukhamedzhanov, A. T. Stelbovics et al., Phys. Rev. A **68**, 022703 (2003).

9. A. M. Budylin, Ya. Yu. Koptelov, S. B. Levin, and S. V. Sokolov, arXiv:1810.06056 [quant-ph] (2018).

10. M. Gaudin and B. Derrida, J. de Phys. **36**, 1183 (1975).

11. В. С. Буслаев, С. П. Меркурьев, С. П. Саликов, в сб. *Проблемы математической физики*, т. 9, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1979), с. 14.

12. В. С. Буслаев, С. П. Меркурьев, С. П. Саликов, Зап. научн. сем. ЛОМИ **84**, 16 (1979).

13. В. А. Фок, *Новые методы в теории диффракции*, Вестник Ленингр. ун-та **4**, 5 (1947); *Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн*, Сов. радио, Москва (1970).

14. В. С. Буслаев, С. Б. Левин, Алгебра и анализ **22**(3), 60 (2010).

15. В. С. Буслаев, С. Б. Левин, Функц. анализ и его прилож. **46**(2), 83 (2012).

16. С. Б. Левин, Математ. заметки **108**, 469 (2020).

17. С. Б. Левин, Зап. научн. сем. ПОМИ **451**, 79 (2016).

18. T. Wolz, C. Malbrunot, M. Vieille-Grosjean, and D. Comparat, Phys. Rev. A **101**, 043412 (2020).

19. A. M. Budylin, Ya. Yu. Koptelov, and S. B. Levin, J. Math. Sci. **238**, 601 (2019).

20. E. O. Alt and A. M. Mukhamedzhanov, Phys. Rev. A **47**, 2004 (1993).

21. J. Tennyson, Phys. Rep. **491**, 29 (2010).

22. F. Tricomi, Ann. Mat. Pura Appl. **28**, 263 (1949).

23. M. Brauner, J. S. Briggs, and H. Klar, J. Phys. B **22**, 2265 (1989).

24. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).

25. И. М. Гельфанд, Г. Е. Шилов, *Обобщенные функции и действия над ними*, Физматгиз, Москва (1959).

26. Н. Мак-Лахлан, *Теория и приложения функций Матье*, Изд. иностр. лит-ры, Москва (1953).

27. V. S. Buslaev, S. B. Levin, P. Neittaannmäki, and T. Ojala, J. Phys. A **43**, 285205 (2010).

28. В. С. Буслаев, Я. Ю. Коптелов, С. Б. Левин, Д. А. Стрыгина, ЯФ **76**, 236 (2013).

29. W. A. Bertsche, E. Butler, M. Charlton, and N. Madsen, J. Phys. B **48**, 232001 (2015).

30. M. Ahmadi, B. X. R. Alves, C. J. Baker et al., Nature Comm. **8**, 681 (2017).

31. N. Kuroda, S. Ulmer, D. J. Murtagh et al., Nature Comm. **5**, 3089 (2014).

32. G. Gabrielse, N. S. Bowden, P. Oxley et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 233401 (2002).

33. D. Krasnicky, G. Testera, and N. Zurlo, J. Phys. B **52**, 115202 (2019).

34. D. Krasnicky, R. Caravita, C. Canali, and G. Testera, Phys. Rev. A **94**, 022714 (2016).

35. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).

36. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 393–402 © 2021

ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИОННОГО РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ РЕШЕТКИ НА ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

И. Н. Огородников *

Физико-технологический институт,
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина
620002, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 25 января 2021 г.,
после переработки 24 марта 2021 г.
Принята к публикации 7 апреля 2021 г.

Приведены результаты экспериментального изучения и численного моделирования термостимулированных процессов переноса энергии электронных возбуждений в условиях протекания флуктуационного разупорядочения решетки. Сформулированная модель основана на рассмотрении потока кинетических частиц из возбужденных состояний в основное состояние через потенциальный барьер, параметры которого подвержены влиянию флуктуационного разупорядочения решетки. В рамках развиваемой модели получены соотношения, связывающие параметры термостимулированного процесса переноса энергии электронных возбуждений (средняя высота потенциального барьера $\overline{E}$, экспериментально наблюдаемая средняя энергия активации $\langle E \rangle$ термостимулированного процесса и условие экстремума потока кинетических частиц) с параметрами процесса разупорядочения решетки. Численными расчетами для различных значений параметров флуктуационного разупорядочения получены зависимости температурного положения и амплитуды максимума потока. Детально рассмотрены два предельных случая влияния процесса разупорядочения на локальное окружение центров захвата, приводящего к уменьшению и увеличению высоты потенциального барьера центров захвата, участвующих в процессе возбуждения рекомбинационной люминесценции. Представлены экспериментальные результаты исследования термостимулированной люминесценции в режиме линейно-осциллирующего нагрева, полученные при $T = 80$–273 K для нелегированных монокристаллов трибората лития LiB_3O_5 (LBO). Обнаружены появление так называемых спонтанных сцинтилляций ($T < 180$ K) и аномальный рост $\langle E \rangle$ ($T = 100$–140 K). Наблюдаемые особенности объяснены влиянием термостимулированного ионного процесса в литиевой подрешетке LBO, приводящего к флуктуационной перестройке локального окружения центров захвата B^{2+}, результатом которой является уменьшение высоты потенциального барьера данных центров примерно на 20 %.

DOI: 10.31857/S0044451021090054

1. ВВЕДЕНИЕ

Твердые вещества с подвижными ионами малого радиуса представляют собой обширный класс материалов, в которых наблюдается так называемое разупорядочение подрешетки подвижных ионов, влияющее на процессы переноса энергии электронных возбуждений [1]. Существует большое количество публикаций на эту тему. Однако в качестве примеров ограничимся только двумя работами, имеющими непосредственное отношение к теме настоящей работы: для случая примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах отметим классическую работу, развивающую микроскопическую теорию оптически активных примесных центров малых радиусов [2], и экспериментальную работу, касающуюся оптических процессов с участием примесных центров в LiF [3]. В то же время важное место среди материалов данного класса занимают твердые электролиты с проводимостью по матричным катионам щелочных металлов [4]. В конце 80-х годов прошлого века был предложен и получил широкое распространение класс широкозонных нелинейно-оптических материалов для работы в ультрафиолетовой (УФ) и вакуумной УФ-областях спектра, основой композиции которых

* E-mail: i.n.ogorodnikov@urfu.ru

являются различные варианты боро-кислородного каркаса, в пустотах которого размещены ионы щелочных металлов [5].

К числу таких перспективных нелинейно-оптических материалов относятся, например, кристаллы боратов лития: триборат лития LBO (LiB_3O_5) и тетраборат лития LTB ($Li_2B_4O_7$). Они имеют сравнительно низкосимметричную кристаллическую решетку ($Pna2_1$ для LBO и $I4_1cd$ для LTB) и сложную элементарную ячейку, состоящую из 36 (LBO) и 104 (LTB) атомов. В каждом из этих соединений можно выделить борокислородную анионную группу. Их отличительной чертой является контраст между сугубо ковалентными химическими связями внутри анионных групп и сравнительно слабыми ионными связями между катионом лития и соответствующей анионной группой [6–9]. С точки зрения динамики решетки, данные кристаллы являются представителями обширного класса широкозонных оксидных диэлектриков с подвижными катионами. Наличие подрешетки слабосвязанных катионов лития в сочетании с устойчивым анионным каркасом должно самым серьезным образом сказываться на динамике электронных возбуждений и особенностях радиационного дефектообразования. Особую остроту эта проблема приобретает в случае легких подвижных катионов малого радиуса, например, катионов лития или водорода. Однако, несмотря на очевидную важность рассматриваемого явления, известно лишь небольшое количество публикаций, касающихся систематического исследования влияния подвижности катионов малого радиуса на процессы переноса энергии электронных возбуждений в широкозонных оптических кристаллах. Так, для щелочно-галоидных кристаллов имеет место основополагающая работа [10], тогда как для нелинейно-оптических кристаллов нам известны только две работы по этой теме [11, 12].

К настоящему времени в нелинейно-оптических кристаллах боратов лития идентифицированы дырочные центры поляронного типа с общим наименованием O^--центры (дырка, локализованная на $2p$-орбитали кислорода в окрестности какого-либо дефекта или структурной неоднородности) [13–18]. Электронный Li^0-центр в боратах лития представляет собой междоузельный атом лития [13, 19–22].

Экспериментальные данные по диффузии и ионной электропроводности свидетельствуют о том, что при комнатной температуре ионы лития в LTB [23, 24] и LBO [25] являются подвижными и совершают термостимулированную миграцию.

Целью настоящей работы является установление влияния флуктуационных процессов разупорядочения решетки, происходящих с участием подвижных матричных катионов малого радиуса, на термостимулированные процессы переноса энергии электронных возбуждений. В работе развиты простейшие модельные представления, использованные для интерпретации экспериментальных данных по термостимулированной люминесценции в режиме линейно-осциллирующего нагрева.

Статья построена следующим образом: после краткого Введения в разд. 2 обсуждаются физические предпосылки для развития модельных представлений. В разд. 3 сформулированы математическая модель и необходимые приближения, представлены системы уравнений, описывающие нестационарные процессы в электронной подсистеме при возмущающем воздействии термофлуктуационного процесса, протекающего в ионной подсистеме; рассмотрены два предельных случая, важные для последующей интерпретации экспериментальных данных: флуктуационное разупорядочение решетки, приводящее к увеличению и уменьшению высоты потенциального барьера центров захвата. В разд. 4 продемонстрированы результаты исследования и приведено совместное обсуждение полученных экспериментальных и расчетных результатов. Заключительный разд. 5 содержит выводы.

2. ФИЗИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ

Под термином «флуктуационное разупорядочение» будем понимать какой-либо кооперативный процесс, охватывающий весь объект исследования и происходящий независимо от состояния обсуждаемых центров захвата и центров свечения. Физическая природа флуктуационного процесса может быть различна для разных объектов. Применительно к кристаллам боратов лития таковым процессом является термофлуктуационное разупорядочение катионной подрешетки лития, т. е. обретение подвижности катионами лития. Согласно известным экспериментальным данным по ионной электропроводимости боратов лития [23–25], при температуре около 200 K начинается некоррелированная прыжковая миграция катионов лития, которая при дальнейшем повышении температуры приобретает коррелированный характер; при температуре немногим выше комнатной в боратах лития наблюдается надбарьерная диффузия матричных катионов лития.

Будем рассматривать перенос электронных возбуждений из состояния ψ_0 в состояние ψ_1 через потенциальный барьер, параметры которого испытывают влияние флуктуационного разупорядочения. В ряде работ показано [13, 16, 17], что в окрестности парамагнитных O^--центров LBO для компенсации избыточного заряда при локализации дырки должна присутствовать вакансия лития. Это качественно объясняет причины влияния данного термофлуктуационного процесса разупорядочения катионной подрешетки лития на параметры потенциального барьера соответствующих ловушек. К сожалению, нам не известны публикации, где бы сообщалось о разработке микроскопической модели данного влияния. Поэтому в рамках первого приближения ограничимся учетом только одного параметра потенциального барьера — энергетической высоты, т. е. в рамках первого приближения будем считать, что флуктуационное разупорядочение изменяет только энергетическую высоту барьера (далее для краткости — энергию). Для некоторой части актуальных центров энергия потенциального барьера соответствует таковой без воздействия процесса разупорядочения: будем говорить, что потенциальный барьер находится в основном (невозбужденном) состоянии ψ_0 с энергией E_0. Другая часть актуальных центров подверглась воздействию процесса разупорядочения, поэтому энергия потенциальных барьеров этих центров имеет иное значение: будем говорить, что потенциальный барьер данного центра находится в возбужденном состоянии ψ_1 с энергией E, величина которой может стохастически изменяться в каком-то допустимом интервале энергий и быть индивидуальной для каждого конкретного центра.

В рамках существующих представлений о термостимулированных релаксационных процессах (например, термостимулированной люминесценции) экспериментально регистрируемую величину считают суммой выходов от элементарных участников релаксационного процесса (элементарных релаксаторов [26]), а модель такого процесса представляют в виде его математического описания для одного участника релаксационного процесса (элементарного релаксатора) с усредненными феноменологическими параметрами.

Описание развиваемой математической модели начинается с расчета средней высоты потенциального барьера для одного такого участника релаксационного процесса. Приведенное ниже выражение (3) представляет собой формулу для расчета математического ожидания, т. е. среднего значения случайной величины E, распределенной на интервале интегрирования с плотностью вероятности $g(E,T)$. Особо подчеркнем, что в формуле (3) интегрирование (суммирование) осуществляется не по возможным уровням потенциального барьера одного центра, а по энергиям потенциальных барьеров ансамбля всех актуальных центров, находящихся в исследуемом кристалле, количество которых обычно составляет 10^{15}–10^{17} центров/см^3.

3. МОДЕЛЬ ФЛУКТУАЦИОННОГО РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ

Рассмотрим модельную систему каких-либо кинетических частиц с двумя состояниями: основным ψ_0 и возбужденным ψ_1, которые разделены потенциальным барьером высотой E_0. Будем анализировать класс релаксационных процессов, скорость которых пропорциональна потоку Φ_{10} кинетических частиц из возбужденного состояния в основное через потенциальный барьер. В теории элементарных релаксаций [26] полагается, что общий релаксационный процесс может быть представлен в виде суперпозиции элементарных релаксаций, являющихся аналогом кинетических частиц, динамика которых описываются уравнением

$$\Phi_{10}(t) \equiv -\frac{dn(t)}{dt} = \frac{n(t)}{\tau}, \tag{1}$$

где $n(t)$ — концентрация кинетических частиц в состоянии ψ_1 и $\tau = \tau(E,T)$ — их среднее время жизни в этом состоянии, t — текущее время. При фиксированной высоте потенциального барьера задача о нахождении Φ_{10} успешно решается для многих термостимулированных процессов [27, 28]. Возмущающее воздействие других термостимулированных процессов, не влияющих на природу рассматриваемых кинетических частиц, а лишь изменяющих количество допустимых состояний потенциального барьера, может быть учтено в модели флуктуационного разупорядочения с учетом подхода работы [29].

Предположим, что флуктуационное разупорядочение индуцирует состояния потенциального барьера с энергией E, отличные от исходного состояния с энергией E_0, таким образом, что время существования потенциального барьера в каждой конфигурации ($\tau_B(E)$) удовлетворяет соотношению

$$\tau_L \ll \tau_B(E) \ll \tau(E,T), \tag{2}$$

где τ_L и $\tau(E,T)$ — характерные времена колебаний решетки и жизни кинетических частиц в возбужденном состоянии ψ_1 для потенциального барьера

с энергией E при температуре T. В этих условиях средняя энергия активации системы $\overline{E}$ определяется статистическим средним по допустимым состояниям потенциального барьера:

$$\overline{E}(T) = \int\limits_E Eg(E,T)\,dE \Big/ \int\limits_E g(E,T)\,dE, \qquad (3)$$

где $g(E,T)$ — плотность вероятности распределения состояний потенциального барьера по допустимым энергиям E при температуре T. Эта функция может быть найдена из микроскопических представлений о природе флуктуационного разупорядочения и его воздействии на потенциальный барьер. В рамках настоящего анализа в качестве первого приближения воспользуемся простыми модельными представлениями. Плотность вероятности для реализации основного состояния потенциального барьера обозначим f_0, а плотность вероятности для реализации возбужденного состояния потенциального барьера с энергией E зададим в виде

$$f(E,T) = \omega \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right), \qquad (4)$$

где $\omega = \omega(E)$ и Q — соответственно частотный фактор и энергия активации процесса флуктуационного разупорядочения, индуцирующего возбужденное состояние потенциального барьера с энергией E, k_B — постоянная Больцмана. Функцию распределения $g(E,T)$ сконструируем следующим образом:

$$g(E,T) = \begin{cases} f_0\delta(E-E_0), & E = E_0, \\ \omega \exp\left(-\dfrac{Q}{k_B T}\right), & E \neq E_0. \end{cases} \qquad (5)$$

Здесь $E = E_0$ обозначает основное состояние потенциального барьера с энергией E_0, а $E \neq E_0$ соответствует допустимой энергии E из энергетического интервала, соответствующего возбужденным состояниям потенциального барьера. Для дальнейшего анализа удобно ввести условные обозначения, в которых интегрирование осуществляется по энергетическому интервалу с условным обозначением $E \neq E_0$, соответствующему допустимым возбужденным состояниям потенциального барьера:

$$g(T) = \int\limits_{E\neq E_0} g(E,T)\,dE, \qquad (6)$$

$$E_1 = \frac{1}{g(T)} \int\limits_{E\neq E_0} Eg(E,T)\,dE, \qquad (7)$$

$$\xi = \frac{g(T)}{f_0} = b \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right), \qquad (8)$$

где предэкспоненциальный множитель

$$b = \frac{1}{f_0} \int\limits_{E\neq E_0} \omega(E)\,dE. \qquad (9)$$

С учетом этих обозначений перепишем уравнение (3) в виде

$$\overline{E}(T) = \frac{E_0 + E_1\xi}{1+\xi}. \qquad (10)$$

Величины E_1 и ξ имеют следующий физический смысл: E_1 — среднее значение высоты потенциального барьера по ансамблю возбужденных состояний; $0 \le \xi < \infty$ — числовой параметр, который находится как отношение двух величин: в числителе — средняя вероятность реализации возбужденного состояния, а в знаменателе — вероятность реализации основного состояния потенциального барьера. Для функции распределения (5) величина E_1 не зависит от температуры и является также конечным (асимптотическим) значением энергии активации, к которому стремится система после завершения процесса флуктуационного разупорядочения. За характеристическую температуру флуктуационного разупорядочения может быть принята $T = T_F$, при которой числовой параметр $\xi = 1$. Выражение для средней энергии активации при этом имеет крайне простой и наглядный вид:

$$\overline{E}(T_F) = \frac{E_0 + E_1}{2}. \qquad (11)$$

Допустив, что $\xi = 1$ при $T = T_F$, из выражения (8) определим в явном виде выражение для T_F:

$$T_F = \frac{Q}{k_B \ln b}. \qquad (12)$$

Принимая во внимание, что в экспериментальной практике для исследования термостимулированных процессов во многих случаях используют линейно-нарастающий закон изменения температуры

$$T = T_0 + rt, \qquad (13)$$

где T_0 — начальная температура, r — скорость линейного изменения температуры, в уравнении (1) сделаем замену переменной и перейдем от t к T. Тогда для кинетики релаксационного процесса перво-

го порядка и средней энергии активации $\overline{E}$ решение уравнения (1) может быть представлено в виде [28]

$$\Phi_{10}(T) = \frac{W(\overline{E},T)}{r}\, n_0 \times \\ \times \exp\left(-\int\limits_{T_0}^{T} \frac{W(\overline{E},\vartheta)}{r}\, d\vartheta\right), \quad (14)$$

где $W(\overline{E},T) = 1/\tau(\overline{E},T)$, n_0 — начальная концентрация кинетических частиц в возбужденном состоянии при температуре T_0.

Необходимое условие экстремума функции Φ_{10}, выполняющееся при $T = T_m$, имеет вид

$$\left.\frac{d(\ln W)}{d(1/T)}\right|_{T=T_m} = \frac{W(\overline{E},\, T_m)}{r}\, T_m^2 \quad (15)$$

и зависит от аналитического выражения для функции $W(\overline{E},\, T)$. Воспользуемся одним из феноменологических представлений для $W(\overline{E},T)$ [27]:

$$W(\overline{E},T) = S\exp\left(-\frac{\overline{E}}{k_B T}\right), \quad (16)$$

где S — предэкспоненциальный множитель — параметр, который в случае кинетики первого порядка совпадает с частотным фактором термостимулированного процесса. В отсутствие флуктуационного разупорядочения функция $\Phi_{10}(T)$ имеет один максимум при $T = T_{m0}$, определяемый условием

$$E_0 = \frac{W(E_0, T_{m0})}{r}\, k_B T_{m0}^2. \quad (17)$$

В случае возмущающего воздействия флуктуационного разупорядочения условие экстремума (15) примет вид

$$\overline{E} - T_m \left.\frac{d\overline{E}}{dT}\right|_{T=T_m} = \frac{W(\overline{E},\, T_m)}{r}\, k_B T_m^2. \quad (18)$$

В развернутом виде с учетом выражений (8)–(10) условие экстремума функции $\Phi_{10}(T)$ выглядит следующим образом:

$$E_0 = \frac{W(\overline{E}, T_m)}{r}\, k_B T_m^2 + F(\xi)|_{T=T_m}, \quad (19)$$

$$F(\xi) = \frac{E_0 - E_1}{2}\, \frac{1 + \xi + \ln(\xi/b)}{1 + \mathrm{ch}(\ln\xi)}. \quad (20)$$

Взаимное расположение характеристических значений T_F, T_{m0} и T_m на температурной шкале определяет условия и характер проявления

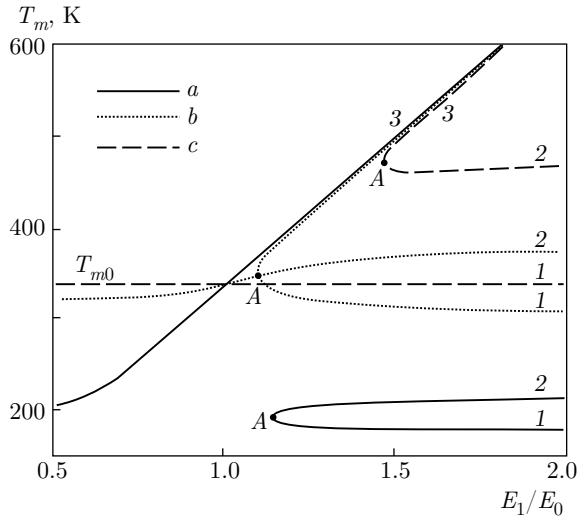


Рис. 1. Температурные положения максимумов (*1*, *3*) и минимумов (*2*) функции $\Phi_{10}(T)$ в зависимости от E_1/E_0 для флуктуационного разупорядочения с энергией активации Q [эВ] = 0.5 (*a*), 0.88 (*b*), 1.10 (*c*)

возмущающего воздействия флуктуационного разупорядочения на исследуемый термофлуктуационный процесс. Рассмотрим предельные случаи. При $\xi \ll 1$ ($T_F \gg T_{m0}$) флуктуационная перестройка никак не сказывается на исследуемом процессе ($\overline{E} = E_0$). Функция $\Phi_{10}(T)$ имеет один максимум при $T = T_{m0}$. Другой крайний случай, $\xi \gg 1$ ($T_F \ll T_{m0}$), соответствует термофлуктуационному процессу с $\overline{E} = E_1$. Основной максимум расположен при температуре $T = T_m$, которая зависит от величины параметра E_1:

$$T_m \sim \frac{T_{m0}}{E_0}\, E_1. \quad (21)$$

Наибольшее возмущающее действие флуктуационного разупорядочения наблюдается в промежуточной области значений ξ, когда T_F и T_{m0} близки по значению. Для краткости обсуждения введем обозначение параметра $Q = Q_0$, соответствующее случаю $T_F = T_{m0}$. Для конкретных значений параметров S, E_0, E_1, Q, b уравнение (19) было решено численными методами, а результаты представлены в графическом виде.

На рис. 1 показаны семейства зависимостей $T_m(E_1/E_0)$ для различных энергий активации Q. на рис. 2 — зависимости характеристических температур T_A, T_F и энергии E_A от энергии активации Q. Отметим, что E_A/E_0 и T_A являются координатами точки ветвления A на рис. 1.

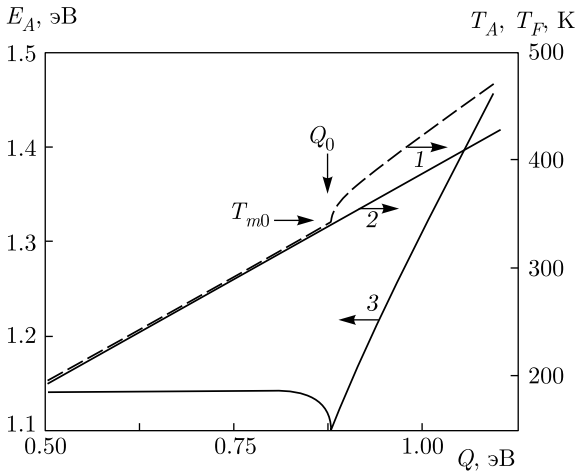


Рис. 2. Зависимости положения точки ветвления A (E_A (*3*), T_A (*1*)) и температуры флуктуационного разупорядочения T_F (*2*) от энергии активации Q

На рис. 3 приведены зависимости $\Phi_m(E_1/E_0)$. Для каждого фиксированного значения параметра E_1/E_0 функцию Φ_m определяли из условия $\Phi_m = \Phi_{10}(T_m)$.

Анализ результатов, представленных на рис. 1, 2 и 3, показывает, что при $E_1/E_0 = 1$ значение $T_m(E_1/E_0)$ не зависит от других параметров и соответствует таковому для невозмущенного случая.

Для флуктуационного разупорядочения с уменьшением высоты потенциального барьера ($E_1/E_0 < 1$) имеет место лишь один максимум $\Phi_m(T_m)$ при температуре $T = T_m$, определяемой из условия (18). Следует отметить, что при уменьшении энергии активации Q и параметра E_1/E_0 интенсивность в максимуме функции Φ_m испытывает значительный рост (несколько порядков), что может быть одной из причин так называемых спонтанных сцинтилляций, обычно сопровождающих флуктуационное разупорядочение. На рис. 1 обозначена характерная точка ветвления A с координатами (E_A, T_A).

Для флуктуационного разупорядочения с ростом высоты потенциального барьера ($E_1/E_0 > 1$) при возрастании параметра E_1/E_0 правее точки ветвления A появляются дополнительные минимум и максимум функции Φ_m (см. рис. 2). Однако при значениях Q, отличающихся от Q_0, дополнительный максимум функции Φ_m на много порядков меньше основного и не может наблюдаться экспериментально. Напротив, в окрестности точки $Q \approx Q_0$ при $E_1 > E_A$ интенсивность основного и дополнительного максимумов функции Φ_m сопоставимы (точка B на рис. 3). На зависимостях $E_A(Q)$ и $T_A(Q)$ в

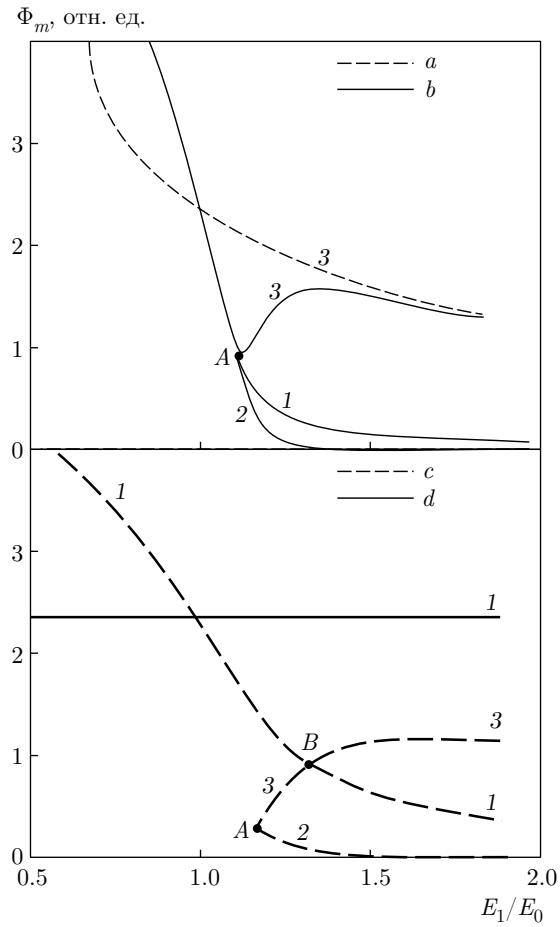


Рис. 3. Зависимость $\Phi_m(E_1/E_0)$ в точках максимума (*1*,*3*) и минимума (*2*) в условиях флуктуационного разупорядочения с энергией активации Q [эВ] = 0.5 (*a*), 0.88 (*b*), 0.92 (*c*), 1.10 (*d*). Параметры модели: $E_0 = 1$ эВ, $S = 30$ ТГц; $b = 10^{13}$

точке $Q = Q_0$ наблюдается характерный излом (см. рис. 2). Можно заключить, что наибольшее возмущающее воздействие флуктуационная перестройка оказывает при условии $T_F \approx T_{m0}$.

На рис. 4 и 5 приведены наиболее характерные графики температурного поведения $\Phi_{10}(T)$, полученные для различных наборов параметров. Эти кривые могут быть сопоставлены по форме с экспериментальными данными для различных термостимулированных процессов, включая термостимулированную люминесценцию (ТСЛ).

Средняя энергия активации $\overline{E}$ не поддается непосредственному экспериментальному определению. Современные методы модуляционной термоактивационной спектроскопии позволяют измерить лишь экспериментальную среднюю энергию активации:

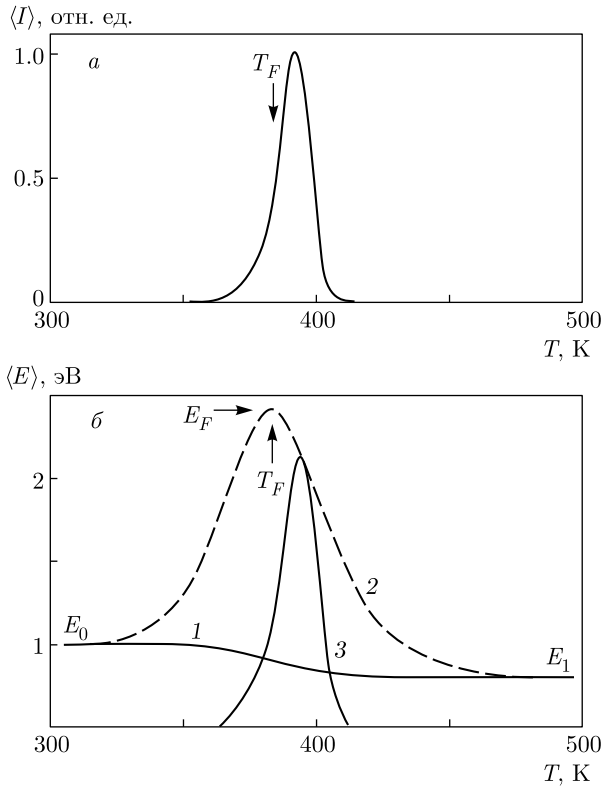


Рис. 4. Расчетные температурные зависимости интенсивности (*а*) и энергии (*б*) для средней высоты потенциального барьера $\overline{E}(T)$ (*1*), средней энергии термической активации $\langle E\rangle(T)$ (*2*, *3*) без учета (*2*) и с учетом (*3*) фоновых процессов на уровне 5 % от интенсивности в максимуме. Параметры модели: $E_0 = 1$ эВ, $E_1 = 0.8$ эВ, $Q = 1$ эВ, $\omega = 10$ ТГц и $S = 10^{-4}$ ТГц

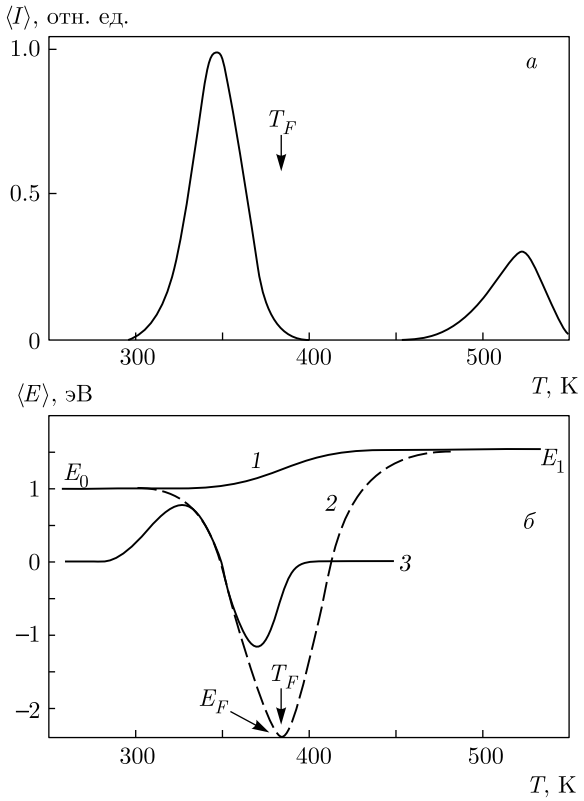


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для других параметров модели: $E_0 = 1$ эВ; $E_1 = 1.5$ эВ; $Q = 1$ эВ; $\omega = 10$ ТГц; $S = 0.1$ ТГц

$$\langle E\rangle(T) = \left.\frac{d\ln\Phi}{d(1/k_BT)}\right|_{n\approx\mathrm{const}} \approx E_0 - F(\xi). \qquad (22)$$

Функция $F(\xi)$ имеет экстремум при $\xi = 1$ и два асимптотических значения: $F(\xi) = 0$ при $\xi \ll 1$; $F(\xi) = E_0 - E_A$ при $\xi \gg 1$. Поэтому величина $\langle E\rangle$ при росте температуры изменяется от одного асимптотического значения $E(T) = E_0$ при $T < T_m$ до другого $E(T) = E_1$ при $T > T_m$. В промежуточной области температур $T \approx T_F$ наблюдается характерное поведение $\langle E\rangle$: функция проходит через экстремальное значение (минимум для флуктуационного разупорядочения с ростом высоты потенциального барьера и максимум для флуктуационного разупорядочения с уменьшением высоты потенциального барьера):

$$E_F = E_0 - \frac{E_0 - E_1}{2}\left(1 - \frac{Q}{2\,k_BT_F}\right). \qquad (23)$$

Экспериментальное измерение координат точки экстремума (E_F, T_F) на кривой $\langle E\rangle$ (см. рис. 5), позволяет оценить некоторые важные параметры, описывающие флуктуационную перестройку:

$$Q = k_B\,T_F\,\ln b, \quad \ln b = 2\left(1 + 2\,\frac{E_F - E_0}{E_0 - E_1}\right). \qquad (24)$$

Однако обычно общий термостимулированный процесс представляет собой суперпозицию элементарных процессов (14) с различными параметрами, что затрудняет точное определение координат (T_F, E_F).

4. ФЛУКТУАЦИОННОЕ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ КАТИОННОЙ ПОДРЕШЕТКИ В LBO

На рис. 6 приведены результаты измерения ТСЛ кристалла LBO в режиме линейно-осциллирующего нагрева. Результирующая скорость нагрева при этом значительно ниже, чем в случае линейного нагрева, поэтому положения пиков ТСЛ смещены в область более низких температур. Пик ТСЛ при 210 K, обусловленный термическим распадом дырочных O^--центров захвата, характеризуется плавным уменьшением величины $\langle E\rangle$ от 0.40 эВ

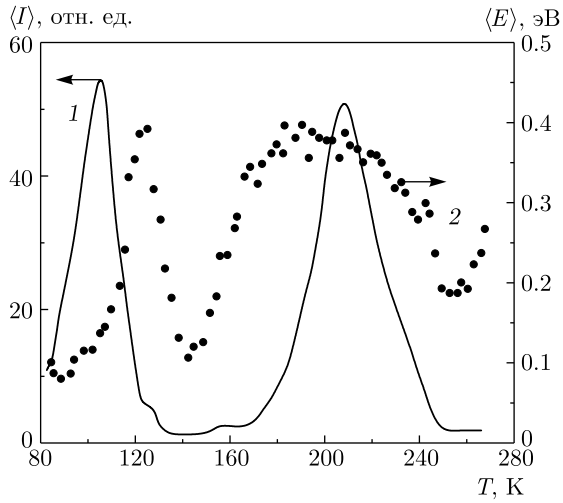


Рис. 6. Температурные зависимости интенсивности ТСЛ (*1*) и средней энергии термической активации $\langle E\rangle$ (*2*) кристалла LBO при линейно-осциллирующем нагреве после облучения рентгеновскими фотонами при 80 K

(T = 180 K) до 0.29 эВ (T = 240 K). Может быть названо несколько предполагаемых причин такого поведения $\langle E\rangle$. Во-первых, в температурной области данного пика ТСЛ начинается термическое тушение собственной люминесценции LBO, которая возбуждается как фотонами с энергией, превышающей E_g, так и в рекомбинационных процессах. Согласно теории термостимулированных процессов в конденсированном состоянии вещества [27], уменьшение выхода рекомбинационной люминесценции в области термостимулированной делокализации носителей заряда приводит к кажущемуся уменьшению наблюдаемой средней энергии термической активации. Во-вторых, пик ТСЛ в кристалле LBO в области температур 180–240 K представляет собой суперпозицию по крайней мере двух элементарных перекрывающихся пиков. Контур и температурное положение данного пика ТСЛ определяются взаимным положением и соотношением интенсивностей его элементарных составляющих. Значение средней энергии $\langle E\rangle$ термической активации, согласно выражению (22), определяется не только энергиями активации элементарных составляющих, но и соотношением их интенсивностей. В этой связи температурная зависимость величины $\langle E\rangle$ в области 180–240 K (см. рис. 6) может отражать изменение вкладов элементарных процессов с ростом температуры. В обоих случаях особенности термоактивационного рекомбинационного процесса в области температур 180–240 K в кристаллах LBO не могут быть связаны с какими-либо проявлениями надтермической эмиссии фотонов. В области пика ТСЛ (180–250 K) кривая $\langle E\rangle(T)$ отражает, по-видимому, температурную зависимость энергии термической активации рекомбинационного процесса.

Иная ситуация имеет место в области более низких температур. При 80–100 K $\langle E\rangle \approx 0.08$–$0.09$ эВ, при дальнейшем повышении температуры величина $\langle E\rangle$ сначала возрастает до максимального значения $E_{max} \approx 0.39$–0.40 эВ (120–125 K), а затем уменьшается до уровня 0.10 эВ (140 K). Численное значение средней энергии активации E_{max} является повышенным для данной области температур и не может быть объяснено в рамках простой модели термостимулированной делокализацией носителей заряда с центров захвата. Выше 140 K кривая $\langle E\rangle(T)$ не имеет подобных особенностей. Возрастание численных значений $\langle E\rangle$ при 140–180 K определяется, согласно выражению (22), ростом вклада носителей заряда, делокализующихся в этой области температур, в общий рекомбинационный процесс.

Сопоставление рис. 4 с экспериментальными результатами, приведенными на рис. 6, дает основания обсуждать наличие в кристаллах LBO флуктуационной перестройки с понижением потенциального барьера в области температур 100–140 K. Очевидно, что в этой области температур имеет место суперпозиция нескольких термостимулированных процессов, что позволяет сделать лишь весьма грубую оценку: T_F = 100 K, E_F = 0.4 эВ. Полагая, что флуктуационная перестройка обусловлена ионным процессом в литиевой подрешетке, энергия термической активации которого по данным электропроводности составляет 0.38 эВ [25], для E_0 = 0.12 эВ получим весьма разумную оценку величины изменения энергетического положения центра захвата B^{2+}: $E_0 - E_1 \approx 25$ мэВ (около 20 %). Это означает, что флуктуационная перестройка локального окружения B^{2+}-центров, изменяющая высоту потенциального барьера на 20 %, обусловливает наблюдаемое изменение параметра $\langle E\rangle$ в области температур 100–140 K (см. рис. 6). Выше нами было показано, что флуктуационная перестройка с уменьшением высоты потенциального барьера может приводить к спонтанным сцинтилляциям.

Действительно, данный эффект имеет место в кристалле LBO при температурах ниже 180 K, а модель дырочного O^--центра [16] включает в себя наличие литиевой вакансии в ближайшем окружении центра, что необходимо для стабилизации дырки на регулярном анионе. В этой связи термостимулированный ионный процесс в литиевой подрешетке, свя-

занный с приобретением подвижности катионом лития, должен приводить к разрушению вакансий и, тем самым, к делокализации дырок с O^--центров. Из общих соображений можно ожидать, что энергия активации делокализации носителей заряда с O^--центров будет совпадать с таковой для термостимулированной миграции катионов лития. Именно такое совпадение и наблюдается в эксперименте: энергия активации ТСЛ в области термического разрушения O^--центров (см. рис. 6) составляет около 380–400 мэВ, что более чем удовлетворительно согласуется с энергией активации ионной электропроводности кристалла LBO (0.38 эВ [25]).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено исследование влияния флуктуационного разупорядочения решетки на термостимулированные процессы переноса энергии электронных возбуждений, приводящие к рекомбинационной люминесценции. Развиты модельные представления, позволяющие обсуждать количественные соотношения между параметрами термофлуктуационного процесса разупорядочения решетки и параметрами термостимулированной люминесценции, регистрируемыми в режиме линейно-осциллирующего изменения температуры. Развиваемая модель предсказывает два наиболее важных экспериментальных проявления влияния флуктуационного разупорядочения решетки на термостимулированные процессы, различающиеся изменениями высоты потенциального барьера центров захвата.

1. Уменьшение высоты потенциального барьера. Для кристаллов трибората лития LBO в настоящей работе получены экспериментальные свидетельства проявления флуктуационного разупорядочения подрешетки подвижных катионов малого радиуса. Показано, что особенности термостимулированной люминесценции LBO, регистрируемой в режиме линейно-осциллирующего нагрева, могут быть объяснены влиянием термостимулированного ионного процесса в литиевой подрешетке LBO, приводящего к флуктуационной перестройке локального окружения центров захвата. Установлено, что в температурной области распада электронного B^{2+}-центра (100–140 K) флуктуационные процессы литиевой подрешетки индуцируют понижение потенциального барьера B^{2+}-центра примерно на 20 %. В качестве сопутствующего результата этот процесс приводит к появлению не только кажущегося роста экспериментальной средней энергии активации рекомбинационного процесса в области термического распада B^{2+}-центра, но и спонтанных сцинтилляций, наблюдаемых в кристаллах боратов лития LBO и LTB при температурах ниже 180 K.

2. Рост высоты потенциального барьера в кристаллах боратов лития в рамках настоящего исследования не был зарегистрирован. Однако в наших ранних работах для оксида бериллия [30] были получены экспериментальные свидетельства, которые в свете развиваемой модели следует трактовать как повышение потенциального барьера в результате флуктуационного разупорядочения решетки, происходящего в температурной области основного дозиметрического пика термостимулированной люминесценции.

Следует отметить, что развиваемая модель, описывающая влияние флуктуационного разупорядочения на термостимулированные процессы переноса энергии электронных возбуждений, носит достаточно общий характер и не ограничивается только лишь кристаллическими системами, рассмотренными в настоящей работе для иллюстрации. Так например, предложенная модель может быть также применена к анализу термостимулированных электрон-ионных процессов при исследовании влияния направленных воздействий на функциональные материалы с целью модификации их свойств.

Финансирование. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта грантового финансирования Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (ИРН AP08855672).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Вест, *Химия твердого тела. Теория и приложения*, Мир, Москва (1988).

2. Н. Н. Кристофель, *Теория примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах*, Наука, Москва (1974).

3. А. И. Непомнящих, Е. А. Раджабов, А. В. Егранов, *Центры окраски и люминесценция кристаллов* LiF, Наука, Новосибирск (1984).

4. Е. И. Бурмакин, *Твердые электролиты с проводимостью по катионам щелочных металлов*, Наука, Москва (1992).

5. Ch. Chen, Y. Wu, A. Jiang et al., J. Opt. Soc. Amer. B **6**, 616 (1989).

6. H. König and R. Hoppe, Z. Anorg. Allg. Chem. **439**, 71 (1978).

7. J. Krogh-Moe, Acta Crystallogr. **15**, 190 (1962).

8. J. Krogh-Moe, Acta Crystallogr. B **24**, 179 (1968).

9. С. Ф. Радаев, Л. А. Мурадян, Л. Ф. Малахова и др., Кристаллография **34**, 1400 (1989).

10. Ч. Б. Лущик, А. Ч. Лущик, *Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах*, Наука, Москва (1989).

11. И. Н. Огородников, М. С. Киселева, ЖЭТФ **142**, 169 (2012).

12. И. Н. Огородников, В. А. Пустоваров, ЖЭТФ **151**, 695 (2017).

13. И. Н. Огородников, С. В. Кудяков, А. Ю. Кузнецов и др., Письма в ЖТФ **19**(13), 77 (1993).

14. И. Н. Огородников, В. Ю. Иванов, А. А. Маслаков и др., Письма в ЖТФ **19**(16), 42 (1993).

15. I. N. Ogorodnikov, A. Yu. Kuznetsov, A. V. Kruzhalov, and V. A. Maslov, Radiat. Eff. Defect. Sol. **136**(1–4), 233 (1995).

16. А. В. Поротников, И. Н. Огородников, С. В. Кудяков и др., ФТТ **39**, 1380 (1997).

17. I. N. Ogorodnikov, A. V. Porotnikov, S. V. Kudyakov, and A. V. Kruzhalov, Mater. Sci. Forum **239–241**, 337 (1997).

18. I. N. Ogorodnikov, L. I. Isaenko, A. V. Kruzhalov, and A. V. Porotnikov, Radiat. Meas. **33**, 577 (2001).

19. И. Н. Огородников, В. Ю. Яковлев, А. В. Кружалов, Л. И. Исаенко, ФТТ **44**, 1039 (2002).

20. И. Н. Огородников, В. Ю. Яковлев, Л. И. Исаенко, ФТТ **45**, 803 (2003).

21. И. Н. Огородников, Н. Е. Порывай, В. А. Пустоваров и др., ФТТ **51**, 1097 (2009).

22. I. N. Ogorodnikov, N. E. Poryvay, V. A. Pustovarov et al., Radiat. Meas. **45**(3–6), 336 (2010).

23. M. Maeda, H. Tachi, K. Honda, and I. Suzuki, Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1 **33**(4A), 1965 (1994).

24. A. É. Aliev, I. N. Kholmanov, and P. K. Khabibullaev, Sol. St. Ionics **118**(1–2), 111 (1999).

25. С. Ф. Радаев, Н. И. Сорокин, В. И. Симонов, ФТТ **33**, 3597 (1991).

26. I. Tale , Phys. St. Solidi (a) **66**, 65 (1981).

27. R. Chen and Y. Kirsh, *Analysis of Thermally Stimulated Processes*, Pergamon Press, Oxford–New York (1981).

28. Ю. Р. Закис, Л. Н. Канторович, Е. А. Котомин и др., *Модели процессов в широкощелевых твердых телах с дефектами*, Зинатне, Рига (1991).

29. И. А. Тале, Изв. АН СССР, сер. Физическая **45**, 245 (1981).

30. И. Н. Огородников, В. Ю. Иванов, *Радиационные воздействия излучений на материалы электронной техники. Оксид бериллия*, Изд-во Урал. ун-та, Екатеринбург (2019), http://hdl.handle.net/10995/75925.

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 403–409 © 2021

О ВОЗМОЖНОСТИ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ ФОНОНЫ–НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В УСЛОВИЯХ НЕСТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛОВОГО ИМПУЛЬСА В ТВЕРДЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ ПРИ ГЕЛИЕВЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Е. И. Саламатов [a], ***А. В. Таранов*** [b*], ***Е. Н. Хазанов*** [b**]

[a] *Физико-технический институт УдмФИЦ Уральского отделения Российской академии наук 426000, Ижевск, Россия*

[b] *Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук 125009, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 марта 2021 г.,
после переработки 16 марта 2021 г.
Принята к публикации 27 мая 2021 г.

Приведены результаты экспериментального исследования транспортных характеристик фононов тепловых частот и теплоемкости $C(T)$ в монокристаллах твердых растворов алюмо-редкоземельных гранатов в области гелиевых температур при наличии низкоэнергетических возбуждений парамагнитной природы. Показано, что в условиях нестационарного процесса распространения теплового импульса возможно установление равновесного состояния в системе неравновесные фононы–двухуровневые системы при определенных длине образца и температуре термостата.

DOI: 10.31857/S0044451021090066

1. ВВЕДЕНИЕ

Температурные зависимости термодинамических характеристик твердых диэлектриков являются сложными интегральными характеристиками, зависящими от большого числа параметров, определяющих транспорт фононов тепловых частот [1]. Данный факт затрудняет конкретизацию механизмов рассеяния фононов при анализе теплопроводности в области гелиевых температур, когда особенности распространения фононов требуют интерпретации в рамках модели нелокальной фононной теплопроводности [2]. В этом случае важны трехфононные процессы, обусловленные ангармонизмом кристаллической решетки, когда по мере роста температуры (энергии) фононов на фоне интенсивного упругого рассеяния на дефектах структуры возможно формирование различных режимов транспорта фононов от классической диффузии до «горячего пятна» [3], т. е. установления температуры в области непосредственно за инжектором фононов.

Температурная зависимость теплоемкости $C(T)$ в области гелиевых температур имеет аддитивный характер и, помимо фононных мод, может отражать наличие как низкоэнергетических колебательных состояний различной природы, так и отдельных колебательных мод, обусловленных наноструктурными особенностями твердого тела [4,5]. Очевидно, что характер «аномалий» температурных зависимостей упомянутых характеристик в области гелиевых температур может сопровождаться изменением транспортных характеристик фононов.

Независимый метод исследования транспортных характеристик фононов в режиме диффузии при наличии низкоэнергетических возбуждений основан на анализе временных характеристик распространения короткого теплового импульса слабонеравновесных фононов (НФ) за времена меньшие, чем характерное время «включения» неупругих фонон-фононных процессов, обусловленных ангармониз-

* E-mail: taranov@cplire.ru
** E-mail: khazanov@cplire.ru

мом решетки [6]. В этом случае процесс рассеяния НФ определяется только упругим взаимодействием с дефектами кристаллической решетки и низкоэнергетическими возбуждениями при их наличии. Данный подход позволяет количественно оценить эффективность упругого рассеяния в зависимости от концентрации и позиций ионов примеси в кристаллах твердых растворов замещения [7], исследовать низкоэнергетические возбуждения [8] и другие особенности структуры, например, возможность формирования «щели» в фононном спектре наноструктурированных керамик [9, 10] и аморфных материалов (стекол) [11, 12].

При совместном анализе результатов независимых экспериментов — температурных зависимостей транспортных характеристик фононов и теплоемкости в монокристаллах твердых растворов содержащих эрбий алюмо-редкоземельных гранатов $Y_{3-x}Er_xAl_5O_{12}$ (YAG:Er), в работе [8] было указано на возможность установления состояния равновесия в системе НФ тепловых частот с низкоэнергетическими возбуждениями в модели двухуровневых систем (ДУС) в области гелиевых температур.

Появление новых результатов, касающихся эффективности взаимодействия НФ с ДУС парамагнитной природы, опубликованных в [8, 13], требует, на наш взгляд, детального рассмотрения вопроса в части анализа критериев установления состояния равновесия в системе НФ–ДУС в условиях нестационарного процесса распространения теплового импульса в образце конкретной длины. Другими словами, когда результаты экспериментов по кинетике фононов могут быть сопоставимы с данными, получаемыми из измерений теплоемкости $C(T)$ при той же температуре, что и является целью настоящей работы.

2. МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе [13] было показано, что для редкоземельных ионов иттриевого ряда наиболее эффективное взаимодействие НФ с низкоэнергетическими возбуждениями в области гелиевых температур наблюдалось в содержащих эрбий алюмо-редкоземельных гранатах (ARG). Поэтому в данном исследовании приведены, в основном, результаты измерений транспортных характеристик НФ и теплоемкости $C(T)$ в области гелиевых температур в монокристаллах содержащих эрбий твердых растворов $Y_{3-x}Er_xAl_5O_{12}$ ($x = 0.6$; 1; 1.5; 3), $Tm_{3-x}Er_xAl_5O_{12}$ ($x = 0$; 1; 2) с энергией низкоэнергетических ДУС $\Delta = 0.6$–1.3 K. Природа этих ДУС обусловлена снятием вырождения основного уровня крамерсова иона Er^{3+} за счет магнитного взаимодействия соседних ионов [8, 14]. Исследованы также образцы $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$ с энергией низколежащего штарковского уровня $\Delta = 5.7$ K, природа которого отражает связь некрамерсова иона Ho^{3+} с локальными электрическими полями кристаллического поля.

Измерения теплоемкости $C(T)$ в образцах того же состава проводились в Ресурсном Центре ЛГУ с помощью комплекса для измерения физических свойств PPMS-9+Ever Cool-II фирмы Quantum Design в интервале температур 1.9–220 K.

Методика исследования кинетических характеристик фононов тепловых частот в режиме диффузии при взаимодействии с низкоэнергетическими возбуждениями в модели ДУС состоит в нагреве коротким импульсом тока ($t < 100$ нс) пленки металла (Au) на одном из торцов исследуемого образца и подробно рассмотрена в работе [15]. Размер образцов в направлении распространения теплового импульса менялся от 0.06 до 0.5 см. Исследования проводились в температурном диапазоне 2.2–3.8 K. Превышение температуры инжектора фононов T_h над температурой термостата T_0 было таково, что $\Delta T = T_h - T_0 \ll T_0$, т. е. фононы являются слабонеравновесными и исследуемый образец имеет температуру термостата. В области гелиевых температур ($T_0 < 4$ K) неупругие фонон-фононные взаимодействия, обусловленные ангармонизмом решетки, в сравнительно коротких образцах маловероятны [2]. Таким образом, в условиях эксперимента эффективность рассеяния НФ определялась в основном взаимодействием с низкоэнергетическими возбуждениями на фоне упругого рассеяния, которое, в свою очередь, обусловлено разностью масс редкоземельных ионов (Re) на додекаэдрических c-позициях замещения в кристаллической решетке твердого раствора ARG. При этом разница в массе редкоземельных ионов относительно Y в YAG:Re делает процесс упругого рассеяния контролируемым и хорошо поддающимся расчету [7].

Измеряемой величиной в эксперименте является время прихода максимума диффузионного сигнала, регистрируемого болометром. В случае упругого рассеяния сигнал описывается решением нестационарного уравнения диффузии, а время прихода максимума сигнала однозначно связано с коэффициентом диффузии

$$t_{m0}(T) = \frac{L^2}{2D_0(T)} \tag{1}$$

(«плоский» источник), где t_{m0} — время прихода максимума сигнала НФ, связанного только с упругим рассеянием, L — длина образца в направлении распространения НФ и D_0 — коэффициент диффузии при упругом рассеянии НФ, $D_0 = v^2\tau_0(T)/3$, v — средняя по поляризации скорость звука, $\tau_0(T) \propto T^{-4}$ — время упругого рассеяния НФ. Измерения проводились в образцах одной геометрии $(l/L) = 2$, где l — линейный размер инжектора фононов. Во всех случаях выделяемая в инжекторе фононов мощность теплового импульса не превышала 0.1 Вт/мм^2.

Наличие неупругих фонон-фононных процессов трансформирует распределение НФ, изменяя их эффективный коэффициент диффузии. При малых числах заполнения инжектируемых фононов в условиях эксперимента эффективными могут быть только процессы распада [16]. Теоретические оценки времени фонон-фононного взаимодействия относительно спонтанного распада $\tau_{ph}(T)$ для фононов тепловых частот в области гелиевых температур на основании упругих постоянных второго и третьего порядка в YAG [17] и экспериментальные наблюдения [6] при $T < 4$ К дают значение в интервале $\tau_{ph}(T) \approx 10^{-3}$–$10^{-2}$ с, что обычно превышает наблюдаемые в эксперименте значения времени регистрации максимума сигнала НФ в образцах $L < 1$ см.

Теоретический анализ транспорта НФ в режиме диффузии при наличии центров захвата в модели ДУС рассмотрен в работах [18, 19]. Было показано, что взаимодействие («пленение») НФ с ДУС на фоне интенсивного упругого рассеяния фононов на дефектах кристаллической решетки может приводить к значительному замедлению транспорта доминантной группы фононов теплового импульса. В работе [20] задача транспорта НФ была рассмотрена с учетом процессов распада фононов, обусловленного ангармонизмом кристаллической решетки. Результаты расчета качественно хорошо отражали характер наблюдаемых в эксперименте температурных зависимостей $t_m(T)$ при $\tau_{ph} < t_m$. Однако в коротких образцах за времена наблюдения $t_m < 10^{-3}$ с, когда процессы неупругого фонон-фононного взаимодействия малоэффективны, результаты эксперимента в образцах YAG : Er продолжали демонстрировать характер неупругого взаимодействия НФ с ДУС — $t_m(L) \propto L$, а определенная из независимых экспериментов [8] температурная зависимость времени взаимодействия НФ с ДУС составляла $\tau_R(T) \propto T^{-5}$. В теоретической работе [21] был рассмотрен механизм неупругого процесса взаимодействия фононов тепловых частот с низкоэнергетическими возбуждениями при установлении температуры в стекле. При этом длина $l_R(T)$ и время $\tau_R(T)$ пробега фононов относительно неупругого взаимодействия оценивались согласно выражению (46) из [2], в предположении, что для тепловых фононов $\omega \approx T$

$$l_R(\omega) \approx (D_0(\omega)\tau_R(\omega))^{1/2}. \tag{2}$$

Разделить вклад упомянутых выше неупругих процессов в формирование особенностей транспортных характеристик НФ не представляется возможным ввиду их одинаковой температурной зависимости $\tau_{ph}(T)$ и $\tau_R(T) \propto T^{-5}$. При этом, согласно оценкам [21], механизм неупругого взаимодействия НФ с низкоэнергетическими ДУС эффективен для всего диапазона измерений $t_m(T)$ ($T < 4$ К). В то же время, как упомянуто выше, вклад в рассеяние неупругого процесса, обусловленного ангармонизмом кристаллической решетки, может быть ограничен при измерениях в образцах $L < 0.5$ см.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе [20] было показано, что при достаточно высокой концентрации твердого раствора ($\geq 20\,\%$) большая часть энергии теплового импульса может быть сосредоточена в системе ДУС. В этом случае при выполнении условия $C(T)/C_{ph}(T) \gg 1$, где теплоемкость системы $C(T) = nC_{tls} + C_{ph}$ (C_{tls} — теплоемкость одной ДУС, n — количество ДУС, C_{ph} — фононная теплоемкость) справедливо соотношение

$$\frac{t_m(T)}{t_{m0}(T)} \propto \frac{C(T)}{C_{ph}(T)}. \tag{3}$$

Левая часть выражения (3) — время регистрации максимума сигнала в измеряемом образце $t_m(T)$, нормированное на время регистрации максимума сигнала, обусловленного только упругим рассеянием $t_{m0}(T)$ в образце той же длины. Правая часть — отношение суммарной (измеренной) теплоемкости $C(T)$ в образце того же состава к фононной (дебаевской). Равенство между левой (кинетической) и правой (термодинамической) частями выражения (3) может отражать равновесное состояние в системе фононы–ДУС в образце конкретной длины. В условиях эксперимента $t_m(T) \gg t_{m0}(T)$.

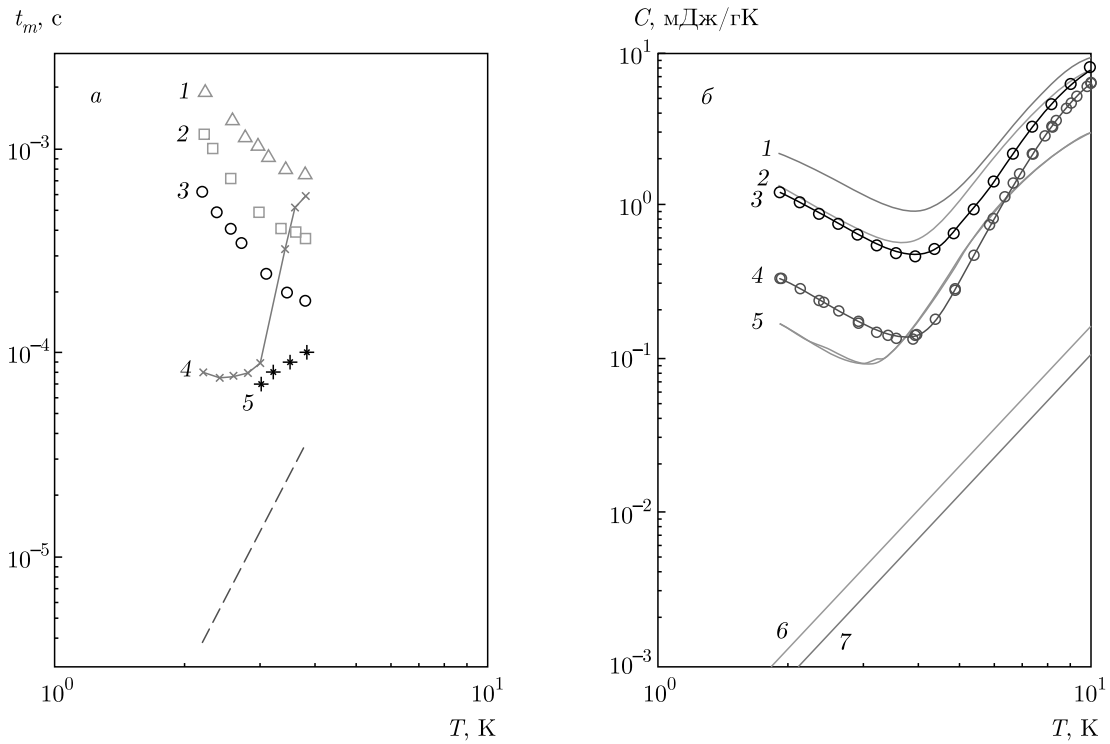


Рис. 1. *а*) Температурные зависимости времени прихода максимума сигнала НФ для образцов $Y_2ErAl_5O_{12}$, $L = 0.12$ см (*1*), $L = 0.25$ см (*2*), $L = 0.5$ см (*3*); $Y_{2.4}Er_{0.6}Al_5O_{12}$, $L = 0.68$ см (*4*); $Y_2ErAl_5O_{12}$, $L = 0.065$ см (*5*); $Y_2LuAl_5O_{12}$, $L = 0.6$ см (штриховая линия). *б*) Температурные зависимости теплоемкости для образцов $Er_3Al_5O_{12}$ (*1*), $Y_2ErAl_5O_{12}$ (*2*), $Er_2TmAl_5O_{12}$ (*3*); $ErTm_2Al_5O_{12}$ (*4*); $Y_{2.4}Er_{0.6}Al_5O_{12}$ (*5*); фононная теплоемкость C_{ph} для $Y_2ErAl_5O_{12}$ (*6*) и $Er_3Al_5O_{12}$ (*7*)

На рис. 1*а* представлены зависимости $t_m(T)$ образцов YAG:Er разной концентрации и длины частично из работы [8]. Зависимости $C(T)$ для различных концентраций представлены на рис. 1*б* из [14]. Видно, что при $T < 4$ К зависимости $t_m(T)$ и $C(T)$ при концентрации твердого раствора не менее 30 % имеют схожий характер ($\propto T^{-2}$), что свидетельствует об определяющем влиянии ДУС на температурные зависимости в упомянутых независимых экспериментах. Штриховая линия на рис. 1*а* соответствует образцу $Y_2LuAl_5O_{12}$ большей длины и с тем же характером упругого рассеяния, что и в $Y_2ErAl_5O_{12}$, обусловленным разницей масс ионов $Y^{3+} \Leftrightarrow Lu^{3+}$, но при отсутствии низкоэнергетических ДУС. Важно подчеркнуть, что в образцах $Y_2ErAl_5O_{12}$ зависимость $t_m(L)$ линейная [8], в то время как в случае классической диффузии (только упругого рассеяния в $Y_2LuAl_5O_{12}$) эта зависимость квадратичная $t_m(L) \propto L^2$. Линейный характер зависимости $t_m(L)$ в YAG : Er свидетельствует о наличии неупругого процесса во взаимодействии НФ с ДУС. Для образцов $Y_2ErAl_5O_{12}$ длиной $L = 0.12$; 0.25; 0.5 см (рис. 1*а*) $\partial t_m/\partial T < 0$. В самом коротком образце, $L = 0.065$ см, $\partial t_m/\partial T > 0$. В последнем случае основную роль в рассеянии фононов играют процессы упругого рассеяния на позициях замещения $Y \Leftrightarrow Re$, т. е. $l_R \geq L$. Смена знака температурной зависимости времени регистрации $t_m(T)$, обусловленная увеличением концентрации ДУС, была рассмотрена в работах [18, 19]. Из данных для 20-процентного образца ($Y_{2.4}Er_{0.6}Al_5O_{12}$) в сочетании с данными по теплоемкости (рис. 1*б*) следует, что при меньшей концентрации твердого раствора в условиях эксперимента состояние равновесия в системе НФ–ДУС, если и возможно, то за пределами исследуемого диапазона температур.

На рис. 2 и 3 приведены температурные зависимости левой и правой частей (штрихпунктир) выражения (3) для образцов разной длины в $Y_2ErAl_5O_{12}$ и $Er_3Al_5O_{12}$. На рис. 2 видно, что температурные зависимости для образца $L = 0.25$ см практически совпадают. Для более короткого образца, $L = 0.12$ см, левая часть выражения (3) больше правой. Это может означать, что на этой длине взаимодействие НФ с ДУС уже эффективно, т. е. $lR < L$, но образец слишком короткий для уста-

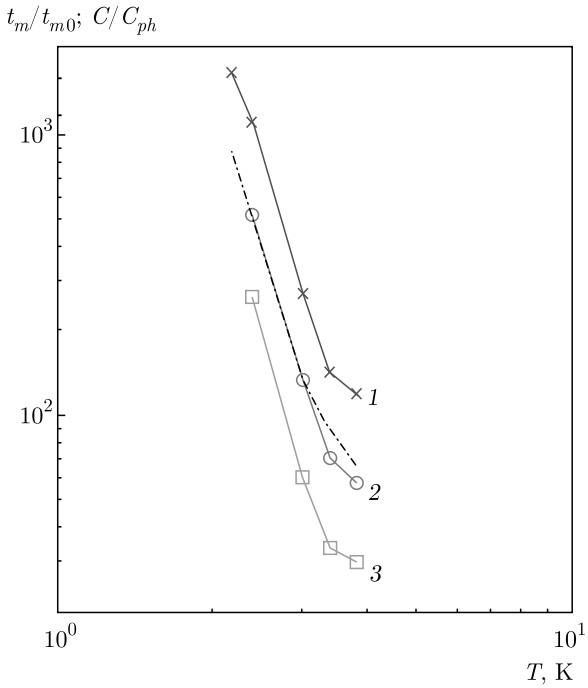


Рис. 2. Температурные зависимости левой и правой частей (штрихпунктир) выражения (3) для образцов $Y_2ErAl_5O_{12}$: $L = 0.12$ см (*1*), 0.25 см (*2*), 0.5 см (*3*)

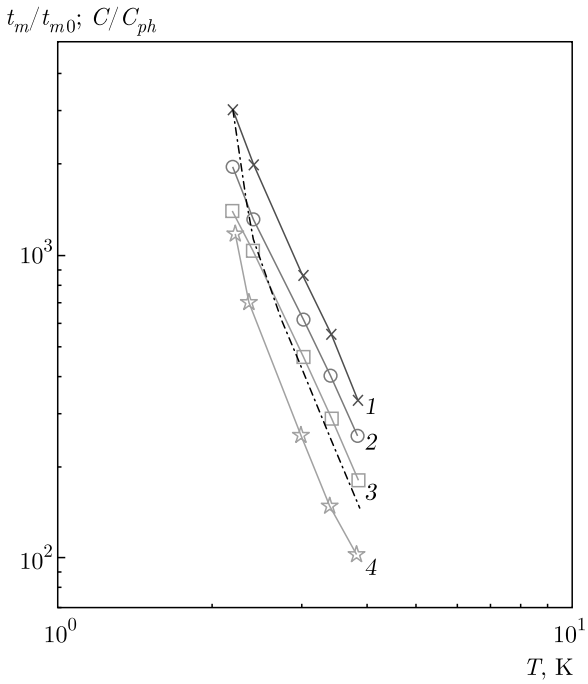


Рис. 3. Температурные зависимости левой и правой частей (штрихпунктир) выражения (3) для образцов $Er_3Al_5O_{12}$: $L = 0.07$ см (*1*); 0.14 см (*2*); 0.22 см (*3*); 0.3 см (*4*)

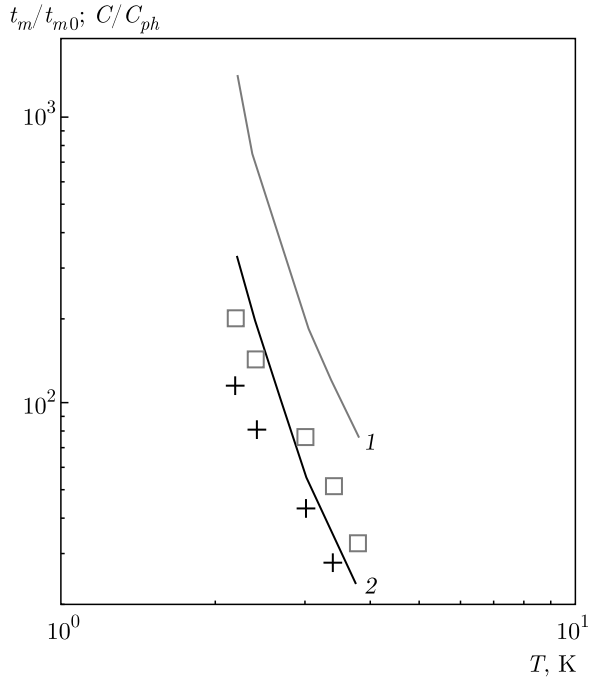


Рис. 4. Температурные зависимости левой и правой частей (сплошные линии) выражения (3) для образцов $TmEr_2Al_5O_{12}$ (*1*) и $Tm_2ErAl_5O_{12}$ (*2*); $L = 0.39$ см

новления состояния равновесия в системе НФ–ДУС. Похожий характер зависимостей наблюдается и на рис. 3 в образце $Er_3Al_5O_{12}$ чуть меньшей длины $L = 0.22$ см. Отличие в том, что состояние равновесия в $Er_3Al_5O_{12}$ при самых низких температурах в исследуемом диапазоне возможно и в более коротких образцах ($L = 0.07$–0.14 см) как результат увеличения концентрации Er и, соответственно, значений отношения C/C_{ph}. Меньшие значения $t_{m0}(T)$ в случае чисто эрбиевого граната определяются только нестехиометрией состава, а именно наличием Er^{3+} (на позициях Al_2) в октаэдрической координации кислорода [22].

Близкие результаты наблюдались и в двух образцах смешанного эрбий-тулиевого граната (рис. 4) $Tm_2ErAl_5O_{12}$ и $TmEr_2Al_5O_{12}$ одинаковой геометрии ($L = 0.39$ см) и с одинаковым характером упругого рассеяния аналогичного $Er_3Al_5O_{12}$. В образце с меньшей концентрацией Er состояние близкое к равновесному в образце данной длины достигается только при $T < 3$ K. На основании результатов исследований, приведенных на рис. 2 и 3, и полагая, что

$$t_m(L)/t_{m0}(L) \propto L/L^2 \propto 1/L$$

из отношения значений двух частей выражения (3) на рис. 4 можно для данных измерений оценить

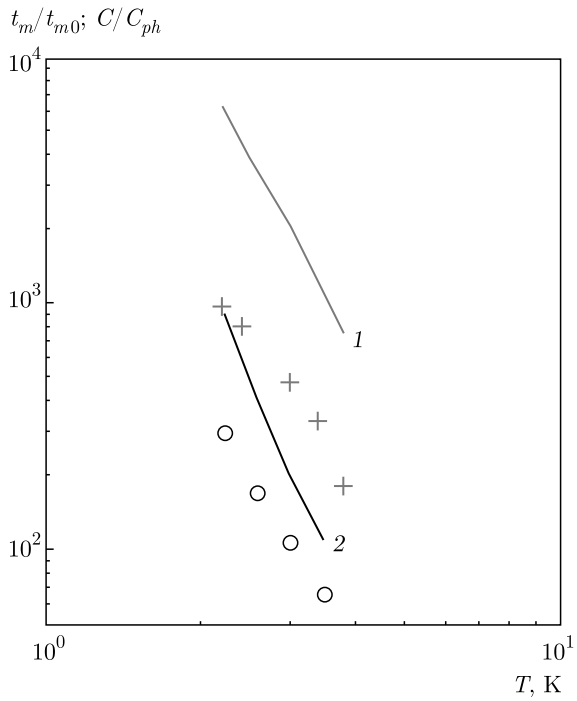


Рис. 5. Температурные зависимости левой и правой частей (сплошные линии) выражения (*3*) для образцов $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$, $L = 0.3$ см (*1*) и $Y_{1.5}Er_{1.5}Al_5O_{12}$, $L = 0.6$ см (*2*)

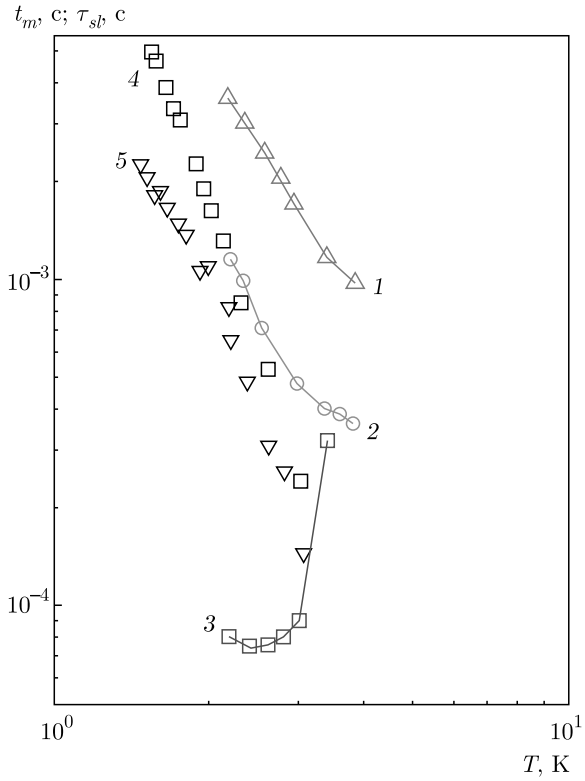


Рис. 6. Температурные зависимости времени прихода максимума сигнала t_m в образцах $Er_3Al_5O_{12}$, $L = 0.22$ см (*1*); $Y_2ErAl_5O_{12}$, $L = 0.25$ см (*2*); $Y_{2.4}Er_{0.6}Al_5O_{12}$, $L = 0.68$ см (*3*) и времени спин-фононной релаксации τ_{sl} в макроскопическом (*4*) и микроструктурированном (*5*) образцах $Y_{2.4}Er_{0.6}Al_5O_{12}$

«критическую» l_{cr} длину образца, при которой возможно состояние равновесия. Например, при $T = 3$ K для образца $Tm_2ErAl_5O_{12}$ $l_{cr} = 0.27$ см, для $TmEr_2Al_5O_{12}$ $l_{cr} = 0.15$ см. Некоторое различие l_{cr} в $Y_2ErAl_5O_{12}$ связано с разными значениями энергии первого возбужденного уровня основного мультиплета $^4I_{15/2}$ иона Er^{3+} (30 K) и мультиплета $^3H_6$ иона Tm^{3+} (39 K) [23] из-за вклада в суммарную теплоемкость.

На рис. 5 приведены данные измерений в двух образцах YAG:Re1.5 (Re = Er, Ho). В отличие от иона Er^{3+} ион Ho^{3+} некрамерсов. Для него в YAG характерно наличие максимума теплоемкости ДУС с энергией $\Delta = 5.7$ K [14]. Приведенные результаты позволяют оценить, в какой мере условия равновесного состояния в системе НФ–ДУС зависят от физической природы ДУС. Для низкоэнергетических возбуждений в образцах Er-содержащих ARG для крамерсова иона характерно широкое распределение ДУС по энергии. Так, в работе [24] в образце 30-процентного состава YAG : Er при исследованиях в более низком интервале температур 93 мК–8 K, наблюдался широкий максимум теплоемкости при $T = 266 \pm 30$ мК. В обоих случаях $C/C_{ph} > t_m/t_{m0}$. Для образца $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$ критическая длина составит $l_{cr} \approx 0.1$ см, а для $Y_{1.5}Er_{1.5}Al_5O_{12}$ равна $l_{cr} \approx 0.27$ см.

Необходимым условием установления состояния равновесия в системе НФ–ДУС в условиях нестационарного процесса является значение времени спин-решеточной релаксации, которое в условиях эксперимента должно быть по крайней мере сопоставимо со временем наблюдения (регистрации) теплового импульса. На рис. 6 на основе данных работы [25] приведены температурные зависимости времени спин-решеточной релаксации τ_{sl} в макроскопическом и микроструктурированном образцах монокристалла $Y_{3-x}Er_xAl_5O_{12}$ ($x = 0.6$). При данной концентрации в макроскопическом образце при обмене энергии с термостатом уже проявляется условие «узкого фононного горла». Таким образом, при относительно высокой концентрации Er в составе твердого раствора ($\geq 20\,\%$), значение времени спин-решеточной релаксации τ_{sl} оказывается сопоставимо с приведенным в тех же координатах значениями времени $t_m(T)$ для концентраций

$x = 1$; 3 соответственно в образцах $L = 0.25$ см и $L = 0.22$ см, для которых, согласно (3), выполняются условия равновесия в системе НФ–ДУС. При этом время спин-решеточной релаксации для упомянутых выше концентраций твердого раствора в исследуемом диапазоне температур лежит в интервале $\tau_{sl} = (1\text{–}3) \cdot 10^{-4}$ с [25], что на два порядка величины больше, чем измеренные в [8] значения времени взаимодействия с ДУС при $T = 3$ К, $\tau_R = (0.7\text{–}3) \cdot 10^{-6}$ с, что свидетельствует о возможности накопления энергии теплового импульса в системе ДУС. В противном случае, когда время спин-решеточной релаксации меньше времени взаимодействия НФ с ДУС, как, например, для крамерсова иона Dy^{3+} в образцах YAG : Dy, $\tau_{sl} = 10^{-7}$–10^{-9} с [13], вклад в рассеяние фононов за счет взаимодействия с ДУС отсутствует, и рассеяние НФ в условиях эксперимента является упругим, обусловленным разницей масс ионов на позициях замещения Y $\Leftrightarrow$ Dy.

Таким образом, в работе рассмотрены особенности взаимодействия фононов тепловых частот с низкоэнергетическими возбуждениями парамагнитной природы в структуре твердых растворов алюмо-редкоземельных гранатов в области гелиевых температур. Смоделирован процесс установления состояния равновесия в образцах монокристаллов твердых растворов ARG:Er при взаимодействии НФ с ДУС в условиях нестационарного распространения теплового импульса. Показано, что процесс может зависеть от природы, абсолютного значения и распределения ДУС по энергии. Данные обстоятельства, а также условия обмена с термостатом определяют критическую длину и время распространения теплового импульса в условиях эксперимента, когда образец находится в диапазоне температур термостата (жидкий гелий) $2.2 < T < 4$ К.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. A. Slack and D. W. Oliver, Phys. Rev. B **4**, 592 (1971).
2. И. Б. Левинсон, ЖЭТФ **52**, 704 (1980).
3. Д. В. Казаковцев, И. Б. Левинсон, ЖЭТФ **88**, 2228 (1985).
4. И. Е. Лезова, Е. И. Саламатов, А. В. Таранов и др., ЖЭТФ **156**, 918 (2019).
5. Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов и др., ЖЭТФ **152**, 910 (2017).
6. С. Н. Иванов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов, ЖЭТФ **99**, 1311 (1991).
7. S. N. Ivanov, E. N. Khazanov, T. Paszkiewicz et al., Z. Phys. B **99**, 535 (1996).
8. Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов и др., ЖЭТФ **154**, 826 (2018).
9. С. Н. Иванов, Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов, ЖЭТФ **133**, 339 (2008).
10. E. Salamatov, A. Taranov, and E. Khazanov, J. Appl. Phys. **114**, 154305 (2013).
11. Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов, ЖЭТФ **148**, 308 (2015).
12. E. Salamatov, Chin. Phys. B **27(7)**, 076502 (2018).
13. А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов, Е. В. Чарная, ЖЭТФ **159**, 111 (2021).
14. E. V. Shevchenko, E. V. Charnaya, E. N. Khazanov et al., J. Alloys and Compounds **717**, 183 (2017).
15. С. Н. Иванов, Е. Н. Хазанов, А. В. Таранов, ЖЭТФ **89**, 1824 (1985).
16. Д. В. Казаковцев, И. Б. Левинсон, Письма в ЖЭТФ **27**, 194 (1978).
17. Y. K. Yogurcu, A. J. Viller, and S. A. Sanders, J. Phys. C.: Solid State Phys. **13**, 6585 (1980).
18. А. Г. Козорезов, ЖЭТФ **100**, 1577 (1991).
19. E. I. Salamatov, Phys. Sol. St. **44**, 978 (2002).
20. Е. И. Саламатов, ФТТ **45**, 691 (2003).
21. И. Б. Левинсон, Письма в ЖЭТФ **37**, 157 (1983).
22. Ю. И. Воронько, А. А. Соболь, Труды ФИАН **98**, 41 (1977).
23. Е. В. Чарная, Е. В. Шевченко, Е. Н. Хазанов и др., Радиотехника и Электроника **64**, 819 (2019).
24. A. Kushino, Y. Aoki, N. Y. Yamasaki et al., J. Appl. Phys. **90**, 5812 (2001).
25. С. Н. Иванов, Е. Н. Хазанов, А. В. Таранов и др., ЖЭТФ **94**, 274 (1988).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 410–414 © 2021

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССА НАГРЕВА И ОХЛАЖДЕНИЯ НА ДЛИНЫ ОДНОМЕРНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУР

А. Г. Сыромятников [a,b*], *С. А. Кудряшов* [a], *А. М. Салецкий* [a], *А. Л. Клавсюк* [a]

[a] *Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия*

[b] *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук 119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 июня 2021 г.,
после переработки 7 июля 2021 г.
Принята к публикации 7 июля 2021 г.

Впервые кинетическим методом Монте-Карло исследовано влияние нагрева и охлаждения на длины одномерных атомных структур. Показано, что переход из одного равновесного состояния в другое при нагреве и охлаждении происходит по-разному. Выявлено, что выше некоторой критической температуры система за время проведения эксперимента быстро достигает термодинамического равновесия, а ниже критической температуры диффузия атомов замедляется и система остается в неравновесном состоянии, которое и наблюдается в большинстве экспериментов.

DOI: 10.31857/S0044451021090078

Одномерные атомные структуры, формирующиеся при эпитаксиальном росте, привлекательны для создания новых современных электронных устройств. При этом для того чтобы их применение в электронных устройствах было возможно, необходимо, чтобы они были одинаковой длины и обладали хорошей системной упорядоченностью [1–4]. Поэтому одномерные структуры и их распределения по размерам исследуются как экспериментально, так и теоретически. Исследование процессов роста атомных структур и исследование влияния внешних факторов на их распределения по длинам имеют первостепенное значение как для понимания физических свойств необратимых систем, далеких от равновесия, так и для установления возможности управления морфологией образующихся структур [1, 2].

Одномерные атомные системы могут быть получены одним из трех способов: сборка атом за атомом [5, 6], а также их самоорганизация как на ступенчатых поверхностях [7–9], так и на поверхностях, обладающих низкими индексами Миллера [10–14]. В большинстве экспериментов для формирования одномерных атомных структур производят отжиг образца при температурах значительно выше комнатной, однако размеры сформировавшихся структур определяют при низких температурах с помощью сканирующего туннельного микроскопа [8, 9, 14].

С теоретической точки зрения существует три подхода к анализу распределения длин одномерных структур. В первом подходе в рамках термодинамики используется одномерная модель решеточного газа. В ее рамках получают аналитическое выражение для функции распределения длин одномерных структур [8, 15, 16]. Основой второго подхода является решение уравнений кинетического баланса, аналитическим решением которых являются масштабирующие функции [17–20]. Несмотря на простоту такого подхода, главным его недостатком является невозможность получения количественных физических характеристик. Третий подход основан на применении кинетического метода Монте-Карло [21–26]. Однако ни в одном из перечисленных подходов не учитывается влияние процессов отжига и охлаждения на распределение длин одномерных атомных структур.

Как при анализе экспериментальных данных, так и во время теоретических расчетов не учитывается тот факт, что атомные одномерные структуры формируются при одной температуре, а измеряют-

* E-mail: ag.syromyatnikov@physics.msu.ru

ся при другой. Однако длина одномерных структур существенно зависит от температуры [21–24].

Главной целью данной работы является исследование влияния процессов нагрева и охлаждения на распределение одномерных атомных структур. В качестве исследуемой системы были выбраны атомные цепочки Ag на поверхности Pt(997), формирование которых было показано экспериментально [8] и объяснено теоретически [27].

Моделирование роста одномерных наноструктур на поверхности было проведено при помощи кинетического метода Монте-Карло. К наиболее значимым событиям в модели можно отнести прыжок отдельного атома к цепочке (барьер составляет 0.24 эВ), прыжок атома от цепочки (0.30 эВ), прыжок атома вдоль ступени (0.24 эВ) и блуждание вакансии по цепочке (0.37 эВ) [24]. Соответствующие им частоты переходов были определены из уравнения Аррениуса

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \tag{1}$$

где E — диффузионный барьер, k — постоянная Больцмана, T — температура подложки. Предэкспоненциальный фактор ν_0 был положен равным 10^{12} Гц. Ступенчатая поверхность Pt(997) имела длину 320 нм и ширину 2.1 нм, что соответствует 10 террасам.

При проведении численного эксперимента каждый расчет состоял из нескольких следующих друг за другом шагов (этапов), которые могли различаться температурой образца, параметрами напыления адатомов, продолжительностью. Температура образца во время одного этапа могла либо оставаться постоянной, либо изменяться по экспоненциальному или линейному закону, подчиняясь следующим выражениям (см. рис. 1*a*, *b*):

$$T_{\text{exp}}(t) = T_2 - (T_2 - T_1)\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \tag{2}$$

$$T_{\text{lin}}(t) = T_1 + (T_2 - T_1)\frac{t}{\Delta t}, \tag{3}$$

где t — время охлаждения образца, T_1 и T_2 — начальная и конечная температуры, Δt — характерное время охлаждения в случае линейного закона изменения температуры, τ — характерное время охлаждения в случае экспоненциального закона изменения температуры. Всего для каждого уникального набора параметров и последовательности этапов проводилось несколько тысяч расчетов, результаты которых усреднялись и анализировались.

В большинстве случаев одномерные атомные структуры получают при отжиге, а измерения их

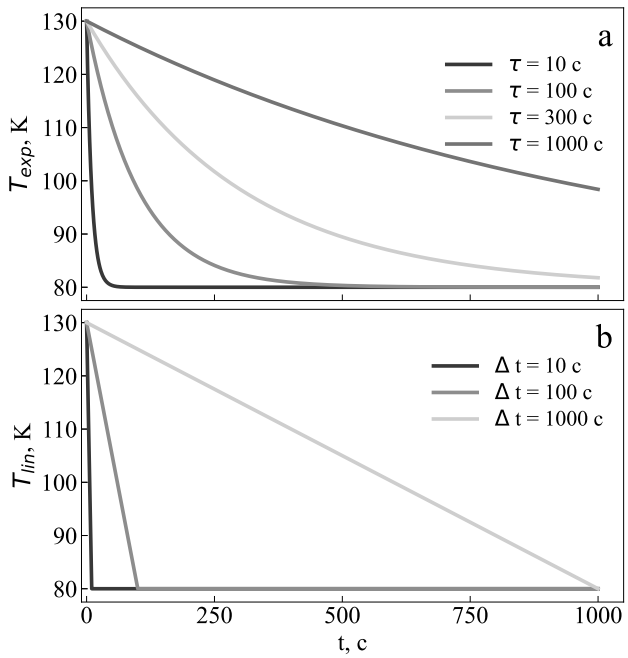


Рис. 1. *a* — Экспоненциальный закон изменения температуры для различных τ. *b* — Линейный закон изменения температуры для различных Δt

длин проводят после охлаждения. Например, атомные цепочки Ag на поверхности Pt(997) растут при 400 K, а распределение по длинам было определено при 77 K [8]. Распределение одномерных атомных структур зависит от множества факторов, в том числе и от температуры [1, 21, 22, 24]. При высоких температурах отжига система быстро достигнет термодинамического равновесия. Результаты моделирования показывают, что атомные цепочки Ag на поверхности Pt(997) при 400 K достигают термодинамического равновесного состояния всего лишь за несколько миллисекунд и хорошо аппроксимируются равновесным распределением длин атомных цепочек [8, 15]. Малое время релаксации обусловлено тем, что отношение диффузионных барьеров для Ag/Pt(997) к kT мало.

При высокой температуре атомы легко отсоединяются от цепочек, поэтому любые цепочки быстро распадаются и формируются новые. Атомы, отсоединившись от цепочек, встречают другие свободные атомы и формируют короткие цепочки. Поэтому при высоких температурах будут наблюдаться преимущественно короткие цепочки (см. рис. 2*c*). В случае высоких температур в термодинамическом равновесии цепочки постоянно распадаются и формируются.

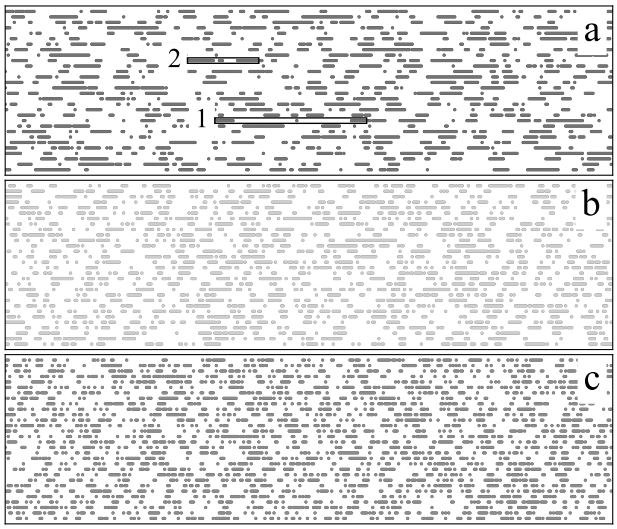


Рис. 2. Фрагменты массивов цепочек на ступенчатой поверхности в системе Ag/Pt(997) при различных температурах, 160 (a), 250 (b) и 400 K (c). Цифрами отмечены (1) одиночный атом между длинными цепочками и (2) короткая цепочка между длинными цепочками

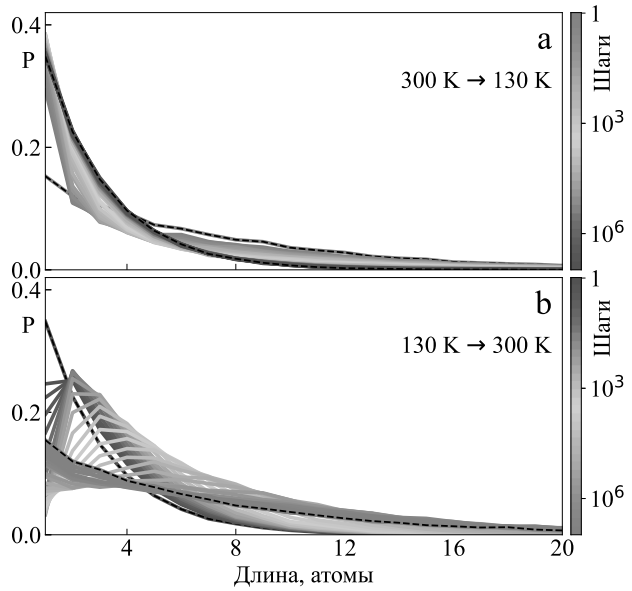


Рис. 3. Распределения длин цепочек во время нагрева и охлаждения по экспоненциальному закону с $\tau = 300$ с. Начальное и конечное состояния выделены черной пунктирной линией. a — Охлаждение с 300 K до 130 K. b — Нагрев с 130 K до 300 K

В процессе нагрева или отжига переход системы из одного термодинамически равновесного состояния в другое можно разделить на две стадии. На первой стадии происходит распад коротких цепочек и рост длинных. Для системы Ag/Pt(997) первая стадия длится около 100 секунд. На второй стадии происходит рост коротких цепочек в тех местах, в которых расстояние между соседними цепочками на первой стадии значительно увеличилось. Поэтому при нагреве распределение длин цепочек будет меняться, как это показано на рис. 3b. Как видно на рис. 3b, на первой стадии распределение будет иметь один характерный максимум для коротких цепочек. На второй стадии распределение принимает вид монотонно убывающего, что соответствует термодинамически равновесному распределению (рис. 3b).

При понижении температуры диффузия атомов замедляется. Отсоединение атомов от цепочек становится маловероятным. Поэтому происходит только диффузия одиночных атомов, которые в дальнейшем присоединяются к существующим цепочкам, увеличивая таким образом их длину. Если атом все же оторвался от цепочки, а расстояние между длинными атомными цепочками небольшое, то такой атом успевает дойти до соседней цепочки, не встретив при этом другие атомы и образовав тем самым димер или короткую цепочку. Таким образом, в термодинамическом равновесии соседние длинные атомные цепочки обмениваются крайними атомами между собой. Возможен и другой случай: между двумя длинными цепочками образовалась короткая цепочка. Поскольку обмен крайними атомами между цепочками является случайным процессом, то может произойти ее распад. Однако в этом случае значительно увеличится расстояние между двумя длинными цепочками. Из-за этого время блуждания отсоединившегося крайнего атома значительно увеличивается, и он не успевает дойти до другой цепочки. Далее, этот атом встретившись с другими отсоединившимися от длинных цепочек и находящимися в этом же промежутке атомами, формирует короткую цепочку. На рис. 2a представлены результаты моделирования, на которых выделены эти два случая. Таким образом, в термодинамическом равновесии в системе происходит или обмен крайними атомами между длинными атомными цепочками, или распад и последующее формирование коротких цепочек.

Процесс охлаждения будет приводить к тому, что количество коротких цепочек будет уменьшаться, а количество длинных — увеличиваться. Поэтому распределения длин атомных цепочек при охлаждении выше критической температуры будет плавно меняться со временем, как это показано на

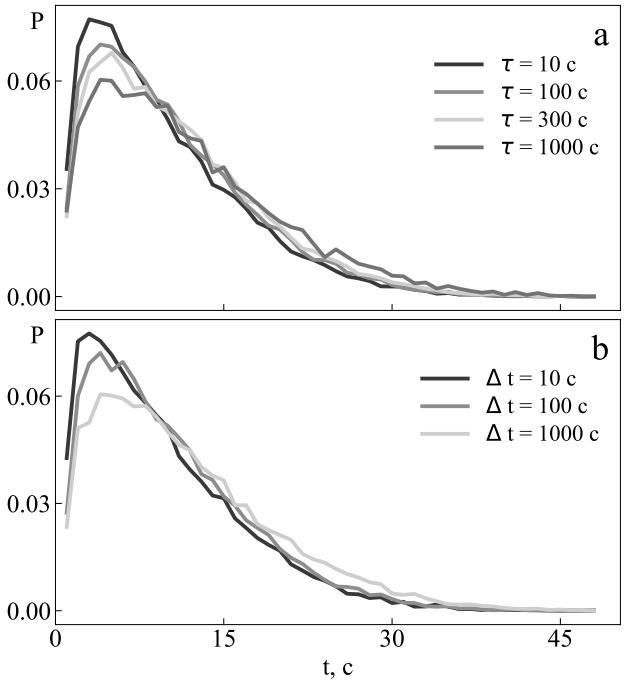


Рис. 4. Распределения длин атомных цепочек после отжига с температурой, меняющейся по экспоненциальному закону (a), см. рис. 1a, и по линейному закону (b), см. рис. 1b

рис. 3a, переходя из одного термодинамически равновесного состояния в другое. Общее количество цепочек при этом будет уменьшается за счет распада коротких цепочек. Как видно на рис. 3, процессы нагрева и охлаждения существенно отличаются друг от друга.

Ниже некоторой критической температуры происходит только диффузия одиночных атомов, которые в дальнейшем присоединяются к цепочкам, и система замораживается. Кроме того, с уменьшением температуры значительно увеличивается время, за которое система достигает термодинамического равновесия. Результаты моделирования показывают, что за время проведения эксперимента система с атомными цепочками серебра на поверхности платины не достигает термодинамического равновесия при температуре ниже 110 K. На рис. 4 показано, как меняется распределение длин цепочек в процессе охлаждения вблизи критической температуры. В этом случае уменьшается число одиночных атомов и коротких цепочек, поскольку за время проведения эксперимента может произойти распад коротких цепочек, состоящих из двух-трех атомов. Для линейного и экспоненциального законов охлаждения распределение по длинам имеет одинаковый вид. В обоих случаях максимум распределения по длинам смещается в область более длинных цепочек при увеличении характерного времени охлаждения. Подобное распределение по длинам и наблюдается экспериментально [8].

Рассматривая нашу систему с точки зрения уравнений кинетического баланса [28], ее можно классифицировать как одномерную с обратимым ростом островов. Диффузия адатомов по поверхности определяется температурой поверхности, а значит и плотность стабильных островов, и их размер тоже являются функцией температуры. Известно, что размеры стабильных островов определяются в том числе так называемыми зонами захвата вокруг них, размеры которых не в последнюю очередь зависят от температуры: увеличиваются с ее ростом и уменьшаются в обратном случае [29]. При этом размеры стабильных островов тоже растут вместе с температурой. Для такой системы характерно мономодальное распределение длин цепочек в случае ниже некоторой критической температуры и монотонное спадающее в случае выше нее, что и наблюдается в нашей системе и согласуется с результатами, представленными в работе [19].

Исследование эволюции одномерных атомных структур в процессе нагрева и охлаждения кинетическим методом Монте-Карло показало, что переход от одного равновесного состояния в другое при нагреве и охлаждении происходит по-разному. Обнаружено, что выше некоторой критической температуры система за время проведения эксперимента быстро достигает термодинамического равновесия, а ниже критической температуры диффузия атомов замедляется и система остается в неравновесном состоянии, что необходимо обязательно учитывать при анализе экспериментальных данных и построении теоретических моделей, описывающих распределение длин одномерных структур.

Благодарности. При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-20034), а также частично в рамках государственного задания (Тема V.45.12, 0082-2014-0012, № АААА-А20-120021390044-2).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Сыромятников, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк, УФН **191**, 705 (2021).

2. А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, УФН **185**, 1009 (2015).

3. S. V. Kolesnikov and I. N. Kolesnikova, Phys. Rev. B **100**, 224424 (2019).

4. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, Eur. Phys. J. B **94**, 85 (2021).

5. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz, D. M. Eigler, and A. J. Heinrich, Science **335**, 196 (2012).

6. S. Foelsch, P. Hyldgaard, R. Koch, and K. H. Ploog, Phys. Rev. Lett. **92**, 056803 (2004).

7. S. Surnev, F. Allegretti, G. Parteder, T. Franz, F. Mittendorfer, J. N. Andersen, and F. P. Netzer, Chem. Phys. Chem. **11**, 2506 (2010).

8. P. Gambardella, H. Brune, K. Kern, and V. I. Marchenko, Phys. Rev. B **73**, 245425 (2006).

9. N. Zaki, D. Potapenko, P. D. Johnson, and R. M. Osgood, Phys. Rev. B **80**, 155419 (2009).

10. P. Ferstl, L. Hammer, C. Sobel, M. Gubo, K. Heinz, M. A. Schneider, F. Mittendorfer, and J. Redinger, Phys. Rev. Lett. **117**, 046101 (2016).

11. J. Aulbach, J. Schaefer, S. C. Erwin, S. Meyer, C. Loho, J. Settelein, and R. Claessen, Phys. Rev. Lett. **111**, 137203 (2013).

12. N. S. Kabanov, R. Heimbuch, H. J. W. Zandvliet, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, Appl. Surf. Sci. **404**, 12 (2017).

13. C. Giovanardi, A. Klein, A. Schmidt, L. Hammer, and K. Heinz, Phys. Rev. B **78**, 205416 (2008).

14. T. F. Mocking, P. Bampoulis, N. Oncel, B. Poelsema, and H. J. W. Zandvliet, Nat. Commun. **4**, 2387 (2013).

15. M. B. Yilmaz and F. M. Zimmermann, Phys. Rev. E **71**, 026127 (2005).

16. A. G. Syromyatnikov, M. R. Guseynova, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, J. Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2020**, 093202 (2020).

17. J. G. Amar, M. N. Popescu, and F. Family, Phys. Rev. Lett. **86**, 3092 (2001).

18. J. Javorský, M. Setvín, I. Ošt'ádal, P. Sobotík, and M. Kotrla, Phys. Rev. B **79**, 165424 (2009).

19. J. R. Albia and M. A. Albao, Phys. Rev. E **95**, 042802 (2017).

20. D. L. González, M. Camargo, and J. A. Sánchez, Phys. Rev. E **97**, 052802 (2018).

21. A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, Phys. Rev. B **97**, 235444 (2018).

22. A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, Surf. Sci. **693**, 121528 (2020).

23. А. Г. Сыромятников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк, Письма в ЖЭТФ **107**, 794 (2018) [A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, JETP Lett. **107**, 766 (2018)].

24. А. Г. Сыромятников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк, Письма в ЖЭТФ **110**, 331 (2019) [A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, JETP Lett. **110**, 348 (2019)].

25. A. Ramadan, F. Picaud, and C. Ramseyer, Surf. Sci. **604**, 1576 (2010).

26. V. I. Tokar and H. Dreyssé, Surf. Sci. **637–638**, 116 (2015).

27. H. Garbouj, M. Said, F. Picaud, C. Ramseyer, D. Spanjaard, and M. C. Desjonqueres, Surf. Sci. **603**, 22 (2009).

28. J. W. Evans, P. A. Thiel, and M. C. Bartelt, Surf. Sci. Rep. **61**, 1 (2006).

29. M. Einax, W. Dieterich, and P. Maass, Rev. Mod. Phys. **85**, 921 (2013).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 415–425 © 2021

ПРОИСХОЖДЕНИЕ ТОЧКИ ПЕРЕГИБА НА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЛОНДОНОВСКОЙ ГЛУБИНЫ В ДЫРОЧНО-ЛЕГИРОВАННЫХ КУПРАТНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

К. К. Комаров**, Д. М. Дзебисашвили**

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 1 апреля 2021 г.,
после переработки 20 апреля 2021 г.
Принята к публикации 20 апреля 2021 г.

В рамках концепции спинового полярона обсуждается сценарий формирования наблюдаемой экспериментально точки перегиба на температурной зависимости лондоновской глубины проникновения λ в купратных высокотемпературных сверхпроводниках при оптимальном дырочном легировании. Показано, что причина возникновения точки перегиба на зависимости $1/\lambda^2(T)$ обусловлена особенностями энергетического спектра спин-поляронных квазичастиц в сверхпроводящей фазе, а также специфической температурной зависимостью их спектральной плотности.

DOI: 10.31857/S004445102109008X

1. ВВЕДЕНИЕ

Эксперименты по измерению температурной зависимости глубины проникновения магнитного поля (или лондоновской глубины) λ дают важную информацию о симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Возможность извлекать информацию о структуре сверхпроводящей щели на основе таких измерений обусловлена тем, что характер температурной эволюции лондоновской глубины определяется главным образом плотностью квазичастичных состояний, доступных для термического возбуждения.

В частности, температурная зависимость величины $1/\lambda^2$, полученная в работе [1] на монокристалле $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, имеет ярко выраженный линейный вид в области низких температур и характеризуется конечным наклоном при $T = 0$. Такое поведение функции $1/\lambda^2(T)$ объясняется наличием нулей в спектре боголюбовских возбуждений в точках k-пространства, расположенных на пересечении поверхности Ферми и линии нулей параметра порядка d-типа, и существенно отличается от известной зависимости $1/\lambda^2(T)$, наблюдаемой в обычных сверхпроводниках с s-типом симметрии параметра порядка и прекрасно описываемой в рамках теории БКШ [2,3].

Линейный ход функции $1/\lambda^2(T)$ на начальном участке наблюдается во многих известных купратных высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) [4–18] и традиционно рассматривается как свидетельство в пользу d-волновой симметрии параметра порядка в этих соединениях.

Другая интересная особенность, наблюдаемая на температурной зависимости $1/\lambda^2$ в некоторых купратных ВТСП, связана с так называемой точкой перегиба. Эта точка определяется значением некоторой температуры T_i, в окрестности которой кривая $1/\lambda^2(T)$ меняет кривизну. Тот факт, что точка перегиба наблюдается не во всех купратах, по-видимому, обусловлен выбором методики измерения и качеством образцов [10]. Так, например, точка перегиба обнаруживает себя только в экспериментах, основанных на спин-вращательной мюонной (μSR) спектроскопии. В достаточно большом числе работ [8, 16, 17, 19–25], использовавших метод μSR-спектроскопии, точка перегиба была обнаружена, однако в некоторых экспериментах [26–29], выполненных в рамках той же методики, точка перегиба себя не проявила. При исследовании лондоновской глу-

* E-mail: constlike@gmail.com
** E-mail: ddm@iph.krasn.ru

бины в ВТСП-купратах на основе других экспериментальных методов данная особенность не была зафиксирована [4, 8, 11, 14].

Описание и сравнение экспериментальных техник, используемых для измерения глубины проникновения магнитного поля, можно найти, например, в работах [30, 31] или в приведенных выше. Мы же отметим важное преимущество μSR-экспериментов, которое состоит в том, что эта техника позволяет напрямую измерять абсолютные значения величины $\lambda^{-2}(T)$ [8]. При использовании других, как правило косвенных, экспериментальных методов измерения лондоновской глубины полученные данные необходимо нормировать на $1/\lambda^2$ при $T = 0$.

Наиболее четко точка перегиба заметна в тех образцах, значения легирования которых близки к оптимальным. Так, в системах $Bi_{2.15}Sr_{1.85}CaCu_2O_{8+\delta}$ и $Bi_{2.1}Sr_{1.9}Ca_{0.85}Y_{0.15}Cu_2O_{8+\delta}$, исследованных в работе [25], точка перегиба на зависимости $\lambda^{-2}(T)$ особенно ярко проявилась в образцах с легированием чуть выше оптимального. Примерно в этой же области легирования точка перегиба наблюдается и в некоторых других соединениях купратов.

Для изучения устойчивости точки перегиба к внешним воздействиям в работе [24] было проведено несколько циклов охлаждения образцов, но результаты экспериментов практически не изменялись. При этом с увеличением магнитного поля зависимость $\lambda^{-2}(T)$ при температурах, меньших T_i, становилась более пологой [16, 29]. Это приводило к тому, что изменение кривизны зависимости $\lambda^{-2}(T)$ в точке перегиба становилось менее заметным. Аналогичное поведение функции $\lambda^{-2}(T)$ наблюдалось и в работе [17], где измерения проводились при изменении давления. Отмеченные факты дают основание полагать, что причина появления точки перегиба на температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины не связана с внешними факторами, а является внутренней по своему происхождению.

Было предложено несколько сценариев возникновения точки перегиба. Так, в работе [32] увеличение скорости роста плотности сверхпроводящего тока при охлаждении в области температур, меньших T_i, в соединении $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ связывалось с термическим депиннингом вихрей Абрикосова. Аналогичный сценарий обсуждался и в работе [24] при изучении лондоновской глубины в соединении $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Однако аналитические расчеты, выполненные в этих работах, показали наличие точки перегиба только для параметра порядка с s-типом симметрии, тогда как для параметра порядка d-типа, характерного для купратов, точка перегиба не наблюдалась. Интересны сценарии появления точки перегиба, предполагающие сосуществование двух сверхпроводящих щелей [21, 22, 33]. При этом в работах [21, 22] рассматривался случай щелей с s- и $d_{x^2-y^2}$-типами симметрии, а в работе [33] — случай щелей d_{xy}- и $d_{x^2-y^2}$-типа.

В данной работе предлагается альтернативный механизм возникновения точки перегиба на температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины в купратных сверхпроводниках. Этот механизм не требует изменения симметрии сверхпроводящего параметра порядка и естественным образом вытекает из рассмотрения подсистемы носителей заряда в CuO_2-плоскости в рамках концепции спинового полярона [34, 35].

Исходным положением этой концепции является сильная связь между спиновыми и зарядовыми степенями свободы, которая реализуется в купратах благодаря сильным электронным корреляциям и значительной величине гибридизации между d-состояниями ионов меди и p-состояниями на ионах кислорода. В рамках спин-поляронного подхода спин-зарядовая связь учитывается точно, что приводит к возникновению фермиевской квазичастицы, движение которой жестко скоррелированно с динамикой локализованных спинов на ближайших ионах меди. Такую квазичастицу принято называть спиновым поляроном.

Концепция спинового полярона развивалась на основе модели решетки Кондо [36–38], а также в рамках спин-фермионной модели (СФМ). Во втором случае спин-поляронный подход оказался особенно успешным при описании свойств купратов как в нормальной [39–43], так и в сверхпроводящей [44, 45] d-фазе.

В работе авторов [46] в рамках концепции спинового полярона была исследована температурная зависимость лондоновской глубины в дырочно-легированных купратных ВТСП. На рассчитанных в этой работе кривых $\lambda^{-2}(T)$ была получена точка перегиба при значениях легирования, как и в эксперименте, близких к оптимальному. Однако причина появления указанной особенности на соответствующих кривых не была вскрыта.

В данной работе будут представлены результаты дополнительного анализа, проясняющие природу точки перегиба. В частности, будет показано, что причина возникновения точки перегиба на зависимости $\lambda^{-2}(T)$ связана с особенностями фермиевского спектра спин-поляронных квазичастиц. Последнее обстоятельство можно рас-

сматривать как дополнительное обоснование правомерности использования спин-поляронного подхода для изучения свойств дырочно-легированных ВТСП медно-оксидной группы.

Дальнейшее изложение организовано следующим образом. В разд. 2 описывается СФМ и отмечаются успехи, достигнутые в рамках этой модели при описании свойств купратов в сверхпроводящей фазе. В разд. 3 формулируется гамильтониан СФМ при учете слабого магнитного поля. В этом же разделе описывается метод получения выражения для расчета температурной зависимости лондоновской глубины в системе спин-поляронных квазичастиц. Причина возникновения точки перегиба на теоретической зависимости лондоновской глубины от температуры вскрывается в разд. 4. В заключительном разд. 5 обсуждается предложенный сценарий формирования точки перегиба и формулируются выводы.

2. СПИН-ФЕРМИОННАЯ МОДЕЛЬ

Наиболее важные особенности кристаллического строения CuO_2-плоскости и все основные типы взаимодействий в электронной подсистеме купратных дырочно-легированных ВТСП учитываются в рамках модели Эмери или трехзонной p–d-модели [47–49]. Основными параметрами этой модели являются интеграл перескока дырок между ионами кислорода, t_{pp}, кулоновское взаимодействие двух дырок на ионе меди, U_d, параметр гибридизации p- и d-орбиталей на ионах кислорода и меди, t_{pd}, а также щель с переносом заряда $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$, где ε_p и ε_d — энергии связи дырок на ионах соответственно кислорода и меди.

Важно отметить, что количественные соотношения между этими параметрам, характерные для купратов, соответствуют режиму сильных электронных корреляций:

$$U_d - \Delta_{pd},\ \Delta_{pd} \gg t_{pd} > t_{pp}.$$

Большие величины параметров U_d и Δ_{pd}, с одной стороны, существенно усложняют теоретическое описание низкотемпературных свойств купратов, а с другой, позволяют проинтегрировать высокоэнергетические степени свободы в модели Эмери и получить формально более простую СФМ [50–54]. Существенно, что в СФМ, в отличие от других эффективных низкоэнергетических моделей купратов, таких, например, как модель Хаббарда или t–J-модель, учитывается пространственная разнесенность дырочных состояний на ионе меди и двух ионах кислорода в одной элементарной ячейке CuO_2-плоскости. Важнейшим взаимодействием в СФМ является обменное взаимодействие между локализованным на ионе меди спином и дыркой на ближайшем ионе кислорода. Энергия этого взаимодействия определяется параметром J. Этот же параметр описывает и интенсивность спин-коррелированных перескоков, аналогичных трехцентровым взаимодействиям в t–J^*-модели, важность которых для реализации сверхпроводящей d-фазы отмечалась в работе [55]. Кроме того, в СФМ учитывается суперобменное взаимодействие в локализованной спиновой подсистеме (с обменным интегралом I), а также кулоновское взаимодействие между дырками на ионах кислорода. В данной работе, как и ранее в работах авторов [46, 56], будет учитываться кулоновское отталкивание двух дырок на одном ионе кислорода с энергией взаимодействия U_p, а также взаимодействие дырок на разных ионах — ближайших (V_1) и следующих за ближайшими (V_2). Гамильтониан СФМ приведен в следующем разделе с учетом дополнительных взаимодействий, обусловленных включением магнитного поля.

Ранее СФМ использовалась при построении теории сверхпроводящей d-фазы купратов в рамках концепции спинового полярона [44,45,57,58]. В частности, было показано, что куперовская неустойчивость развивается в ансамбле спиновых поляронов, а обменное взаимодействие между локализованными на ионах меди спинами (I) обусловливает эффективное притяжение между спин-поляронными квазичастицами и выступает в качестве механизма высокотемпературной сверхпроводимости.

Задачей данной работы является анализ выражения для глубины проникновения магнитного поля, полученного в рамках теории линейного отклика на основе гамильтониана СФМ и концепции спинового полярона. Методика получения выражения для $\lambda^{-2}(T)$ детально изложена в работе [46]. Поэтому в следующем разделе, следуя этой работе, мы лишь кратко опишем основные моменты получения выражения для лондоновской глубины.

3. РАСЧЕТ ФУНКЦИИ ОТКЛИКА В АНСАМБЛЕ СПИНОВЫХ ПОЛЯРОНОВ

Вычисление отклика спин-поляронных квазичастиц на слабое магнитное поле можно провести в рамках теории Лондонов, учитывающей связь меж-

ду плотностью сверхпроводящего тока $\mathbf{j}$ и векторным потенциалом магнитного поля $\mathbf{A}$ в локальном приближении:

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2}\,\mathbf{A},$$

где c — скорость света. Условием применимости теории Лондонов является соотношение $\lambda \gg \xi_L$, где ξ_L — длина когерентности куперовских пар. Для купратных ВТСП это условие выполняется, поскольку для них $\lambda \approx 2540$ Å, $\xi_L \approx 250$ Å (см., например, обзор [59]). Локальный характер уравнения Лондонов позволяет рассматривать векторный потенциал в длинноволновом пределе ($\mathbf{A} = \mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$), а саму величину $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$ считать малой.

Для вычисления сверхпроводящего тока $\mathbf{j}$ необходимо провести обобщение гамильтониана СФМ, включив в него вектор-потенциал $\mathbf{A}$, используя, например, подстановку Пайерлса [60,61]. Суть подстановки состоит в ренормировке интегралов перескока дырок (как между ионами кислорода и меди, так и между ионами только кислорода) фазовым множителем

$$\exp\left\{\frac{ie}{c\hbar}\int\limits_{R_{j'}}^{R_j} d\mathbf{r}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right\} \cong \exp\left\{\frac{ie}{c\hbar}R_{jj'}\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}\right\},$$

где R_j — радиус-вектор иона кислорода с индексом j, $R_{jj'} = R_j - R_{j'}$, e — заряд дырки.

В рамках традиционного подхода [2,3,62,63] принято далее раскладывать в ряд экспоненциальные множители по малой величине векторного потенциала с точностью до второго порядка по $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$, что, в частности, позволяет по отдельности анализировать парамагнитную и диамагнитную части полного сверхпроводящего тока.

Однако при использовании проекционной техники Цванциага – Мори [64,65] (в рамках которой реализуется спин-поляронная концепция в цитированных выше работах) такой подход приводит к трудности, связанной с появлением новых операторов, не входящих в исходный базис. Это обстоятельство не позволяет без расширения базиса получить замкнутое относительно исходного набора операторов выражение для сверхпроводящего тока $\mathbf{j}(\mathbf{q}=0)$. Предложенное в работе [46] решение данной проблемы заключалось в том, чтобы после подстановки Пайерлса не пытаться сразу выделять линейные и квадратичные по $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$ поправки, а сохранить вектор-потенциал в показателе экспоненты. Оказывается, что при таком подходе происходит лишь небольшое изменение определений базисных операторов, но их общее число не возрастает. Кроме того, в результате сохранения вектора $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$ в показателе экспоненты и последующего перехода в квазиимпульсное представление гамильтониан СФМ принимает особенно удобный вид [44]:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{sp\text{-}f} = \sum_{k\alpha}\Big(&\xi_{k,x}a^\dagger_{k\alpha}a_{k\alpha} + \xi_{k,y}b^\dagger_{k\alpha}b_{k\alpha} + \\ &+\Gamma_k\big(a^\dagger_{k\alpha}b_{k\alpha} + b^\dagger_{k\alpha}a_{k\alpha}\big)\Big) + \\ &+ J\sum_{k\alpha}u^\dagger_{k\alpha}L_{k\alpha} + \frac{I}{2}\sum_{f\delta}\mathbf{S}_f\cdot\mathbf{S}_{f+2\delta} + \hat{H}_C. \quad (1)\end{aligned}$$

При записи этого выражения использованы следующие обозначения:

$$\begin{gathered}\xi_{k,x(y)} = \varepsilon_p - \mu + 2\tau s^2_{k,x(y)}, \\ \Gamma_k = (2\tau - 4t_{pp})s_{k,x}s_{k,y}, \quad L_{k\alpha} = \sum_{q\beta}\tilde{S}^{\alpha\beta}_{k-q}u_{q\beta}, \\ \tilde{S}_k = \frac{1}{N}\sum_f \exp(-ikR_f)\,(\mathbf{S}_f\cdot\boldsymbol{\sigma}), \\ u_{k\alpha} = s_{k,x}a_{k\alpha} + s_{k,y}b_{k\alpha}, \\ s_{k,x} = \sin\big(k_x/2 - \alpha_x\big), \quad s_{k,y} = \sin\big(k_y/2\big),\end{gathered} \quad (2)$$

где μ — химический потенциал, τ — интенсивность перескоков дырок, обусловленных процессами гибридизации в исходной модели Эмери во втором порядке теории возмущений, N — число элементарных ячеек в CuO_2-плоскости, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ — вектор, составленный из матриц Паули σ^i $(i = x, y, z)$, $\mathbf{S}_f$ — векторный оператор спина на ионе меди. Функции $s_{k,x(y)}$ возникают при переходе в k-представление и наряду с симметрией CuO_2-плоскости учитывают также соотношения между фазами p- и d-орбиталей.

Первая сумма в выражении (1) отвечает кинетической энергии дырок, возникающих при легировании. Операторы $a^\dagger_{k\alpha}$ $(a_{k\alpha})$ и $b^\dagger_{k\alpha}$ $(b_{k\alpha})$ рождают (уничтожают) дырку в состоянии с квазиимпульсом k и проекцией спина $\alpha = \pm 1/2$ в подсистеме ионов кислорода соответственно с p_x- и p_y-орбиталями. Во второй сумме произведение операторов $u_{k\alpha}$ и $L_{k\alpha}$ описывает движение дырки по ионам кислорода, коррелированное с состоянием спина на ближайшем ионе меди. Третья сумма — оператор энергии суперобменного взаимодействия.

Последнее слагаемое в выражении (1) учитывает энергию кулоновского взаимодействия. В приближе-

нии, указанном в разд. 2, оно имеет вид

$$\hat{H}_C = \frac{U_p}{N}\sum_{1234}\big(a^\dagger_{1\uparrow}a^\dagger_{2\downarrow}a_{3\downarrow}a_{4\uparrow} + (a\to b)\big)\delta_{1+2-3-4} + \\ + \frac{4V_1}{N}\sum_{\substack{1234\\ \alpha\beta}}\phi_{3-2}a^\dagger_{1\alpha}b^\dagger_{2\beta}b_{3\beta}a_{4\alpha}\delta_{1+2-3-4} + \\ + \frac{V_2}{N}\sum_{\substack{1234\\ \alpha\beta}}\big(\theta^{xy}_{2-3}a^\dagger_{1\alpha}a^\dagger_{2\beta}a_{3\beta}a_{4\alpha} + \\ + \theta^{yx}_{2-3}(a\to b)\big)\delta_{1+2-3-4}, \quad (3)$$

где функции

$$\theta^{xy(yx)}_k = \exp(ik_{x(y)}) + \exp(-ik_{y(x)}), \\ \phi_k = \cos\big(k_x/2\big)\cos\big(k_y/2\big) \quad (4)$$

возникли аналогично функциям $s_{k,x(y)}$ при переходе в квазиимпульсное представление и учитывают симметрию CuO_2-плоскости. Цифрами в выражении (3) для простоты обозначены квазиимпульсы, закон сохранения которых обеспечивают символы Кронекера $\delta_{1+2-3-4}$.

Отмеченное выше удобство записи гамильтониана СФМ в форме (1) обусловлено тем, что зависимость от поля векторного потенциала $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$, направление которого выбрано вдоль оси x, выразилась лишь в фазовом сдвиге в аргументе тригонометрической функции $s_{k,x}$ (2). Величина сдвига α_x определяется выражением

$$\alpha_x = \frac{eg_x}{2c\hbar}A^x_{\mathbf{q}=0}, \quad (5)$$

где g_x — параметр элементарной ячейки в направлении оси x.

Зеемановская энергия, обусловленная взаимодействием поля со спинами дырок, в гамильтониане (1) не учитывается, поскольку в длинноволновом пределе ($\mathbf{q}\to 0$) эта энергия обращается в нуль.

Для параметров СФМ использовались следующие численные значения (в эВ):

$$\tau = 0.1, \quad J = 3.4, \quad I = 0.136\ [66],$$
$$t_{pp} = 0.11\ [43, 67], \quad U_p = 4.0\ [68, 69],$$
$$V_1 = 1.5\ [70], \quad V_2 = 0.12\ [71].$$

Мы не будем останавливаться на обсуждении значений этих параметров, так как этот вопрос подробно рассматривался в соответствующих цитированных работах. Отметим только, что согласно результатам работы [67], параметр V_1, отвечающий интенсивности кулоновского взаимодействия дырок на ближайших ионах кислорода, не влияет на значение T_c, поскольку по симметрийным причинам выпадает из системы уравнений для d-волнового параметра порядка.

Выражение для плотности сверхпроводящего тока получается, как обычно [61], варьированием гамильтониана по полю векторного потенциала и последующим усреднением по термодинамическому ансамблю. Причем матрица плотности, с которой проводится усреднение, должна учитывать поле $\mathbf{A}_{\mathbf{q}=0}$. В результате выражение для плотности сверхпроводящего тока получается в виде

$$j_x(\mathbf{q}=0) = \frac{eg_x}{\hbar}\sum_{k\alpha}\cos\left(\frac{k_x}{2} - \alpha_x\right)\Big(2\tau s_{k,x}\langle a^\dagger_{k\alpha}a_{k\alpha}\rangle + \\ + 2\big(\tau - 2t_{pp}\big)s_{k,y}\langle a^\dagger_{k\alpha}b_{k\alpha}\rangle + J\langle a^\dagger_{k\alpha}L_{k\alpha}\rangle\Big), \quad (6)$$

где зависимость от поля векторного потенциала $A^x_{\mathbf{q}=0}$ определяется только как аддитивная ренормировка квазиимпульса k_x на величину α_x. Эта ренормировка в формуле (6) учитывается как явным образом — в аргументе косинуса и в функции $s_{k,x}$, так и неявным — в термодинамических средних.

Отметим, что полученное выражение (6) дает правильное предельное поведение плотности сверхпроводящего тока при переходе в нормальную фазу. Как показано в работе [46], в пределе $T\to T_c$ правая часть выражения (6), как и должно быть, тождественно обращается в нуль.

Выражение для глубины проникновения магнитного поля следует из уравнения Лондонов

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2}\,\mathbf{A}$$

и имеет вид

$$\frac{1}{\lambda^2} = -\frac{2e\pi}{c^2\hbar g_y g_z}\,\frac{j_x(\mathbf{q}=0)}{N\alpha_x}, \quad (7)$$

где $g_{y(z)}$ — параметр решетки вдоль оси $y(z)$, а плотность тока $j_x(\mathbf{q}=0)$ определяется выражением (6).

Поскольку значения λ^{-2} должны вычисляться по формуле (7) в пределе $A^x_{\mathbf{q}=0}\to 0$, вторая дробь, стоящая в правой части выражения (7), есть с точностью до константы просто производная плотности тока по вектор-потенциалу в точке $A^x_{\mathbf{q}=0} = 0$. Это означает, что при определении лондоновской глубины фактически учитываются только линейные по $A^x_{\mathbf{q}=0}$ поправки к плотности тока $j_x(\mathbf{q}=0)$, как это и должно быть в теории линейного отклика.

Явная зависимость плотности тока от векторного потенциала, вследствие используемого проекционного метода, оказывается довольно сложной. Несмотря на то, что аналитическое вычисление производной плотности тока по α_x, в принципе, возможно, более простым решением оказывается численное

дифференцирование. При этом, разумеется, значения α_x необходимо выбирать из того интервала, в котором функция $j_x(\alpha_x)$ линейна [46].

4. ПРОИСХОЖДЕНИЕ ТОЧКИ ПЕРЕГИБА НА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЛОНДОНОВСКОЙ ГЛУБИНЫ

Существенным для вычисления плотности тока является тот факт, что в определении термодинамических средних в формуле (6) фигурируют только три оператора: $a_{k\alpha}$, $b_{k\alpha}$ и $L_{k\alpha}$, и именно те, которые используются в определении гамильтониана СФМ (1). Если бы в гамильтониане (1) было проведено разложение соответствующих экспонент до второго порядка по потенциалу $A^x_{\mathbf{q}=0}$, как это обычно принято, то в выражении для тока возник бы дополнительный составной оператор вида

$$\sum_{q\beta} \tilde{S}^{\alpha\beta}_{k-q} \left[\cos\left(\frac{q_x}{2}\right) a_{q\beta} + s_{q,y} b_{q\beta}\right],$$

который, очевидно, не сводится к линейной комбинации исходных трех операторов $a_{k\alpha}$, $b_{k\alpha}$ и $L_{k\alpha}$.

Таким образом, в рамках предложенной схемы расчета плотности сверхпроводящего тока базисными можно считать шесть операторов. Первые три — это операторы $a_{k\uparrow}$, $b_{k\uparrow}$ и $L_{k\uparrow}$. Базис этих операторов достаточен для удовлетворительного описания, например, спектральных свойств купратов в нормальной фазе (см. рис. 1). При этом следует обратить внимание на исключительную важность оператора $L_{k\alpha}$. Включение в базис именно $L_{k\alpha}$ позволяет корректно учесть сильную связь локализованного на ионе меди спина и дырки, движущейся по четырем ближайшим ионам кислорода [42]. Для описания аномальных свойств ансамбля спиновых поляронов в базис операторов необходимо добавить еще три оператора: $a^\dagger_{-k\downarrow}$, $b^\dagger_{-k\downarrow}$ и $L^\dagger_{-k\downarrow}$ [44].

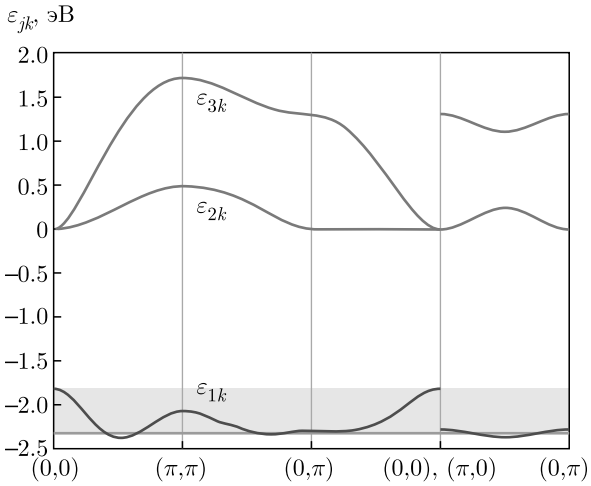


Рис. 1. (В цвете онлайн) СФМ-спектр фермиевских возбуждений в нормальной фазе. Нижняя зона ε_{1k} соответствует спин-поляронным состояниям (синие кривые), формирующимся за счет сильной спин-фермионной связи J. Верхние зоны, ε_{2k} и ε_{3k}, образованы в основном чисто дырочными состояниями. Эти зоны в режиме низкой плотности, когда химический потенциал (зеленая прямая) лежит в нижней спин-поляронной зоне, остаются пустыми. Особенность спин-поляронного спектра характеризуется наличием минимума в окрестности точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ [43, 72]

В работе [46] указанный базис из шести операторов, $a_{k\uparrow}$, $b_{k\uparrow}$, $L_{k\uparrow}$, $a^\dagger_{-k\downarrow}$, $b^\dagger_{-k\downarrow}$ и $L^\dagger_{-k\downarrow}$, использовался для вычисления термодинамических средних, входящих в выражение (6) для сверхпроводящего тока. Расчет проводился в рамках проекционного метода Цванцига – Мори [64, 65], на основе которого в предыдущих работах [39, 42] была реализована концепция спинового полярона. В результате расчета термодинамических средних в формуле (6) и подстановки полученного результата для тока в формулу (7) было найдено выражение для обратного квадрата глубины проникновения. В силу объемности этого выражения мы не станем его воспроизводить здесь полностью, но чуть ниже приведем только ту его часть, которая будет необходима для наших целей.

Пример зависимости $\lambda^{-2}(T)$, полученной в работе [46] для значения легирования $x = 0.17$ на основе самосогласованных численных расчетов уравнения для $j_x(\mathbf{q} = 0)$ (совместно с уравнением для параметра порядка и химического потенциала), продемонстрирован на рис. 2 сплошной кривой. Важным результатом этих численных расчетов стало обнаружение на теоретической зависимости $\lambda^{-2}(T)$ точки перегиба, которая неплохо воспроизвела аналогичную особенность на экспериментальной зависимости, представленной на этом же рис. 2 символами в виде квадратов. Однако физическая причина возникновения точки перегиба на теоретических кривых в цитированных работах не была вскрыта.

Как следует из выражения (7), для ответа на данный вопрос необходимо взять производную по фазе α_x от довольно сложного выражения для тока $j_x(\mathbf{q} = 0)$, полученного ранее [46]. В результате возникает большая совокупность слагаемых, каждое из которых следует проанализировать. К счастью, выписывать все эти слагаемые здесь нет необходимости, поскольку, как показал численный анализ, только одно из них приводит к точке перегиба на кривой $1/\lambda^2(T)$. Это слагаемое имеет вид

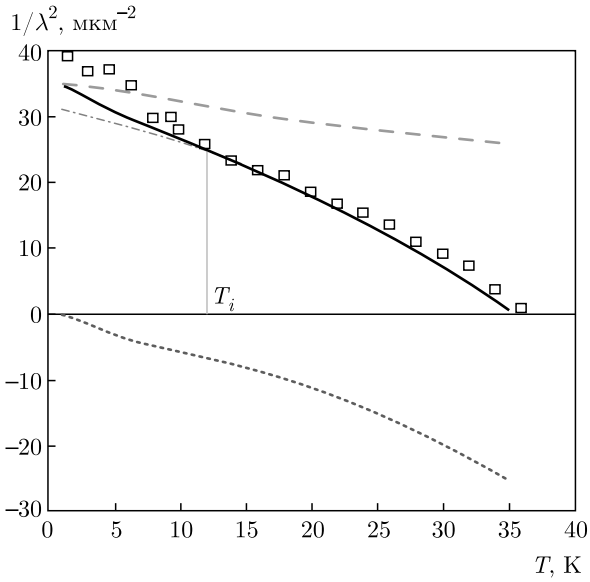


Рис. 2. Точка перегиба на экспериментальной и теоретической температурных зависимостях обратного квадрата лондоновской глубины при $x = 0.17$. Сплошная кривая рассчитана в спин-поляронном подходе, символы — экспериментальные данные для $La_{1.83}Sr_{0.17}CuO_4$ [21, 24]. Штрихпунктирная линия при $T < T_i$ — экстраполяция функции $\lambda^{-2}(T)$ с правой стороны от точки перегиба T_i. Нижняя пунктирная кривая демонстрирует температурную зависимость слагаемого (8), выделенного из правой части выражения (7) для λ^{-2}. Верхняя штриховая кривая отражает сумму остальных слагаемых в правой части формулы (7). Сумма пунктирной и штриховой кривых есть сплошная кривая. Параметры модели (в эВ): $J = 3.4$, $\tau = 0.1$, $I = 0.136$, $t_{pp} = 0.11$, $U_p = 4.0$, $V_2 = 0.12$

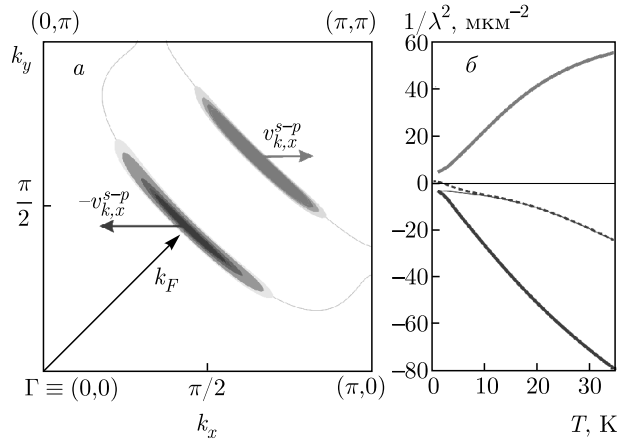


Рис. 3. (В цвете онлайн) Возникновение точки перегиба на зависимости $1/\lambda^2(T)$ в рамках концепции спинового полярона. *а*) Две окрестности точек пересечения линии нулей параметра порядка и поверхности Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна показаны синим и красным цветом (допирование $x = 0.17$ и $T = 20$ K); проекции скоростей на горизонтальную ось для квазичастиц из красной области противоположны по знаку соответствующим проекциям скоростей для квазичастиц из синей области. *б*) Вклады в температурную зависимость выражения (8) от красной и синей областей зоны Бриллюэна обозначены соответственно красным и синим цветом; конкуренция двух этих вкладов в итоге и приводит к появлению точки перегиба на температурной зависимости $\lambda^{-2}(T)$, представленной на рис. 2 сплошной линией, а на рис. 3*б* — штриховой. Параметры модели такие же, как и на рис. 2

$$\frac{3\pi g_x e^2}{\hbar g_y g_z c^2} J^2(\varepsilon_p - \mu)\frac{1}{N} \times \\ \times \sum_k \frac{f'(E_k/T)\sin(k_x)\varepsilon_{2k}\varepsilon_{3k}}{(E_k^2 - \varepsilon_{2k}^2)(E_k^2 - \varepsilon_{3k}^2)} v_{k,x}^{s-p}. \quad (8)$$

В выражении (8) штрих у функции распределения Ферми–Дирака $f(x) = (e^x + 1)^{-1}$ означает ее производную по энергии боголюбовских возбуждений $E_k = \sqrt{(\varepsilon_{1k} - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}$, где $|\Delta_k|^2$ — функция щели $d_{x^2-y^2}$-типа симметрии [73]; T — температура. Три ветви спектра ε_{jk} ($j = 1, 2, 3$) описывают зонную структуру спин-поляронных квазичастиц в нормальной фазе (см. рис. 1). Посредством $v_{k,x}^{s-p}$ обозначена проекция скорости спин-поляронных квазичастиц на ось x:

$$v_{k,x}^{s-p} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon_{1k}}{dk_x}. \quad (9)$$

На рис. 2 пунктирной нижней кривой продемонстрирована температурная зависимость слагаемого (8), выделенного из общего выражения для λ^{-2}, полный вид которого приведен в работе [46]. В окрестности 12 K на этой кривой наблюдается смена кривизны, отвечающая точке перегиба. Верхней штриховой линией показана температурная зависимость всех остальных вкладов, оставшихся в выражении для λ^{-2} после выделения слагаемого (8). Видно, что температурная зависимость этих вкладов не обнаруживает особенностей, указывающих на наличие точки перегиба. Сплошная линия на рис. 2 является суммой пунктирной и штриховой линий и описывает, как уже говорилось выше, температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины при легировании $x = 0.17$. Таким образом, мы видим, что наличие точки перегиба на результирующей кривой $\lambda^{-2}(T)$ обусловлено исключительно слагаемым (8).

Анализ структуры выражения (8) позволяет вскрыть причину аномального температурного поведения λ^{-2}. Действительно, поскольку при низких температурах производная функции Ферми–Дирака в формуле (8) пропорциональна дельта-функции,

основной вклад в сумме по квазиимпульсу k набирается в окрестности точек зоны Бриллюэна, где E_k обращается в нуль, т. е. на пересечении поверхности Ферми (дырочных карманов) и линий нулей параметра порядка d-типа. В каждом квадранте зоны Бриллюэна таких точек две. На рис. 3*а* окрестности этих точек выделены синим и красным цветом.

Важным обстоятельством для объяснения возникновения точки перегиба на кривой $1/\lambda^2(T)$ является то, что групповые скорости фермиевских квазичастиц в этих двух областях имеют противоположные знаки. Это приводит к тому, что вклады от красной и синей областей в сумму в выражении (8) оказываются противоположными по знаку. Температурные зависимости вкладов в интеграл (8) по отдельности от красной и синей областей (увеличивающихся по площади при возрастании температуры) представлены на рис. 3*б* соответственно красной и синей линиями. Вклад от синей области (расположенной ближе к Г-точке зоны Бриллюэна) — отрицательный, а его зависимость от температуры имеет вогнутый вниз вид. Вклад от красной области (расположенной дальше от Г-точки), напротив, — положительный, а его температурная зависимость выгнута вверх. В результате конкуренции вкладов в интеграл (8) от этих двух областей и возникает точка перегиба на итоговой зависимости $1/\lambda^2(T)$, представленной на рис. 2 сплошной линией.

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный в рамках концепции спинового полярона анализ показал, что причина возникновения точки перегиба на температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины в купратных ВТСП обусловлена особенностями спектра спин-поляронных квазичастиц, связанными с наличием в каждом квадранте зоны Бриллюэна двух точек пересечения поверхности Ферми с линией нулей d-волнового параметра порядка.

Важное значение для появления точки перегиба имеет не только тот факт, что состояния фермиевских спин-поляронных квазичастиц в окрестности отмеченных двух точек пересечения дают конкурирующий по знаку вклад в выражение для $1/\lambda^2$, но и то, что характер температурной зависимости этих вкладов — разный (см. рис. 3*б*). Температурная зависимость вклада от состояний из ближайшей к Г-точке зоны Бриллюэна окрестности (синяя область на рис. 3*а*) имеет вогнутый вниз вид, тогда как температурная зависимость вкладов от удаленной от Г-точки окрестности (красная область на рис. 3*а*) выгнута вверх. Последнее обстоятельство обусловлено разной температурной зависимостью спектрального веса квазичастиц из указанных двух окрестностей точек пересечения поверхности Ферми и линии нулей параметра порядка. Очевидно, что специфика этой зависимости обусловлена спин-поляронной природой фермиевских квазичастиц.

В данной работе анализ причины возникновения точки перегиба на температурной зависимости лондоновской глубины в купратных ВТСП был проведен при значении легирования $x = 0.17$, близком к оптимальному. Выбор этого значения x обусловлен прежде всего тем, что именно в области оптимального легирования точка перегиба экспериментально определяется наиболее четко. С другой стороны, теоретические температурные зависимости λ^{-2}, полученные в работе [46], лучше всего согласуются с экспериментальными кривыми для значений x из интервала $0.12 < x < 0.2$, включающем в себя область оптимального легирования. При этом с увеличением легирования точка перегиба смещается в область более низких температур, а при уменьшении x — в область более высоких T. За пределами интервала $0.12 < x < 0.2$ согласие с экспериментом ухудшается по следующим, как нам видится, причинам: при значениях $x > 0.2$ использованное в работе приближение низкой плотности оказывается недостаточным, а при $x < 0.12$ важными становятся псевдощелевые эффекты, которые в данной теории не учитываются.

Необходимо также сделать следующее замечание относительно топологии поверхности Ферми. Представление о поверхности Ферми в слаболегированных купратных ВТСП в виде четырех дырочных карманов, центрированных в окрестности точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ зоны Бриллюэна, есть результат численных расчетов, основанных по большей части на модельных гамильтонианах. Экспериментально же наблюдается только ближний к Г-точке зоны Бриллюэна край дырочного кармана — так называемые ферми-арки (синяя область на рис. 3*а*). Дальний край дырочного кармана (красная область на рис. 3*а*) обычно (например, в ARPES-экспериментах [74, 75]) не виден. Считается, что спектральный вес этих состояний существенно подавлен вследствие значительного спин-флуктуационного рассеяния [76, 77]. Подавление спектрального веса состояний, отвечающих красной области, приведет, очевидно, к уменьшению их вклада в выражение (8) для $1/\lambda^2$ и, соответственно, к увеличению относи-

тельного вклада состояний из синей области. Как видно из сравнения соответствующих кривых на рис. 3*б*, это должно привести к еще большему наклону результирующей зависимости $1/\lambda^2(T)$ в области низких температур, и, как следствие, можно ожидать еще более сильного проявления точки перегиба.

Отметим, наконец, что отличительная черта предложенного в данной работе сценария появления точки перегиба на зависимости $1/\lambda^2(T)$ состоит в отсутствии необходимости модифицировать симметрию d-волнового параметра порядка, например, добавлением s-компоненты, как это было сделано в работах [21, 22]. В рамках спин-поляронного подхода точка перегиба возникает естественным образом, и поэтому ее экспериментальное наблюдение может рассматриваться как обоснование правомерности использования концепции спин-поляронных квазичастиц для описания спектральных и сверхпроводящих свойств купратных сверхпроводников.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 18-02-00837, 20-32-70059).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. N. Hardy, D. A. Bonn, D. C. Morgan, R. Liang, and K. Zhang, Phys. Rev. Lett. **70**, 3999 (1993).
2. M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, Courier Corporation, North Chelmsford, Massachusetts, US (2004).
3. J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, CRC Press, Boca Raton, Florida, US (2018).
4. T. Jacobs, S. Sridhar, Qiang Li, G. D. Gu, and N. Koshizuka, Phys. Rev. Lett. **75**, 4516 (1995).
5. C. Panagopoulos, J. R. Cooper, G. B. Peacock, I. Gameson, P. P. Edwards, W. Schmidbauer, and J. W. Hodby, Phys. Rev. B **53**, R2999(R) (1996).
6. D. M. Broun, D. C. Morgan, R. J. Ormeno, S. F. Lee, A. W. Tyler, A. P. Mackenzie, and J. R. Waldram, Phys. Rev. B **56**, R11443(R) (1997).
7. C. Panagopoulos, J. R. Cooper, and T. Xiang, Phys. Rev. B **57**, 13422 (1998).
8. C. Panagopoulos, B. D. Rainford, J. R. Cooper, W. Lo, J. L. Tallon, J. W. Loram, J. Betouras, Y. S. Wang, and C. W. Chu, Phys. Rev. B **60**, 14617 (1999).
9. R. F. Wang, S. P. Zhao, G. H. Chen, and Q. S. Yang, Appl. Phys. Lett. **75**, 3865 (1999).
10. K. M. Paget, S. Guha, M. Z. Cieplak, I. E. Trofimov, S. J. Turneaure, and T. R. Lemberger, Phys. Rev. B **59**, 641 (1999).
11. A. Hosseini, R. Harris, S. Kamal, P. Dosanjh, J. Preston, R. Liang, W. N. Hardy, and D. A. Bonn, Phys. Rev. B **60**, 1349 (1999).
12. D. M. Broun, W. A. Huttema, P. J. Turner, S. Özcan, B. Morgan, R. Liang, W. N. Hardy, and D. A. Bonn, Phys. Rev. Lett. **99**, 237003 (2007).
13. T. R. Lemberger, I. Hetel, A. Tsukada, and M. Naito, Phys. Rev. B **82**, 214513 (2010).
14. T. R. Lemberger, I. Hetel, A. Tsukada, M. Naito, and M. Randeria, Phys. Rev. B **83**, 140507(R) (2011).
15. A. V. Pronin, T. Fischer, J. Wosnitza, A. Ikeda, and M. Naito, Physica C **473**, 11 (2012).
16. J. E. Sonier, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 091005 (2016).
17. Z. Guguchia, R. Khasanov, A. Shengelaya, E. Pomjakushina, S. J. L. Billinge, A. Amato, E. Morenzoni, and H. Keller, Phys. Rev. B **94**, 214511 (2016).
18. I. Božović, X. He, J. Wu, and A. T. Bollinger, Nature **536**, 309 (2016).
19. J. E. Sonier, J. H. Brewer, R. F. Kiefl, G. D. Morris, R. I. Miller, D. A. Bonn, J. Chakhalian, R. H. Heffner, W. N. Hardy, and R. Liang, Phys. Rev. Lett. **83**, 4156 (1999).
20. A. T. Savici, A. Fukaya, I. M. Gat-Malureanu, T. Ito, P. L. Russo, Y. J. Uemura, C. R. Wiebe, P. P. Kyriakou, G. J. MacDougall, M. T. Rovers, G. M. Luke, K. M. Kojima, M. Goto, S. Uchida, R. Kadono, K. Yamada, S. Tajima, T. Masui, H. Eisaki, N. Kaneko, M. Greven, and G. D. Gu, Phys. Rev. Lett. **95**, 157001 (2005).
21. R. Khasanov, A. Shengelaya, A. Maisuradze, F. La Mattina, A. Bussmann-Holder, H. Keller, and K. A. Müller, Phys. Rev. Lett. **98**, 057007 (2007).
22. R. Khasanov, S. Strässle, D. Di Castro, T. Masui, S. Miyasaka, S. Tajima, A. Bussmann-Holder, and H. Keller, Phys. Rev. Lett. **99**, 237601 (2007).
23. R. Khasanov, A. Shengelaya, J. Karpinski, A. Bussmann-Holder, H. Keller, and K. A. Müller, J. Supercond. Nov. Magn. **21**, 81 (2008).
24. B. M. Wojek, S. Weyeneth, S. Bosma, E. Pomjakushina, and R. Puźniak, Phys. Rev. B **84**, 144521 (2011).

25. W. Anukool, S. Barakat, C. Panagopoulos, and J. R. Cooper, Phys. Rev. B **80**, 024516 (2009).

26. C. Bernhard, Ch. Niedermayer, U. Binninger, A. Hofer, Ch. Wenger, J. L. Tallon, G. V. M. Williams, E. J. Ansaldo, J. I. Budnick, C. E. Stronach, D. R. Noakes, and M. A. Blankson-Mills, Phys. Rev. B **52**, 10488 (1995).

27. P. Zimmermann, H. Keller, S. L. Lee, I. M. Savić, M. Warden, D. Zech, R. Cubitt, E. M. Forgan, E. Kaldis, J. Karpinski, and C. Krüger, Phys. Rev. B **52**, 541 (1995).

28. A. Suter, G. Logvenov, A. V. Boris, F. Baiutti, F. Wrobel, L. Howald, E. Stilp, Z. Salman, T. Prokscha, and B. Keimer, Phys. Rev. B **97**, 134522 (2018).

29. L. Howald, E. Stilp, F. Baiutti, C. Dietl, F. Wrobel, G. Logvenov, T. Prokscha, Z. Salman, N. Wooding, D. Pavuna, H. Keller, and A. Suter, Phys. Rev. B **97**, 094514 (2018).

30. W. N. Hardy, S. Kamal, and D. A. Bonn, *Magnetic Penetration Depths in Cuprates: a Short Review of Measurement Techniques and Results*, Springer, Boston, MA (2002), NATO Science Ser. B, Vol. 371.

31. R. Prozorov and R. W. Giannetta, Supercond. Sci. Technol. **19**, R41 (2006).

32. D. R. Harshman and A. T. Fiory, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 315702 (2011).

33. A. Valli, G. Sangiovanni, M. Capone, and C. Di Castro, Phys. Rev. B **82**, 132504 (2010).

34. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheyenkov, AIP Conf. Proc. **527**, 1 (2000).

35. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, УФН **191**(7) (2021).

36. L. A. Maksimov, A. F. Barabanov, and R. O. Kuzian, Phys. Lett. A **232**, 286 (1997).

37. L. A. Maksimov, R. Hayn, and A. F. Barabanov, Phys. Lett. A **238**, 288 (1998).

38. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **88**, 426 (2008) [JETP Lett. **88**, 370 (2008)].

39. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, Э. Жасинас, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **110**, 1480 (1996) [JETP **83**, 819 (1996)].

40. A. F. Barabanov, E. Žsinas, O. V. Urazaev, and L. A. Maksimov, Письма в ЖЭТФ **66**, 173 (1997) [JETP Lett. **66**, 182 (1997)].

41. R. O. Kuzian, R. Hayn, and A. F. Barabanov, Phys. Rev. B **68**, 195106 (2003).

42. А. Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, ЖЭТФ **119**, 777 (2001) [JETP **92**, 677 (2001)].

43. Д. М. Дзебисашвили, В. В. Вальков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **98**, 596 (2013) [JETP Lett. **98**, 528 (2013)].

44. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, Phys. Lett. A **379**, 421 (2015).

45. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, M. M. Korovushkin, and A. F. Barabanov, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 123 (2017).

46. D. M. Dzebisashvili and K. K. Komarov, Eur. Phys. J. B **91**, 278 (2018).

47. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).

48. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Sol. St. Comm. **62**, 681 (1987).

49. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **59**, 228 (1987).

50. J. Zaanen and A. M. Oleś, Phys. Rev. B **37**, 9423 (1988).

51. V. J. Emery and G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).

52. P. Prelovšek, Phys. Lett. A **126**, 287 (1988).

53. E. B. Stechel and D. R. Jennison, Phys. Rev. B **38**, 4632 (1988).

54. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Г. В. Уймин, ЖЭТФ **96**, 665 (1989) [Sov. Phys. JETP **69**, 371 (1989)].

55. V. V. Val'kov, T. A. Val'kova, D. M. Dzebisashvili, and S. G. Ovchinnikov, Mod. Phys. Lett. B **17**, 441 (2003).

56. K. K. Komarov and D. M. Dzebisashvili, Phys. Scr. **95**, 065806 (2020).

57. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, J. Low Temp. Phys. **181**, 134 (2015).

58. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, ЖЭТФ **152**, 957 (2017) [JETP **125**, 810 (2017)].

59. C. W. Chu, L. Z. Deng, and B. Lv, Physica C **514**, 290 (2015).

60. R. E. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933).

61. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Физматлит, Москва (2015).

62. M. V. Eremin, I. A. Larionov, and I. E. Lyubin, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 185704 (2010).

63. Zh. Huang, H. Zhao, and Sh. Feng, Phys. Rev. B **83**, 144524 (2011).

64. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).

65. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).

66. G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, and T. Murakami, Phys. Rev. Lett. **59**, 1613 (1987).

67. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, J. Supercond. Nov. Magn. **29**, 1049 (2016).

68. M. S. Hybertsen, M. Schlüter, and N. E. Christensen, Phys. Rev. B **39**, 9028 (1989).

69. A. K. McMahan, J. F. Annett, and R. M. Martin, Phys. Rev. B **10**, 6268 (1990).

70. M. H. Fischer, Phys. Rev. B **84**, 144502 (2011).

71. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).

72. A. F. Barabanov, V. M. Beresovsky, E. Žasinas, and L. A. Maksimov, Physica C **252**, 308 (1995).

73. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **104**, 745 (2016) [JETP Lett. **104**, 730 (2016)].

74. A. Damascelli, Z. Hussain, and Zh.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).

75. T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu, S. Komiya, Yo. Ando, H. Eisaki, T. Kakeshita, S. Uchida, Z. Hussain, Z.-X. Shen, and A. Fujimori, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 125209 (2007).

76. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J.-B. Bonnemaison, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and L. Taillefer, Nature **447**, 565 (2007).

77. E. Razzoli, Y. Sassa, G. Drachuck, M. Mansson, A. Keren, M. Shay, M. H. Berntsen, O. Tjernberg, M. Radovic, J. Chang, S. Pailhés, N. Momono, M. Oda, M. Ido, O. J. Lipscombe, S. M. Hayden, L. Patthey, J. Mesot, and M. Shi, New J. Phys. **12**, 125003 (2010).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 426–433 © 2021

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКОНТАКТОВ Pt-Cu ПРИ ПОГРУЖЕНИИ ИГЛЫ СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА В ПОВЕРХНОСТНЫЙ СПЛАВ Pt-Cu МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С. А. Докукин [a,b*], *С. В. Колесников* [a], *А. М. Салецкий* [a]

[a] *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*
119991, Москва, Россия

[b] *Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук*
119017, Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 марта 2021 г.,
после переработки 30 апреля 2021 г.
Принята к публикации 3 мая 2021 г.

Методом молекулярной динамики исследовано формирование наноконтактов при погружении иглы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) в поверхностный сплав Pt/Cu. Установлено, что атомы Pt движутся в наноконтакте меди посредством прыжков по атомным слоям в направлении от поверхности меди к основанию СТМ-иглы, в то время как атомы Cu движутся в противоположном направлении. Исследовано формирование наноконтактов при различной ориентации СТМ-иглы, температуре от 300 K до 800 K и разном количестве атомов Pt непосредственно под СТМ-иглой. Показано, что вероятность формирования смешанного Pt–Cu наноконтакта может достигать 50 %.

DOI: 10.31857/S0044451021090091

1. ВВЕДЕНИЕ

Металлические наноконтакты обладают рядом необычных физических и химических свойств [1, 2], что стимулирует их интенсивное экспериментальное и теоретическое исследование [2–6]. Обычно наноконтакты получаются с помощью одного из следующих трех методов: механически управляемого разрыва тонкого провода [7], выжигания отверстий в тонкой пленке с помощью просвечивающего электронного микроскопа [8] и погружения иглы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) в металлическую подложку [9]. Последний способ удобен тем, что с его помощью возможно непосредственное измерение тока через наноконтакт и точный выбор участка подложки. Однако при этом в ходе эксперимента возникают трудности с определением атомной структуры формирующихся наноконтактов. Поэтому для того, чтобы исследовать механические деформации СТМ-иглы и подложки, различать атомы в случае формирования смешанного наноконтакта из нескольких типов атомов и выяснить механизмы формирования наноконтактов на атомном уровне, обычно используется компьютерное моделирование погружения СТМ-иглы в подложку. Например, моделирование методом молекулярной динамики (МД) влияния примесей на погружение платиновой СТМ-иглы в подложку Pt(001) показало, что погружение иглы приводит к выталкиванию атомов примеси из области взаимодействия [10]. При моделировании погружения никелевой СТМ-иглы в золотую подложку было обнаружено формирование наноконтакта, состоящего из атомов золота [11], причем в процессе моделирования структура наноконтакта проходит через последовательность состояний с различной степенью упорядоченности кристаллической решетки [12]. При погружении никелевой СТМ-иглы в медную подложку было обнаружено формирование наноконтакта, состоящего из атомов меди [13], а возникающие при этом механические напряжения приводят к появлению в подложке дислокаций Шокли и Франка [14].

* E-mail: dokukin.sergey@physics.msu.ru

Интерес к Pt/Cu-наноконтактам связан, в первую очередь, с их необычными структурными свойствами [5]. Наноконтакт Pt/Cu имеет сложную структуру, представляющую собой совокупность исходной ГЦК-структуры меди, структуры, состоящей из двух центрированных икосаэдров, и пентагональной структуры [6]. Столь необычные структурные свойства могут приводить к интересным электронным, магнитным и термоэлектронным свойствам Pt/Cu-наноконтактов, в частности, к возникновению спинового эффекта Зеебека [15].

В данной работе представлены результаты исследования процессов погружения медной СТМ-иглы в поверхностный сплав, состоящий из атомов меди и платины, и последующее вытягивание СТМ-иглы из этого поверхностного сплава. Как показано в работах [16, 17], в сплавах меди и платины при небольших концентрациях платины и температуре 315 K в первом слое поверхности Cu(111) формируются небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111) со структурой p(2×2) или $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30[1)]. При этом атомы меди и платины испытывают сильное взаимное притяжение [5, 6, 17–19]. В результате при вытягивании СТМ-иглы атом платины может перейти из подложки в область контакта, что приводит к формированию смешанных медно-платиновых наноконтактов. Для полного описания процессов формирования наноконтактов необходимо ответить на следующие вопросы. Какова вероятность формирования смешанного наноконтакта при вытягивании СТМ-иглы? Каков механизм диффузии атомов Pt в медном контакте? Какова структура подложки после извлечения из нее СТМ-иглы? Все эти вопросы рассмотрены в данной статье.

2. МЕТОД

Для исследования взаимодействия СТМ-иглы с подложкой был использован разработанный авторами программный код [5], в основе которого лежит алгоритм классической молекулярной динамики с цепочкой термостатов Нозе – Гувера [20, 21]. Данный программный код ранее был использован для моделирования растяжения медно-платиновых наноконтактов, получаемых методом механически управляемого разрыва [5, 6]. Мы предполагаем, что скорость погружения и вытягивания СТМ-иглы одинакова и равна 0.1 м/с. Несмотря на то, что скорость движения СТМ-иглы на несколько порядков больше экспериментальной, обычно такой метод моделирования взаимодействия СТМ-иглы с подложкой приводит к получению результатов, согласующихся с экспериментальными [11, 22, 23].

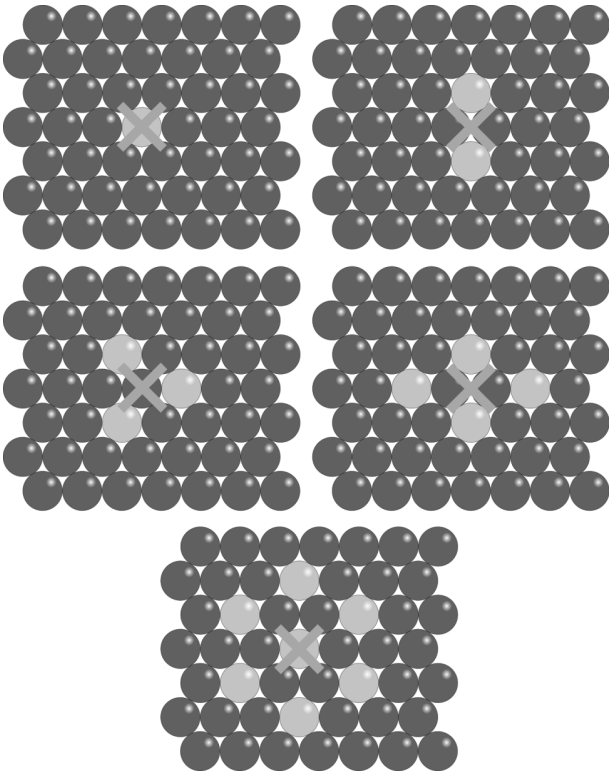
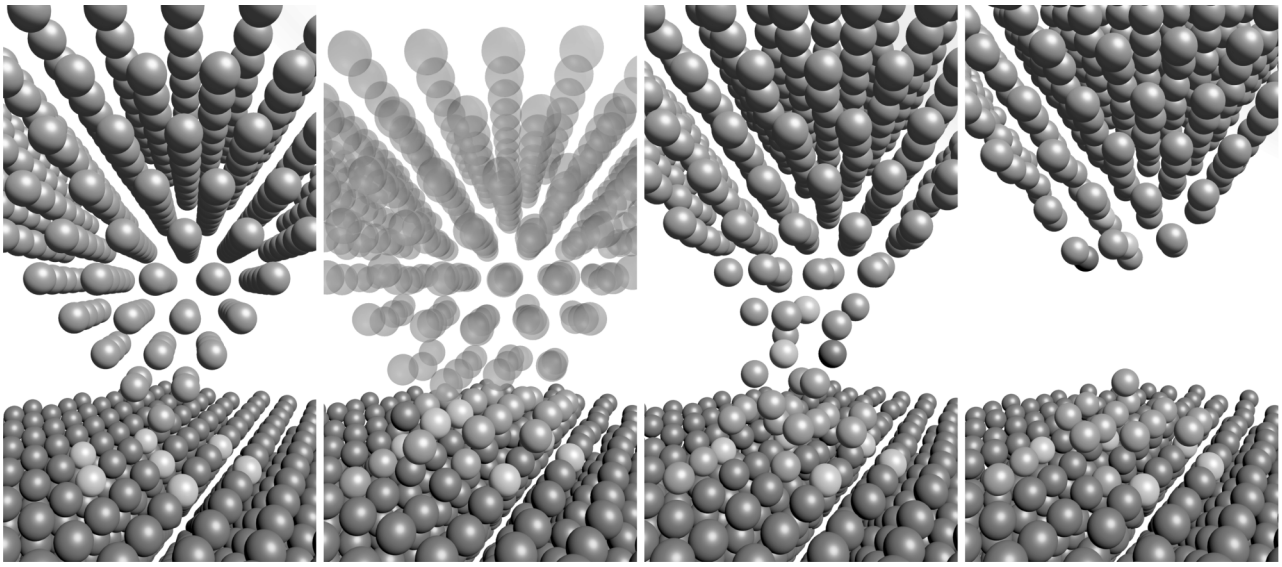


Рис. 1. Верхний слой подложки с участком поверхностного сплава Cu(111)$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30°-Pt с различным числом атомов платины в подложке (вид сверху). Атомы меди обозначены коричневым цветом, атомы платины — серым. Зеленый крест — проекция вершины СТМ-иглы на поверхность Cu(111)

Вычисления проводились для подложки, состоящей из 7 слоев Cu(111) по 224 атома в слое. Положения атомов в двух нижних слоях фиксированы, а в плоскости поверхности подложки наложены периодические граничные условия. В верхнем слое находится небольшой участок медно-платинового сплава[2)] Cu(111)$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30°-Pt

[1)] Далее мы будем рассматривать только небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111), содержащие не более 7 атомов Pt. Поскольку взаимодействие поверхности с СТМ-иглой локально, мы будем пренебрегать наличием в поверхности других атомов Pt. Очевидно, что это можно сделать при небольших концентрациях платины в поверхности меди.

[2)] Мы рассматривали различные медно-платиновые сплавы в подложках Cu(001) и Cu(111). Однако было обнаружено, что вероятность вытягивания атомов платины из сплава Cu(111)$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30°-Pt существенно выше, чем в других случаях, поэтому далее мы будем рассматривать только этот поверхностный сплав.



а *б* *в* *г*

Рис. 2. Расположение атомов в вычислительной ячейке при погружении СТМ-иглы с ориентацией (001) в участок сплава $\mathrm{Cu}(111)(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\mathrm{R}30^\circ$-Pt с 7 атомами платины в различные моменты времени: *а* — начальное положение атомов в вычислительной ячейке, *б* — формирование контактного пятна, переход от погружения к вытягиванию СТМ-иглы, *в* — формирование медно-платинового наноконтакта, *г* — разрыв наноконтакта и окончание моделирования. Коричневым и оранжевым цветом показаны атомы меди соответственно из подложки Cu(111) и СТМ-иглы. Серым цветом — атомы платины. На рис. *б* — часть атомов изображена прозрачными шариками для лучшего изображения контактного пятна

(рис. 1). СТМ-игла имеет вид пирамиды, вырезанной из ГЦК-кристалла меди. Под ориентацией СТМ-иглы мы далее будем понимать ориентацию верхней поверхности пирамиды. СТМ-игла состоит из 385, 285 и 363 атомов меди в случае ориентации соответственно (001), (110) и (111). Относительные положения атомов в двух верхних слоях СТМ-иглы фиксированы; погружение и вытягивание СТМ-иглы осуществляется за счет перемещения этих слоев как единого целого. Вершина СТМ-иглы изначально располагается непосредственно над участком поверхностного сплава $\mathrm{Cu}(111)(\sqrt{3}\times\sqrt{3})\mathrm{R}30^\circ$-Pt, как это показано на рис. 1.

Напряжение смещения между поверхностью и СТМ-иглой может оказать существенное влияние на формирование наноконтактов. По существу, влияние электрического тока, текущего через наноконтакт, сводится, во-первых, к его нагреванию, во-вторых, к электромиграции атомов наноконтакта [24]. Однако для того, чтобы активировать эти процессы, напряжение смещения должно превышать 0.4–0.6 В [24]. В то же время, типичное напряжение смещения, при котором происходит сканирование поверхностного сплава Pt/Cu(111), составляет 0.01–0.05 В [16]. При таких напряжениях смещения влиянием электрического тока на формирование наноконтакта можно пренебречь. Поэтому далее мы рассматриваем формирование наноконтактов при нулевом напряжении смещения. При этом тот факт, что погружается именно СТМ-игла, становится неважным, и все полученные ниже результаты в равной степени верны и для погружения, например, иглы атомно-силового микроскопа.

Начальное положение атомов в вычислительной ячейке в случае ориентации СТМ-иглы (001) показано на рис. 2*а*. Процесс моделирования состоит из следующих двух этапов: 1) погружение СТМ-иглы до формирования контактного пятна радиусом 7 Å (рис. 2*б*) и 2) вытягивание СТМ-иглы вплоть до момента разрыва наноконтакта (рис. 2*г*). При вытягивании СТМ-иглы из подложки формируются медно-платиновые наноконтакты, структура которых аналогична структуре наноконтактов, формирующихся в процессе механически управляемого разрыва [5, 6] при небольших концентрациях атомов платины.

Межатомные взаимодействия описывались потенциалами, полученными в приближении сильной связи [25, 26]. Величина потенциальной энергии взаимодействия E_{coh} описывается двумя слагае-

мыми. Первое слагаемое E_b^i соответствует притяжению атомов и содержит многочастичные взаимодействия. Второе слагаемое E_r^i соответствует отталкиванию атомов и представлено в форме модифицированного потенциала Борна – Майера [27]

$$E_{coh} = \sum_i (E_b^i + E_r^i), \quad (1)$$

$$E_b^i = -\left\{ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp\left[-2q_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}}-1\right)\right] \times \right.$$
$$\left. \times\, f_c(r_{ij}) \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

$$E_r^i = \sum_j \left[A_{\alpha\beta}^1\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}}-1\right) + A_{\alpha\beta}^0\right] \times$$
$$\times \exp\left[-p_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}}-1\right)\right] f_c(r_{ij}), \quad (3)$$

где r_{ij} – расстояние между атомами с номерами i и j; α и β — типы атомов; $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$, $r_0^{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}^0$ и $A_{\alpha\beta}^1$ — параметры потенциалов. Функция обрезания $f_c(r_{ij})$ и параметры потенциалов взяты из работы [19]. Межатомные потенциалы (1)–(3) хорошо зарекомендовали себя при моделировании формирования металлических [4, 28–30] и биметаллических [3, 5, 6] наноконтактов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Погружение СТМ-иглы в небольшой участок медно-платинового поверхностного сплава и последующее ее вытягивание приводит к формированию медно-платиновых наноконтактов. При этом в процессе взаимодействия СТМ-иглы с подложкой в области контакта образуется аморфная структура, что затрудняет выделение конкретных событий, отвечающих за переход атомов платины из подложки в область наноконтакта. Однако свойства наноконтактов зависят, в первую очередь, от количества атомов платины, вытянутых из поверхности и оказавшихся в области наноконтакта. Поэтому далее мы обсудим общие закономерности вытягивания атомов платины из подложки.

Зависимости числа вытянутых атомов платины $N_{\rm Pt}$ от числа атомов платины в подложке $N_{\rm Pt}^{substr}$

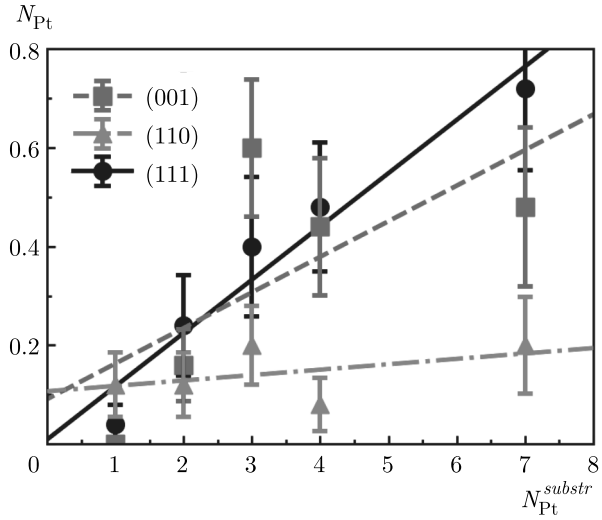


Рис. 3. Зависимости числа вытянутых из подложки атомов $N_{\rm Pt}$ от числа атомов платины в подложке $N_{\rm Pt}^{substr}$ при температуре 300 K и разных ориентациях СТМ-иглы

при температуре 300 K представлены на рис. 3[3)]. Зависимости $N_{\rm Pt}(N_{\rm Pt}^{substr})$ были аппроксимированы линейными функциями $N_{\rm Pt} = aN_{\rm Pt}^{substr} + b$, где коэффициенты были равны $a_{(001)} = 0.07 \pm 0.05$ и $b_{(001)} = 0.09 \pm 0.18$, $a_{(110)} = 0.011 \pm 0.012$ и $b_{(110)} = 0.11 \pm 0.05$, $a_{(111)} = 0.108 \pm 0.015$ и $b_{(111)} = 0.01 \pm 0.06$ в случае ориентации СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111). Для коэффициентов $a_{(ijk)}$ выполняются неравенства ($a_{(111)} > a_{(001)} > a_{(110)}$), аналогичные неравенствам для межплоскостных расстояний в идеальном кристалле меди ($d_{(111)} > d_{(001)} > d_{(110)}$), где $d_{(001)} = 1.808$ Å, $d_{(110)} = 1.278$ Å и $d_{(111)} = 2.087$ Å. Среднее число вытянутых при погружении СТМ-иглы атомов платины может достигать величины $\langle N_{\rm Pt}\rangle \approx 0.7$. Используя распределение Пуассона, оценим максимальную вероятность вытягивания атомов Pt: $1-e^{-0.7} \approx 0.5$, таким образом вероятность формирования смешанного Pt-Cu-наноконтакта при погружении СТМ-иглы достигает 50 %.

Установленные зависимости числа вытянутых атомов платины от обратной температуры (в интервале температур 400–800 K) при наличии 7 атомов платины в подложке и различных ориентациях СТМ-иглы показаны на рис. 4. Полученные зависимости $N_{\rm Pt}(T^{-1})$ были аппроксимированы экспоненциальной зависимостью

$$N_{\rm Pt} = N_{(ijk)} \exp(-E_{(ijk)}/kT),$$

[3)] Для получения каждой точки на рис. 3–6 было выполнено по 100 численных расчетов.

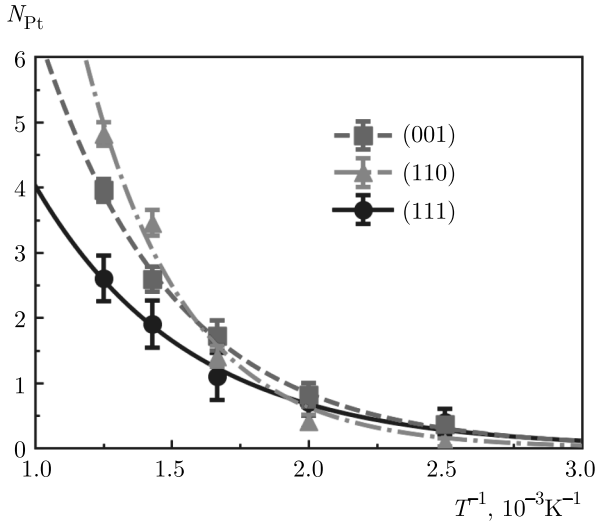


Рис. 4. Зависимости числа вытянутых из подложки атомов платины N_{Pt} от обратной температуры T^{-1} при разных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности Cu(111) размещены 7 атомов платины на расстоянии вторых ближайших соседей

где $N_{(001)} = 51 \pm 7$ и $E_{(001)} = 177 \pm 8$ мэВ, $N_{(110)} = 160 \pm 70$ и $E_{(110)} = 240 \pm 30$ мэВ, $N_{(111)} = 24 \pm 5$ и $E_{(111)} = 154 \pm 13$ эВ в случае ориентации СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111)[4]. Физический смысл величин $E_{(ijk)}$ — энергии активации процесса вытягивания атомов платины из подложки Cu(111). На рис. 4 видно, что чем больше расстояние $d_{(ijk)}$ между слоями в СТМ-игле, тем меньше энергия активации вытягивания атомов ($E_{(111)} < E_{(001)} < E_{(110)}$). Полученные для энергии активации неравенства являются следствием того, что энергия связи атомов меди и платины больше энергии связи Pt-Pt и Cu-Cu [17], и атомы платины при перемещении между слоями притягивают атомы меди. В итоге, чем меньше расстояние между атомными слоями в СТМ-игле, тем больше энергия возникающих упругих деформаций и, соответственно, выше величина энергии активации процесса перемещения атома платины.

Полученные неравенства между коэффициентами $a_{(ijk)}$ и энергиями активации $E_{(ijk)}$, а также их однозначная связь с неравенствами для межплоскостных расстояний $d_{(ijk)}$ позволяют нам сделать вывод, что атомы платины движутся в наноконтакте меди посредством прыжков между атомными плоскостями. Тогда энергию активации $E_{(ijk)}$ можно интерпретировать как эффективный диффузионный барьер для таких прыжков.

После вытягивания СТМ-иглы из подложки на поверхности остаются небольшие кластеры. Появление аналогичных кластеров было обнаружено ранее в ряде экспериментальных работ [31–34]. Радиус кластеров примерно равен радиусу контактного пятна, образующегося при погружении СТМ-иглы, и слабо зависит от количества атомов платины в поверхности меди. Поэтому далее мы ограничимся рассмотрением случая, когда в первом слое поверхности Cu(111) располагаются 7 атомов платины. Высота кластеров зависит, в первую очередь, от формы СТМ-иглы. Действительно, чем острее СТМ-игла, тем выше будет находиться область разрыва наноконтакта, и тем выше будет кластер, остающийся после разрыва на поверхности подложки.

На рис. 5 представлено распределение атомов по слоям в кластере, образующемся на поверхности Cu(111) при температуре 300 K и различных ориентациях СТМ-иглы при наличии в первом слое поверхности 7 атомов платины. Видно, что кластер имеет конусообразную форму, обусловленную утончением области разрыва наноконтакта при вытягивании СТМ-иглы. При ориентации СТМ-иглы (110), (001) и (111) кластер состоит преимущественно из одного, двух и трех плотно упакованных атомных слоев.

На рис. 6 показана зависимость числа атомов в кластере $N_{cluster}^{atoms}$ от обратной температуры T^{-1} при наличии 7 атомов платины в подложке и различных ориентациях СТМ-иглы. Зависимости $N_{cluster}^{atoms}(T^{-1})$ могут быть аппроксимированы формулой

$$N_{cluster}^{atoms} = A + \tilde{N}\exp(-\tilde{E}/kT),$$

где $A_{(001)} = 24.8 \pm 1.1$, $\tilde{N}_{(001)} = (8 \pm 5) \cdot 10^3$ и $\tilde{E}_{(001)} = 370 \pm 40$ мэВ, $A_{(110)} = 13.3 \pm 1.0$, $\tilde{N}_{(110)} = 150 \pm 60$ и $\tilde{E}_{(110)} = 162 \pm 29$ мэВ, $A_{(111)} = 42.2 \pm 1.5$, $\tilde{N}_{(111)} = (140 \pm 140) \cdot 10^3$ и $\tilde{E}_{(111)} = 540 \pm 70$ мэВ в случае ориентаций СТМ-иглы соответственно (001), (110) и (111). Коэффициент $A_{(ijk)}$ характеризует асимптотическое поведение зависимости $N_{cluster}^{atoms}(T)$ при низких температурах, а коэффициент $\tilde{E}_{(ijk)}$ имеет физический смысл энергии активации процесса увеличения размера кластера. Как уже отмечалось выше, при низких температурах высота кластеров, а следовательно, и чис-

[4] Отметим, что среднее число вытянутых атомов платины при температурах 300 K и 400 K оказывается одного порядка. Возможно, это означает, что механизмы формирования наноконтактов при температурах выше и ниже комнатной несколько отличаются. Однако этот вопрос требует дополнительного тщательного исследования, выходящего за пределы данной статьи.

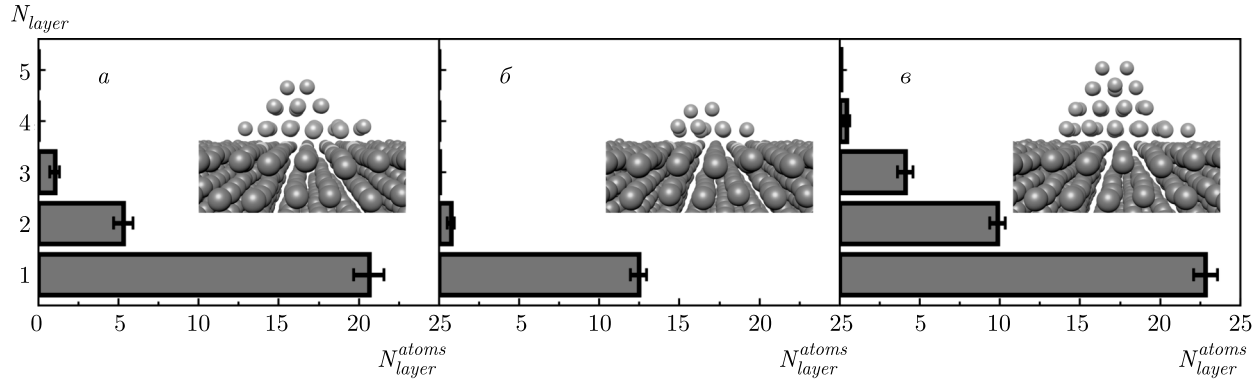


Рис. 5. Зависимость суммарного числа атомов (Cu и Pt) в кластере на поверхности Cu(111) от номера слоя при температуре 300 K и различных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности расположены 7 атомов платины: *а* — (001), *б* — (110) и *в* — (111). На вставках приведены примеры кластеров, остающихся после вытягивания СТМ-иглы. Коричневым и оранжевым цветом показаны атомы меди соответственно из подложки и СТМ-иглы. Серым цветом — атомы платины

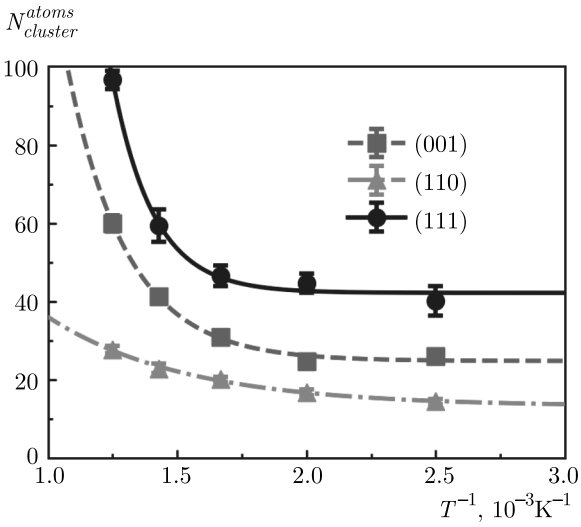


Рис. 6. Зависимости числа атомов в кластере $N_{cluster}^{atoms}$ от обратной температуры (T^{-1}) при разных ориентациях СТМ-иглы, если в первом слое поверхности Cu(111) размещены 7 атомов платины на расстоянии вторых ближайших соседей

ло атомов в них, зависит от формы СТМ-иглы. Поэтому коэффициент $A_{(ijk)}$ максимален для наиболее острой иглы с ориентацией (111) и минимален для наиболее тупой иглы с ориентацией (110). Увеличение размеров кластеров, остающихся на поверхности, при увеличении температуры связано с активацией диффузии атомов Cu в направлении от СТМ-иглы к поверхности Cu(111). Действительно, в результате такой диффузии область разрыва наноконтакта смещается в сторону основания СТМ-иглы, что и приводит в увеличению размеров кластеров. Для энергий активации этого процесса выполняются неравенства ($\tilde{E}_{(111)} > \tilde{E}_{(001)} > \tilde{E}_{(110)}$) обратные по отношению к неравенствам для энергий активации $E_{(ijk)}$ процесса вытягивания атомов платины из подложки Cu(111). Это означает, что вытянутые из подложки атомы Pt замедляют процесс диффузии атомов Cu в области наноконтакта и препятствуют смещению области разрыва наноконтакта в сторону основания СТМ-иглы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики были исследованы процессы формирования наноконтактов, образующихся при взаимодействии медной СТМ-иглы с небольшими участками поверхностного сплава Pt/Cu(111). Установлено, что наибольшая вероятность формирования смешанного Pt-Cu-наноконтакта соответствует погружению СТМ-иглы с ориентацией (111) в участок поверхностного сплава Cu(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Pt с 7 атомами платины и может достигать 50 %. Анализ энергий активации $E_{(ijk)}$ и $\tilde{E}_{(ijk)}$ показал, что атомы Pt движутся в наноконтакте меди посредством прыжков по атомным слоям в направлении от поверхности меди к основанию СТМ-иглы. При этом атомы Cu движутся в противоположном направлении, что при повышении температуры приводит к смещению области разрыва наноконтакта в сторону основания СТМ-иглы. После разрыва наноконтакта на поверхности Cu(111) остаются небольшие конусообразные кластеры, состоящие из атомов меди и платины, размер которых определяется, в первую очередь, размером контактного пятна и формой СТМ-иглы.

Представленные результаты указывают на перспективность экспериментальной реализации метода получения и дальнейшего исследования Pt-Cu-наноконтактов путем погружения СТМ-иглы в небольшие участки поверхностного сплава Pt/Cu(111).

Благодарности. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М. В. Ломоносова [35, 36].

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-72-20034).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).

2. А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий, УФН **185**, 1009 (2015).

3. A. L. Klavsyuk, S. V. Kolesnikov, I. K. Gainullin, and A. M. Saletsky, Eur. Phys. J. B **85**, 331 (2012).

4. S. V. Kolesnikov, I. N. Kolesnikova, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, Europhys. Lett. **103**, 48002 (2013).

5. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 16136 (2020).

6. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, ЖЭТФ **158**, 858 (2020).

7. J. M. Krans, J. M. van Ruitenbeek, V. V. Fisun, I. K. Yanson, and L. J. de Jongh, Nature **375**, 767 (1995).

8. V. Rodrigues, T. Fuhrer, and D. Ugarte, Phys. Rev. Lett. **85**, 4124 (2000).

9. H. Ohnishi, Y. Kondo, and K. Takayanagi, Nature **395**, 780 (1998).

10. F. Yang, R. W. Carpick, and D. J. Srolovitz, ACS Nano **11**, 490 (2017).

11. U. Landman, W. D. Luedtke, N. A. Burnham, and R. J. Colton, Science **248**, 454 (1990).

12. J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Herrero, A. M. Baró, N. Garcia, U. Landman, W. D. Luedtke, E. N. Bogachek, and H. P. Cheng, Science **267**, 1793 (1995).

13. J. Mei, J. Li, Y. Ni, and H. Wang, Nanoscale Res. Lett. **5**, 692 (2010).

14. J. Mei and Y. Ni, Thin Solid Films **566**, 45 (2014).

15. G. Singh, K. Kumara, and R. K. Moudgil, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 20965 (2019).

16. F. R. Lucci, T. J. Lawton, A. Pronschinske, and E. C. H. Sykes, J. Phys. Chem. C **118**, 3015 (2014).

17. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klavsyuk, J. Alloys Compd. **763**, 719 (2018).

18. S. Dokukin, S. Kolesnikov, and A. Saletsky, Surf. Sci. **689**, 121464 (2019).

19. S. Dokukin, S. Kolesnikov, A. Saletsky, and A. Klavsyuk, Surf. Sci. **692**, 121515 (2020).

20. S. Nosé, Mol. Phys. **52**, 255 (1984).

21. W. G. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985).

22. C. H. Wang, K. C. Chao, T. H. Fang, I. Stachiv, and S. F. Hsieh, J. Alloys Compd. **659**, 224 (2016).

23. M. A. Fernández, C. Sabater, W. Dednam, J. J. Palacios, M. R. Calvo, C. Untiedt, and M. J. Caturla, Phys. Rev. B **93**, 085437 (2016).

24. R. Hoffmann-Vogel, Appl. Phys. Rev. **4**, 031302 (2017).

25. V. Rosato, M. Guillope, and B. Legrand, Philos. Mag. A **59**, 321 (1989).

26. F. Cleri and V. Rosato, Phys. Rev. B **48**, 22 (1993).

27. N. A. Levanov, V. S. Stepanyuk, W. Hergert, D. I. Bazhanov, P. H. Dederichs, A. Katsnelson, and C. Massobrio, Phys. Rev. B **61**, 2230 (2000).

28. F. Sato, A. S. Moreira, J. Bettini, P. Z. Coura, S. Dantas, D. Ugarte, and D. Galvao, Phys. Rev. B **74**, 193401 (2006).

29. Q. Pu, Y. Leng, L. Tsetseris, H. S. Park, S. T. Pantelides, and P. T. Cummings, J. Chem. Phys. **126**, 144707 (2007).

30. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, Письма в ЖЭТФ **91**, 169 (2010).

31. J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Herrero, A. M. Baró, N. García, and V. T. Binh, Phys. Rev. Lett. **71**, 1852 (1993).

32. J. G. Rodrigo, V. Crespo, H. Suderow, S. Vieira, and F. Guinea, New J. Phys. **15**, 055020 (2013).

33. W. Dednam, C. Sabater, O. Tal, J. J. Palacios, A. E. Botha, and M. J. Caturla, Phys. Rev. B **102**, 245415 (2020).

34. W. Dednam, C. Sabater, M. R. Calvo, C. Untiedt, J. J. Palacios, A. E. Botha, and M. J. Caturla, Phys. Rev. B **101**, 165417 (2020).

35. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, "*Lomonosov*": *Supercomputing at Moscow State University*, Boca Raton, United States (2013).

36. V. Voevodin, A. Antonov, D. Nikitenko, P. Shvets, S. Sobolev, I. Sidorov, K. Stefanov, V. Voevodin, and S. Zhumatiy, Supercomput. Front. Innov. **6**, 4 (2019).

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 434–442 © 2021

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННАЯ ПЕРЕНОРМИРОВКА МАССЫ В МЕТАЛЛЕ ЗА ПРЕДЕЛАМИ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Э. З. Кучинский**, *Н. А. Кулеева

Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук
620016, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 8 апреля 2021 г.,
после переработки 8 апреля 2021 г.
Принята к публикации 9 апреля 2021 г.

Проанализирована перенормировка массы электрона в металле за счет электрон-фононного взаимодействия и связанная с ней константа взаимодействия λ в моделях как акустических, так и оптических фононов в широком интервале величины характерной частоты фононов ω_0 как в адиабатическом пределе, когда эта частота существенно меньше энергии Ферми ε_F, так и в антиадиабатическом, когда характерная частота существенно больше ширины затравочной электронной зоны. Показано, что в антиадиабатическом пределе λ обратно пропорциональна характерной частоте фононов, и вследствие малости этой константы теорема Мигдала справедлива и в этом пределе. Рассмотрено влияние беспорядка и сильных электронных корреляций на электрон-фононную перенормировку массы и константу λ. В адиабатическом пределе перенормировка массы λ несколько подавляется примесным рассеянием, что связано с уменьшением плотности состояний на уровне Ферми. Электронные корреляции в этом пределе совсем незначительно подавляют электрон-фононную константу λ в коррелированном металле, а в моттовском диэлектрике $\lambda \approx 0$. Электрон-фононное взаимодействие затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик, что в диэлектрике вблизи моттовского перехода приводит к возможности восстановления квазичастичного пика и резкого роста константы λ с ростом дебаевской частоты. В антиадиабатическом пределе ни беспорядок, ни сильные электронные корреляции практически не влияют на электрон-фононную перенормировку массы и эффективную константу $\lambda \sim \varepsilon_F/\omega_0$.

DOI: 10.31857/S0044451021090108

1. ВВЕДЕНИЕ

Стандартная теория электрон-фононного взаимодействия, как и теория сверхпроводимости Элиашберга – Макмиллана [1–3], целиком основана на применимости адиабатического приближения и теореме Мигдала [4], позволяющей пренебречь вершинными поправками при расчетах электрон-фононного взаимодействия в типичных металлах. На самом деле реальным параметром малости теории возмущений в таком пределе является $\lambda\omega_0/\varepsilon_F \ll 1$, где λ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, ω_0 — характерная частота фононов, ε_F — энергия Ферми.

В последнее время был открыт ряд сверхпроводников, где адиабатическое приближение не может считаться выполненным, а характерные частоты фононов порядка или даже превышают энергию Ферми электронов. Имеются в виду, главным образом, высокотемпературные сверхпроводники на основе монослоев FeSe, прежде всего системы типа моноатомного слоя FeSe на подложке типа $SrTiO_3$ (FeSe/STO) [5]. Впервые на это обстоятельство в применении к таким системам обратил внимание Горьков [6, 7] при обсуждении идеи о возможном механизме повышения температуры сверхпроводящего перехода T_c в системе FeSe/STO за счет взаимодействия с высокоэнергетическими оптическими фононами в $SrTiO_3$ [5].

В недавних работах Садовского [8–10] электрон-фононная связь за пределами адиабатического приближения была исследована в рамках теории Элиашберга – Макмиллана. В этих работах было проде-

* E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

монстрировано, что в антиадиабатическом пределе эффективная константа электрон-фононного взаимодействия, определяющая перенормировку массы, имеет вид

$$\lambda = \lambda_0 \frac{D}{\omega_0},$$

где λ_0 — стандартная элиашберговская константа электрон-фононного взаимодействия, а D — полуширина зоны. Таким образом, в антиадиабатическом пределе эффективная константа электрон-фононной связи оказывается малой в силу малости D/ω_0. Такой сильный результат был получен непосредственно в рамках теории Элиашберга – Макмиллана, где для упрощения анализа делается усреднение по электронным импульсам, лежащим на поверхности Ферми (в антиадиабатическом случае усреднение по импульсам рассеянного на фононе электрона идет по изоэнергетической поверхности с энергией $\varepsilon_F + \omega_0$). Естественно, в антиадиабатическом пределе, когда частота рассеяния заметно больше энергии Ферми, это является достаточно грубым приближением. Кроме того, в работах Садовского [8–10] рассматривалась лишь эйнштейновская модель оптических фононов.

В данной работе мы последовательно рассмотрим эффективную константу электрон-фононного взаимодействия, определяющую перенормировку массы в пределе слабой связи, не используя приближение Элиашберга – Макмиллана, и покажем, что и для оптических, и для акустических фононов в антиадиабатическом пределе $\lambda \sim \lambda_0 D/\omega_0$. Также мы исследуем влияние примесного рассеяния и сильных электронных корреляций (в рамках DMFT+Σ-подхода) на электрон-фононную перенормировку массы и продемонстрируем, что в антиадиабатическом пределе такое влияние несущественно и поведение $\lambda \sim \lambda_0 D/\omega_0$ сохраняется.

Далее мы будем рассматривать область достаточно слабой силы связи $\lambda_0 < 1$, где можно пренебречь возможными поляронными эффектами [11, 12].

Необходимо подчеркнуть, что в данной работе мы будем рассматривать лишь эффективную константу электрон-фононного взаимодействия, связанную с перенормировкой массы, которая в адиабатическом пределе определяет и температуру сверхпроводящего перехода T_c. В антиадиабатическом пределе это не так и критическая температура T_c определяется скорее константой λ_0 [8–10].

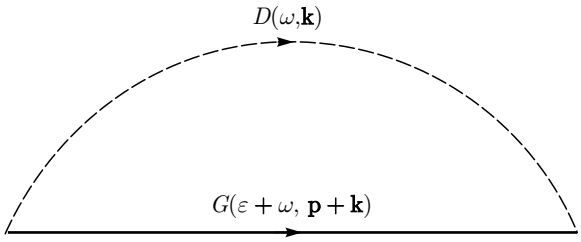


Рис. 1. Диаграмма первого порядка для собственно-энергетической части

2. КОНСТАНТА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ. ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛАБОЙ СВЯЗИ

Предполагая слабость электрон-фононной связи, ограничимся простейшим вкладом первого порядка для $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$, показанным диаграммой на рис. 1. В адиабатическом пределе рассмотрение такого вклада связано с действием теоремы Мигдала и с возможностью пренебречь вершинными поправками к такой диаграмме. В антиадиабатическом пределе, как будет продемонстрировано ниже, эффективная константа электрон-фононного взаимодействия λ оказывается существенно меньше затравочной константы электрон-фононного взаимодействия λ_0, что и оправдывает использование приближения слабой связи. В таком приближении имеем

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p}) = ig^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} D(\omega, \mathbf{k}) G(\varepsilon+\omega, \mathbf{p}+\mathbf{k}), \quad (1)$$

где g — обычная константа электрон-фононного взаимодействия,

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = \left[\varepsilon+\mu-\xi(\mathbf{p})-\Sigma_{imp}(\varepsilon)-\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})\right]^{-1}, \quad (2)$$

$G(\varepsilon, \mathbf{p})$ — одночастичная функция Грина, одетая рассеянием на фононах и беспорядке, $\xi(\mathbf{p})$ — «затравочная» электронная дисперсия, μ — химический потенциал, определяемый заполнением зоны, $\Sigma_{imp}(\varepsilon)$ — собственно-энергетическая часть (СЭЧ), связанная с рассеянием на примесях, для которой будем использовать простейшее самосогласованное борновское приближение:

$$\Sigma_{imp}(\varepsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon, \mathbf{p}), \quad (3)$$

где $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ — одноэлектронная функция Грина (2), а Δ — амплитуда случайного гауссовского поля (ширина распределения Гаусса случайных энергетических уровней на узлах решетки), которая служит мерой силы беспорядка.

Далее мы будем рассматривать модель «затравочной» зоны с полуэллиптической плотностью состояний (на элементарную ячейку и один спин):

$$N_0(\xi) = \frac{2}{\pi D^2}\sqrt{D^2-\xi^2}, \tag{4}$$

которая является неплохим приближением в трехмерном случае. Здесь D определяет полуширину зоны проводимости.

Фононный пропагатор имеет вид

$$D(\omega,\mathbf{k}) = \frac{2\omega_0(\mathbf{k})}{\omega^2-\omega_0^2(\mathbf{k})+i\delta}, \tag{5}$$

где $\omega_0(\mathbf{k})$ — фононная дисперсия, которая в стандартной модели Дебая или Эйнштейна имеет вид

$$\omega_0(\mathbf{k}) = \begin{cases} u|\mathbf{k}|, & |\mathbf{k}| < \omega_D/u, \\ \omega_0, & |\mathbf{k}| < k_0. \end{cases} \tag{6}$$

Здесь u — скорость звука, ω_D, ω_0 — частоты Дебая и Эйнштейна, обрезание k_0 порядка импульса Ферми p_F (в дальнейшем во всех расчетах мы брали $k_0 = p_F$).

Фактически $\Sigma_{ph}(\varepsilon,\mathbf{p})$, определенная выражением (1), имеет слабую импульсную зависимость, которой мы можем пренебречь и учитывать только существенную частотную зависимость. Прямые вычисления (см., например, [13, 14]) в случае дебаевского спектра (6) позволяют переписать выражение (1) в виде

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{-ig^2\omega_D}{\omega_c^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\times \\ \times\left\{1-\frac{1}{2}\frac{\omega}{\omega_D}\ln\left|\frac{\omega/\omega_D+1}{\omega/\omega_D-1}\right|+i\pi\frac{\omega^2}{\omega_D^2}\theta(\omega_D^2-\omega^2)\right\}\times \\ \times I(\varepsilon+\omega). \tag{7}$$

Здесь $I(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon,\mathbf{p})$ — локальная функция Грина,

$$I(\varepsilon) = \int\limits_{-D}^{+D} d\xi\frac{N_0(\xi)}{E_\varepsilon-\xi}, \tag{8}$$

где $E_\varepsilon = \varepsilon+\mu-\Sigma_{imp}(\varepsilon)-\Sigma_{ph}(\varepsilon)$ и $\omega_c = p_F u$ — характерная частота порядка ω_D. Далее везде мы будем полагать $\omega_c = \omega_D$. В случае полуэллиптической «затравочной» плотности состояний $N_0(\varepsilon)$ (4) с полушириной зоны D мы получаем

$$I(\varepsilon) = \frac{2}{D^2}\left(E_\varepsilon-\sqrt{E_\varepsilon^2-D^2}\right). \tag{9}$$

Удобно ввести затравочную безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия:

$$\lambda_0 = \frac{g^2N_0(\varepsilon_F)}{\omega_D}, \tag{10}$$

которая в отсутствие примесного рассеяния в глубоко адиабатическом пределе ($\omega_D \ll D$) совпадает с эффективной λ, ответственной за перенормировку масс.

В российской литературе [15, 16] достаточно часто в качестве фононного пропагатора используют

$$D(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2-\omega_0^2(\mathbf{k})+i\delta}. \tag{11}$$

В этом случае [13]

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{-ig^2}{4\omega_D^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\times \\ \times\left\{\omega_D^2+\omega^2 ln\left|\frac{\omega_D^2-\omega^2}{\omega^2}\right|+i\pi\omega^2\theta(\omega_D^2-\omega^2)\right\}\times \\ \times I(\varepsilon+\omega). \tag{12}$$

Естественно переопределение фононного пропагатора ведет к переопределению константы g и затравочной безразмерной константы электрон-фононного взаимодействия:

$$\lambda_0 = g^2N_0(\varepsilon_F)/4. \tag{13}$$

В случае эйнштейновского спектра фононов [14]:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{ig^2\omega_0}{16\pi}\Big\{-i\pi(I(\varepsilon+\omega_0)+I(\varepsilon-\omega_0))+ \\ +\int\limits_0^\infty d\omega\left[I(\varepsilon+\omega_0+\omega)+I(\varepsilon-\omega_0-\omega)-\right. \\ \left.-I(\varepsilon+\omega_0-\omega)-I(\varepsilon-\omega_0+\omega)\right]/\omega\Big\}. \tag{14}$$

В такой модели фононного спектра (и в предположении $k_0 = p_F$) затравочная безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия также определяется выражением (13) [14].

Для упрощения нашего анализа мы не проводим полностью самосогласованные расчеты, пренебрегая перенормировкой фононов вследствие электрон-фононного взаимодействия, поскольку предполагаем, что фононный спектр (6) фиксируется экспериментом.

Далее нас в основном будет интересовать антиадиабатический предел, который на практике возмо-

жен лишь для достаточно узкозонных систем. В таких системах обычно весьма существенны электронные корреляции, которые могут быть неплохо описаны в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [17–19] для модели Хаббарда, но возникает вопрос о взаимовлиянии этих корреляций и электрон-фононного взаимодействия. Для описания такого взаимовлияния воспользуемся, следуя [13], DMFT+Σ-подходом [20–22]. В этом подходе одноэлектроннная функция Грина имеет вид[1)]

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = 1/\left[\varepsilon + \mu - \xi(\mathbf{p}) - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{ph}(\varepsilon)\right], \quad (15)$$

где $\Sigma(\varepsilon)$ — локальная DMFT СЭЧ. Такой подход позволяет сохранить систему самосогласованных уравнений стандартной DMFT, только на каждой DMFT-итерации мы пересчитываем соответствующую электрон-фононную СЭЧ $\Sigma_{ph}(\varepsilon)$, которая в приближении слабой связи по-прежнему в зависимости от модели фононов определяется выражениями (7), (12) или (14) с $I(\varepsilon)$, совпадающей с локальной функцией Грина эффективной однопримесной задачи:

$$G_{ii}(\varepsilon) = I(\varepsilon) = \int\limits_{-D}^{+D} d\xi \frac{N_0(\xi)}{\varepsilon+\mu-\xi-\Sigma(\varepsilon)-\Sigma_{ph}(\varepsilon)}. \quad (16)$$

Эффективную константу электрон-фононного взаимодействия будем определять через перенормировку массы квазичастиц:

$$\frac{m^\star}{m} = 1 + \lambda = 1 - \left.\frac{d\,\mathrm{Re}\,\Sigma_{ph}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}. \quad (17)$$

Тогда

$$\lambda = -\left.\frac{d\,\mathrm{Re}\,\Sigma_{ph}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}. \quad (18)$$

Естественно, в адиабатическом пределе, когда характерная фононная частота много меньше энергии Ферми, эффективная константа электрон-фононного взаимодействия практически совпадает с затравочной константой λ_0. В антиадиабатическом пределе это не так и эффективная константа $\lambda \sim \lambda_0 D/\omega_D$, как следует из подхода на основе теории Элиашберга–Макмиллана [1–3] и как будет продемонстрировано в дальнейшем в нашем подходе.

[1)] Далее при учете электронных корреляций мы будем пренебрегать примесным рассеянием.

3. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Поскольку нашей задачей является выяснение качественной зависимости константы λ от характерной частоты фононов, дальше мы везде рассматриваем случай с половинным заполнением электронной зоны, т. е. $\mu = U/2$ или $\mu = 0$, в отсутствие хаббардовского взаимодействия U. На рис. 2 приведены плотности состояний для различных значений дебаевской частоты (при выборе фононного пропагатора в виде (5)). В адиабатическом пределе $\omega_D/2D \ll 1$ мы видим стандартное изменение плотности состояний в окрестности $\pm\omega_D$ вокруг уровня Ферми. В антиадиабатическом пределе, когда дебаевская частота больше ширины зоны, наблюдаются пики в плотности состояний в окрестности дебаевской частоты, располагающиеся в этом пределе уже за краями затравочной зоны (см. вставку на рис. 2). С ростом дебаевской частоты интенсивность этих пиков заметно уменьшается. Качественно абсолютно такая же картина эволюции плотности состояний с ростом характерной частоты фононов наблюдается и при другом выборе фононного пропагатора (11) в дебаевской модели и для эйнштейновской модели оптических фононов.

Зависимости эффективной константы электрон-фононного взаимодействия от характерной частоты фононов, полученные из перенормировки массы (17), приведены на рис. 3. Видим, что во всех моделях в адиабатическом пределе эффективная константа λ линейно уменьшается с ростом характерной частоты фононов достаточно слабо (см. вставки на рис. 3). В антиадиабатическом пределе

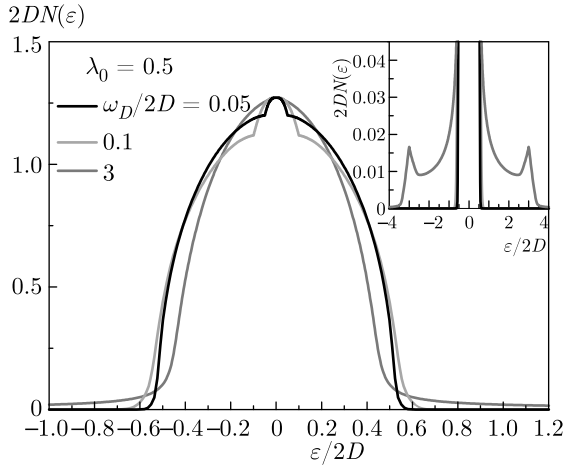
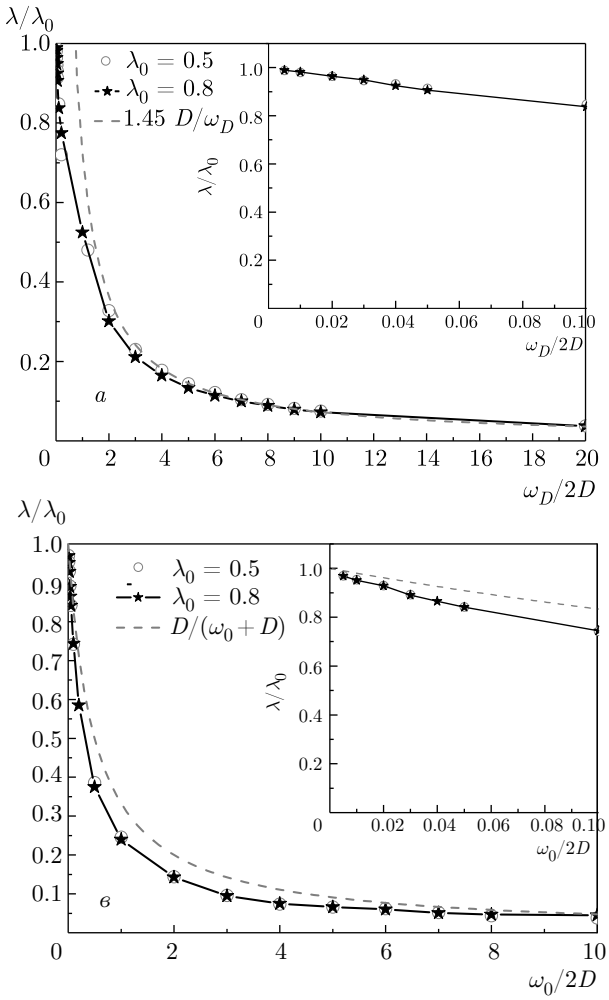


Рис. 2. Плотность состояний для различных значений дебаевской частоты. На вставке пики плотности состояний на дебаевской частоте в антиадиабатическом пределе



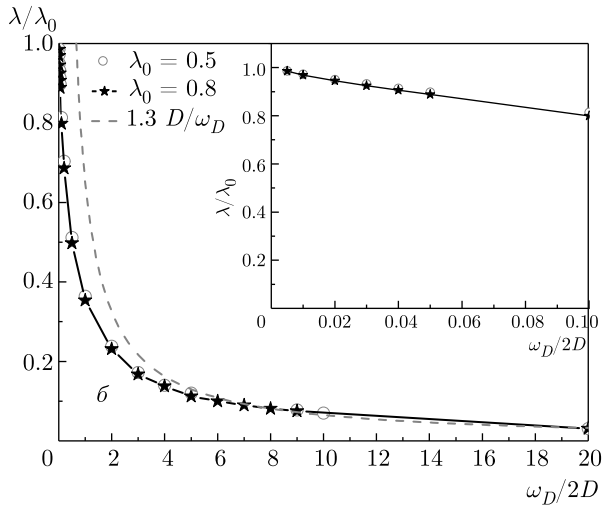


Рис. 3. Зависимость эффективной константы электрон-фононного взаимодействия от характерной фононной частоты. Для двух вариантов фононного пропагатора в модели Дебая: *а* — пропагатор (5), *б* — пропагатор (11). В модели Эйнштейна — *в*. Штриховыми кривыми на *а* и *б* приведено полученное из численных данных асимптотическое поведение $\lambda \sim D/\omega_D$ в антиадиабатическом пределе, на *в* результат (20) работы [8]. На вставках — область малых характерных фононных частот (адиабатический предел)

эффективная константа электрон-фононного взаимодействия обратно пропорциональна характерной частоте фононов:

$$\lambda \sim \frac{D}{\omega_D}, \quad \lambda \sim \frac{D}{\omega_0}. \tag{19}$$

В полном соответствии с предсказаниями работ [8–10], где эта константа анализировалась в подходе Элиашберга. Такое асимптотическое поведение λ, полученное непосредственно из численных данных для модели Дебая в антиадиабатическом пределе, приведено штриховыми кривыми на рис. 3*а,б*. В работе [8] в рамках теории Элиашберга – Макмиллана для эйнштейновской модели оптических фононов было получено общее интерполяционное выражение для эффективной константы электрон-фононного взаимодействия:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{D}{\omega_0 + D}, \tag{20}$$

описывающее и адиабатический и антиадиабатический пределы. Константа λ, определяемая (20), приведена штриховой кривой на рис. 3*в*. Видим, что (20) хорошо описывает адиабатический и антиадиабатический пределы, а в промежуточной области несколько завышает значение λ. Существенное уменьшение эффективной константы в антиадиабатическом пределе, где формально перестает работать теорема Мигдала и казалось бы нельзя пренебрегать вершинными поправками, позволяет использовать применяемое нами приближение первого порядка для СЭЧ.

Перейдем к анализу влияния беспорядка на плотность состояний и эффективную константу электрон-фононного взаимодействия. На рис. 4 приведена эволюция плотности состояний с ростом беспорядка. В адиабатическом пределе (рис. 4*а*) особенность в плотности состояний, связанная с электрон-фононным взаимодействием, лежит в энергетической полосе $\pm\omega_D$ вокруг уровня Ферми, и с ростом беспорядка ширина этой энергетической области практически не меняется. Беспорядок приводит к уширению затравочной зоны с падением плотности состояний на уровне Ферми, что вызывает

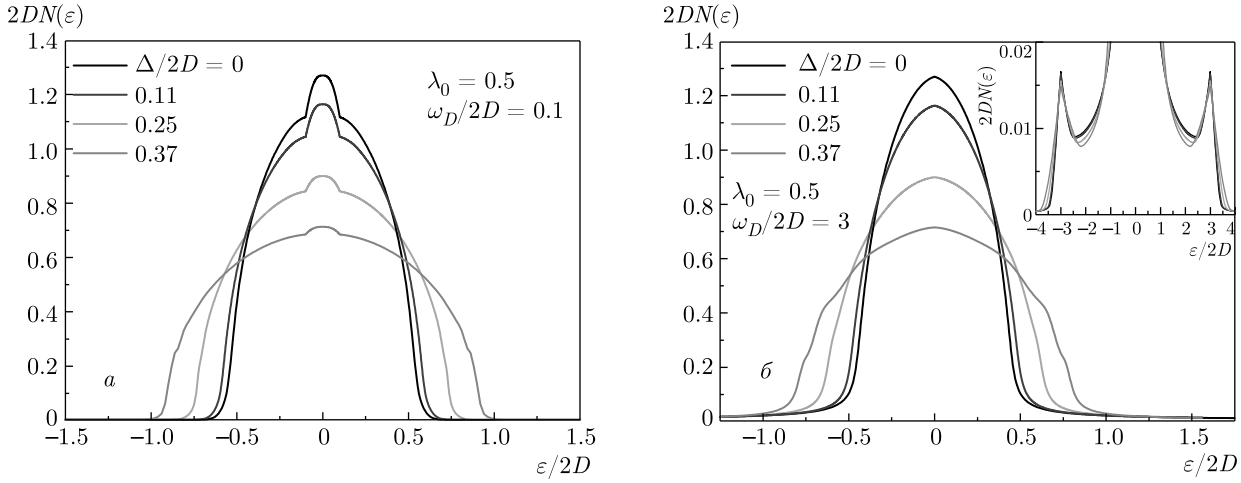


Рис. 4. Эволюция плотности состояний с ростом беспорядка в адиабатическом (*а*) и антиадиабатическом (*б*) пределах

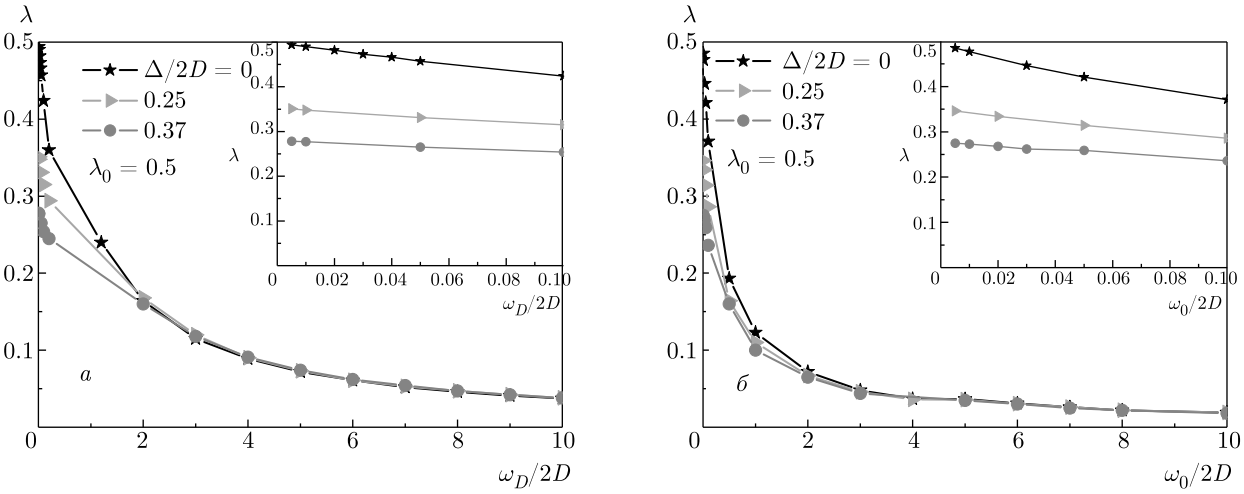


Рис. 5. Зависимость эффективной константы λ от характерной частоты фононов для различных степеней беспорядка в модели Дебая (*а*) и в модели Эйнштейна (*б*). На вставках область малых характерных фононных частот (адиабатический предел)

уменьшение константы λ с ростом беспорядка (см. рис. 5). В антиадиабатическом пределе пики в плотности состояний, связанные с электрон-фононным взаимодействием, располагаются за пределами затравочной зоны на энергии $\pm\omega_D$ от уровня Ферми (см. вставку рис. 4*б*) и практически не изменяются с ростом беспорядка (ни их положение, ни их интенсивность). Это приводит к тому, что беспорядок никак не влияет на величину константы электрон-фононного взаимодействия в антиадиабатическом пределе. В эйнштейновской модели оптических фононов качественно эволюция плотности состояний с ростом беспорядка является аналогичной.

На рис. 5 приведена эволюция зависимости эффективной константы λ от характерной частоты фононов с ростом беспорядка. Видим, что в обеих моделях фононов в адиабатическом пределе константа λ несколько уменьшается с ростом беспорядка, что связано с уменьшением плотности состояний на уровне Ферми. В антиадиабатическом пределе $\lambda \sim D/\omega_D$; D/ω_0 и фактически никак не зависит от беспорядка, что связано, как уже отмечалось выше, с отсутствием влияния беспорядка на пики плотности состояний на энергии $\pm\omega_D$, связанные с электрон-фононным рассеянием.

Наконец перейдем к изучению влияния сильных электронных корреляций на электрон-фононную перенормировку массы электрона. В рамках DMFT+Σ подхода, когда полная СЭЧ есть прямая сумма электронной СЭЧ $\Sigma(\varepsilon)$ и электрон-фононной

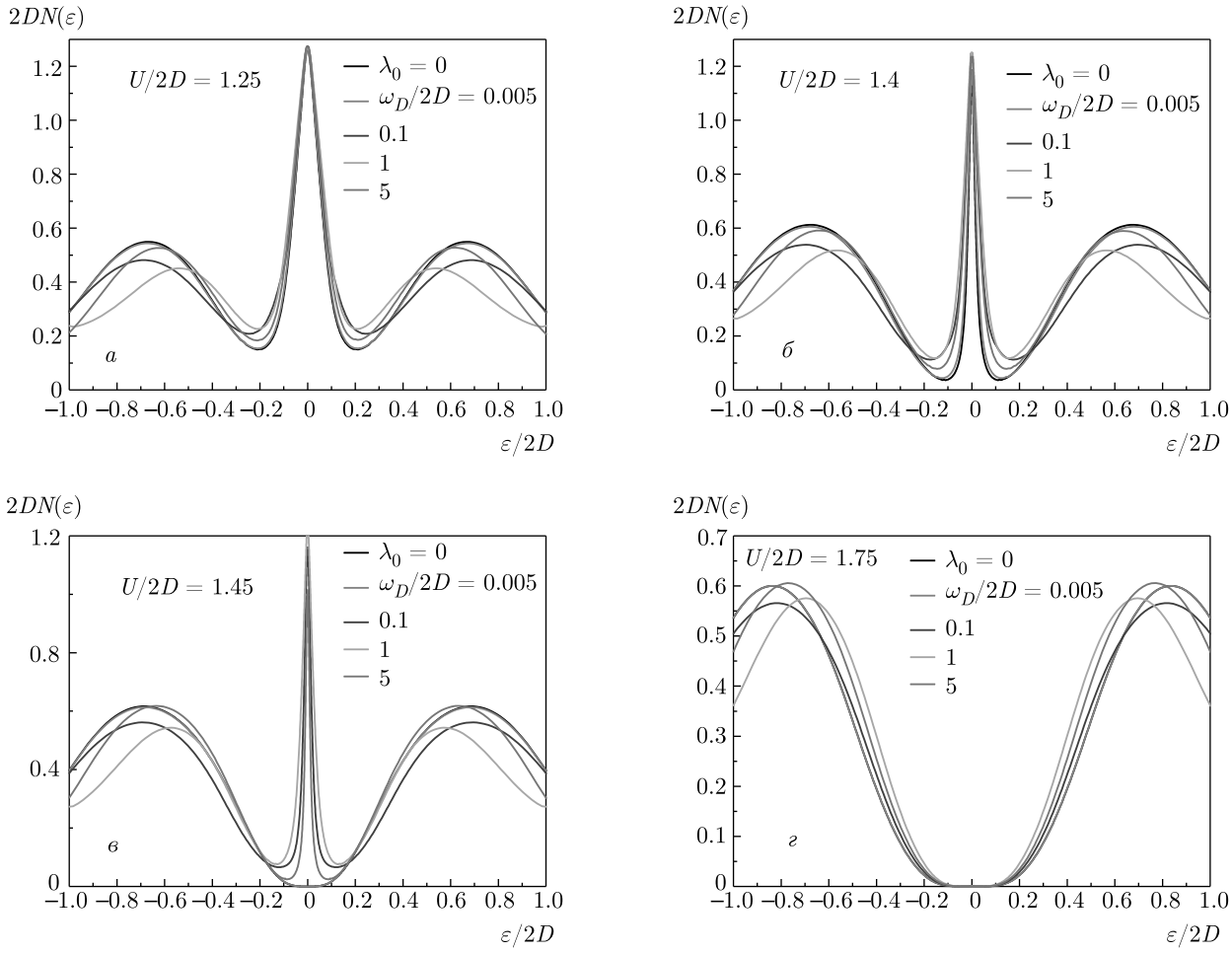


Рис. 6. Плотность состояний при различных значениях дебаевской частоты ($\lambda_0 = 0.5$) и в отсутствие электрон-фононного взаимодействия ($\lambda_0 = 0$) для разной силы электронных корреляций: (*а*) — металлическая фаза, (*б*) — вблизи перехода Мотта (металл), (*в*) — вблизи перехода Мотта (диэлектрик), (*г*) — диэлектрическая фаза

$\Sigma_{ph}(\varepsilon)$, полная перенормировка массы $m^\star/m = 1+\lambda$, где $\lambda = \lambda_{ee} + \lambda_{ph}$ — есть также прямая сумма безразмерных констант межэлектронного

$$\lambda_{ee} = -\left.\frac{d\,\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$$

и электрон-фононного

$$\lambda_{ph} = -\left.\frac{d\,\mathrm{Re}\,\Sigma_{ph}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$$

взаимодействий. Причем в условиях сильных электронных корреляций обычно $\lambda_{ee} \gg \lambda_{ph}$, но поскольку энергетические масштабы перенормировки электронного спектра за счет межэлектронного и электрон-фононного взаимодействий существенно различны, всегда есть возможность разделить эти вклады. В данной работе мы будем изучать именно электрон-фононный вклад в перенормировку массы.

На рис. 6 приведена эволюция плотности состояний с увеличением дебаевской частоты от адиабатического до антиадиабатического предела при $\lambda_0 = 0.5$ для различной силы хаббардовского взаимодействия U. В металлической фазе (рис. 6*а,б*) электрон-фононное взаимодействие приводит к переносу части спектрального веса из верхней и нижней хаббардовских зон на квазичастичный пик на уровне Ферми и этот пик уширяется с увеличением ω_D вплоть до $\omega_D/2D \sim 1$, однако с дальнейшим увеличением ω_D в антиадиабатическом пределе квазичастичный пик опять начинает сужаться. Это связано с уменьшением эффективной константы электрон-фононного взаимодействия λ с ростом час-

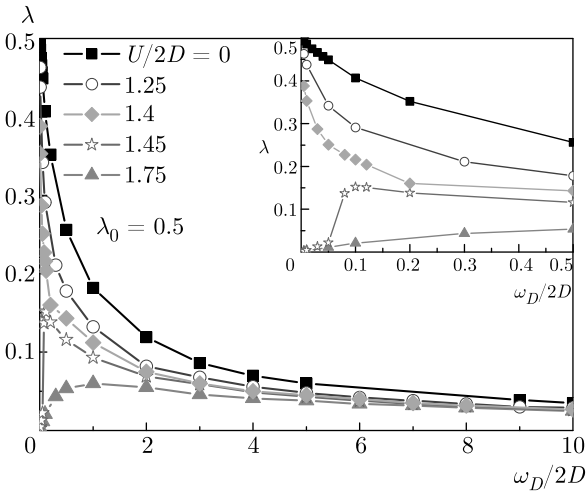


Рис. 7. Зависимость эффективной константы λ от дебаевской частоты для разной силы хаббардовского взаимодействия. На вставке область малых частот Дебая (адиабатический предел)

тоты Дебая в антиадиабатическом пределе. Уширение квазичастичного пика электрон-фононным взаимодействием свидетельствует, что это взаимодействие затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик [13]. Соответственно в диэлектрической фазе вблизи моттовского перехода (рис. 6*в*) рост ω_D приводит к восстановлению квазичастичного пика и переходу диэлектрик–металл, однако дальнейший рост дебаевской частоты в антиадиабатическом пределе приводит к сужению этого пика и его исчезновению (переходу металл–диэлектрик) при дальнейшем росте ω_D. Достаточно глубоко в фазе моттовского диэлектрика (рис. 6*г*) силы электрон-фононного взаимодействия оказывается недостаточно для закрытия моттовской щели, но наибольшее влияние электрон-фононного взаимодействия на плотность состояний в области верхней и нижней хаббардовских зон по-прежнему наблюдается при $\omega_D/2D \sim 1$, а дальнейшее увеличение ω_D уменьшает λ и ослабляет это влияние.

На рис. 7 приведена зависимость эффективной константы электрон-фононного взаимодействия λ от дебаевской частоты для разной силы электронных корреляций. В сильном адиабатическом пределе ($\omega_D \ll D$) эффективная константа λ в металлической фазе мало отличается от затравочной λ_0 при $U = 0$, в диэлектрической фазе на уровне Ферми открывается моттовская щель и пока дебаевская частота меньше этой щели $\lambda \approx 0$, электрон-фононная перенормировка массы отсутствует. Однако в диэлектрике вблизи моттовского перехода (см. рис. 6*в* и случай $U/2D = 1.45$ на рис. 7) само электрон-фононное взаимодействие может (когда ω_D превышает ширину моттовской щели) приводить к закрытию моттовской щели и восстановлению квазичастичного пика на уровне Ферми. Это приводит к быстрому росту константы λ с ростом ω_D в адиабатическом пределе, однако с дальнейшим ростом частоты Дебая в антиадиабатическом пределе константа λ начинает уменьшаться. В антиадиабатическом пределе λ практически не зависит от силы электронных корреляций и даже глубоко в моттовском диэлектрике поведение эффективной константы $\lambda \approx \lambda_0 D/\omega_D$, полученное в работе Садовского [8], сохраняется.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В пределе слабой связи мы проанализировали эффективную константу электрон-фононного взаимодействия λ, связанную с перенормировкой массы, в моделях акустических и оптических фононов в широком интервале величины характерной частоты фононов как в адиабатическом пределе, так и в антиадиабатическом, когда характерная фононная частота много больше ширины затравочной электронной зоны $2D$. Во всех рассмотренных моделях фононного спектра в антиадиабатическом пределе эффективная константа λ обратно пропорциональна характерной частоте фононов.

Мы изучили влияние беспорядка на эффективную константу электрон-фононного взаимодействия. В адиабатическом пределе λ несколько подавляется беспорядком, что связано с уменьшением плотности состояний на уровне Ферми вследствие размытия затравочной плотности состояний беспорядком. В антиадиабатическом пределе беспорядок не оказывает никакого влияния на константу электрон-фононного взаимодействия, несмотря на то что плотность состояний на уровне Ферми также заметно уменьшается с ростом беспорядка.

В рамках DMFT+Σ-подхода мы также исследовали взаимовлияние сильных электронных корреляций и электрон-фононного взаимодействия и изучили влияние электронных корреляций на электрон-фононную перенормировку массы. В сильном адиабатическом пределе эффективная константа электрон-фононного взаимодействия $\lambda \approx \lambda_0$ в металлической фазе и $\lambda \approx 0$ в моттовском диэлектрике. Однако электрон-фононное взаимодействие затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик, приводя к возможности вос-

становления квазичастичного пика с ростом λ_0 или дебаевской частоты. Поэтому в диэлектрике вблизи моттовского перехода рост дебаевской частоты (при ω_D порядка ширины щели) приводит к резкому росту константы λ. В антиадиабатическом пределе электронные корреляции практически не влияют на эффективную константу λ и электрон-фононную перенормировку массы. Таким образом, в антиадиабатическом пределе поведение $\lambda \sim D/\omega_D; D/\omega_0$ сохраняется и в присутствии сильных электронных корреляций и примесного рассеяния.

Благодарности. Авторы благодарны М. В. Садовскому за полезное обсуждение результатов работы.

Финансирование. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00011).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. J. Scalapino, in *Superconductivity*, ed. by R. D. Parks, Marcel Dekker, New York (1969), p. 449.

2. С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Сверхпроводимость переходных металлов их сплавов и соединений*, Наука, Москва (1977).

3. P. B. Allen and B. Mitrović, *Solid State Physics*, Vol. 37, ed. by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich, Academic Press, New York (1982), p. 1.

4. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **34**, 1438 (1958).

5. М. В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016); arXiv: 1605.04426.

6. L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **93**, 054517 (2016).

7. L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **93**, 060507 (2016).

8. М. В. Садовский, ЖЭТФ **155**, 527 (2019); arXiv: 1809.02531.

9. М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ **109**, 165 (2019); arXiv:1811.10184.

10. M. V. Sadovskii, J. Supercond. Novel Magn. **33**, 19 (2020); arXiv:1908.00718.

11. А. С. Александров, А. Б. Кребс, УФН **162**, 1 (1992).

12. I. Esterlis, B. Nosarzewski, E. W. Huang, D. Moritz, T. P. Devereux, D. J. Scalapino, and S. A. Kivelson, Phys. Rev. B **97**, 140501(R) (2018).

13. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Phys. Rev. B **80**, 115124 (2009); arXiv:0906.3865.

14. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, J. Phys. Chem. Sol. **72**, 366 (2011); arXiv:1006.0294.

15. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1963).

16. М. В. Садовский, *Диаграмматика*, ИКИ, Москва – Ижевск (2010).

17. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).

18. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

19. D. Vollhardt, in *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings, Vol. 1297 (AIP, Melville, New York, 2010), p. 339; arXiV:1004. 5069.

20. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ **82**, 217 (2005) [JETP Letters **82**, 198 (2005)]; arXiv:cond-mat/0506215.

21. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Prushke, and V. I. Anisimov. Phys. Rev. B **72**, 155105 (2005); arXiV:cond-mat/0508585.

22. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Physics Uspekhi **53**, 325 (2012)]; arXiv:1109.2305.

ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 3 (9), стр. 443–452 © 2021

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА NiO ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

С. Г. Овчинников [a*], *Т. М. Овчинникова* [b]

[a] *Институт физики им. Л. В. Киренского,*
Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр»
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

[b] *Институт леса им. В. Н. Сукачева,*
Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр»
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 14 апреля 2021 г.,
после переработки 14 апреля 2021 г.
Принята к публикации 8 мая 2021 г.

В рамках многоэлектронного подхода изучено влияние высокого давления на электронные свойства NiO. Физика низких энергий описывается эффективной моделью Хаббарда, учитывающей d-электроны Ni и p-электроны O в трех зарядовых секторах гильбертова пространства: нейтральных состояниях (конфигурации $d^8 + d^9\underline{L} + d^{10}\underline{L}^2$), состояниях с одной дыркой (конфигурации $d^7 + d^8\underline{L} + d^9\underline{L}^2$) и состояниях с одним добавленным электроном ($d^9 + d^{10}\underline{L}$), где $\underline{L}$ обозначает дырку на лиганде. Из-за кроссовера термов с высоким спином (HS) и низким спином (LS) в состояниях с одной дыркой при давлении P_S, определяемом конкуренцией хундовского внутриатомного обменного взаимодействия и увеличивающегося с давлением кристаллического поля $10Dq$, эффективный параметр Хаббарда U_{eff} и зарядовая щель E_g зависят от давления. Мы получили слабое увеличение E_g для $P < P_S$ и слабое уменьшение E_g для $P > P_S$. Давление перехода Мотта – Хаббарда оценивается в интервале 450–650 ГПа.

DOI: 10.31857/S004445102109011X

1. ВВЕДЕНИЕ

Сильнокоррелированные электронные системы (SCES) включают в себя множество новых материалов, таких как изоляторы Мотта, сверхпроводники с высоким T_C, манганиты с колоссальным магнитосопротивлением, мультиферроики, тяжелые фермионы и т. д. Сильные локальные кулоновские взаимодействия приводят к специфическим свойствам SCEC. NiO является одним из наиболее важных соединений SCES. Мотт [1] считал, что NiO демонстрирует отклонение от одноэлектронной зонной теории, что потом привело к понятию изоляторов Мотта. Ожидается, что при высоком внешнем давлении увеличение ширины электронной зоны приведет к переходу изолятор–металл (IMT) с закрытием диэлектрической щели и делокализацией $3d$-электронов [2] и коллапсом магнитных моментов [3]. Во многих других моноксидах $3d$-металлов металлизация и магнитный коллапс известны, например, выше 70 ГПа в FeO [3, 4], от 80 до 100 ГПа в MnO [5, 6] и выше 120 ГПа в CoO [7, 8]. До сих пор было установлено, что NiO стабилен до 147 ГПа [9], не было обнаружено магнитного коллапса при ядерном рассеянии вперед синхротронного излучения до 280 ГПа [10]. Зависимость диэлектрической щели от давления по изменениям спектров оптического поглощения и переход в металлическое состояние при 240 ГПа по измерениям сопротивления были найдены в работе [11]. По мнению авторов [11], измеренный ими переход в NiO, скорее всего, обусловлен индуцированными примесями носителями заряда и не отражает внутреннюю физику диэлектрического состояния NiO.

Теория функционала плотности (DFT) в настоящее время довольно успешно применяется в физике конденсированных сред для описания зонных электронов в периодических кристаллических ре-

* E-mail: sgo@iph.krasn.ru

шетках [12]. Тем не менее, для SCES простейшие версии теории, такие как LDA и GGA, обычно терпели неудачу [13]. Локализованные электроны могут быть лучше описаны в кластерных подходах с более адекватным учетом сильных кулоновских взаимодействий. Для NiO кластерная модель была предложена в работах [14,15]. В этом подходе рассматривается 10-зарядный кластер $(NiO_6)^{10-}$, и его электронная структура описывается конфигурационным взаимодействием. Хотя трансляционная симметрия игнорируется, локальные взаимодействия можно явно учитывать. Наиболее важными взаимодействиями являются кулоновские d–d-взаимодействия и O2p–Ni3d-гибридизация. Это достигается путем рассмотрения двудырочных конфигураций, формирующих основное состояние (d^8, $d^9\underline{L}$ и $d^{10}\underline{L}^2$), однодырочных состояний, формирующих спектры сродства к электронам (BIS) (d^9 и $d^{10}\underline{L}$), и трехдырочных состояний, определяющих спектры ионизации (XPS) (d^7, $d^8\underline{L}$, $d^9\underline{L}^2$ и $d^{10}\underline{L}^3$). Дырки определяются относительно заполненных состояний 3d- и лиганда (O2p), а $\underline{L}$ обозначает дырку на лиганде. В рамках кластерного подхода был сделан вывод, что NiO не является изолятором Мотта – Хаббарда [16]. Общая классификация двух конкурирующих состояний изолятора, изолятора Мотта – Хаббарда и изолятора с переносом заряда, была предложена Зааненом, Завацким и Алленом [17]. По-видимому, NiO можно поместить в промежуточный режим фазовой диаграммы Заанена, Завацкого и Аллена. Недавний анализ экспериментальных данных рентгеновской спектроскопии и электронной структуры NiO в рамках кластерного подхода можно найти в работе [18].

Для рассмотрения SCES в рамках модели Хаббарда были предложены несколько различных численных подходов, таких как квантовый метод Монте-Карло (QMC) [19–23], кластерная теория возмущений (CPT) [24, 25], вариационное кластерное приближение (VCA) [26], динамическая теория среднего поля (DMFT) [27], ее кластерные обобщения (CDMFT) [28, 29] и другие методы, предназначенные для работы с сильнокоррелированными системами [30–34], см. недавний обзор [35]. Для введения эффектов сильных корреляций в теорию функционала плотности было изобретено несколько гибридных схем, LDA+DMFT с локальной собственной энергией [36–39] и его кластерными расширениями [29, 40–42].

Для объединения достоинств зонного и кластерного подходов к SCES нами был предложен многоэлектронный обобщенный метод сильной связи (GTB) [43]. В этом методе развиваются идеи Хаббарда в режиме сильных корреляций [44] для многозонной $p-d$ модели, позволяющей рассматривать различные SCES, такие как купраты, манганиты, кобальтаты и др. Параметры модели могут быть рассчитаны *ab initio* в рамках гибридного подхода LDA + GTB [45, 46]. Низкоэнергетический предел в GTB описывается эффективной моделью Хаббарда с параметром [17]

$$U_{eff} = E_0(n+1) + E_0(n-1) - 2E_0(n),$$

где $E_0(n)$ — энергия основного терма кластера MeO_6 с n электронами, для NiO $n = 8$. Подобно кластерным подходам [14, 15], основной терм $E_0(n)$ образуется смесью конфигураций d^n, $d^{n+1}\underline{L}$, $d^{n+2}\underline{L}^2$. Межкластерный перескок электронов может быть записан в терминах многоэлектронных X-операторов Хаббарда, построенных на собственных состояниях кластеров $n-1$, n и $n+1$. Это позволяет выйти за рамки кластерной модели и рассчитать электронную структуру решетки в рамках такой эффективной модели Хаббарда. При высоком давлении различные конфигурации d^n могут подвергаться спиновому переходу из состояния HS в состояние LS, что приводит к зависящему от давления $U_{eff}(P)$ [47, 48]. Недавно мы рассмотрели влияние высокого давления на электронную структуру CoO [49].

В данной работе мы рассмотрим влияние высокого давления на электронную структуру и свойства NiO. Особенностью NiO является стабильность нейтральных состояний d^8 и с одним добавленным электроном d^9, а также кроссовер HS-LS в конфигурации с одним удаленным электроном d^7. Этот кроссовер приводит к излому в зависимости $U_{eff}(P)$. Наша теория содержит два параметра, зависящих от давления, производные кристаллического поля и ширины электронной зоны по давлению. Первый из них был найден в [50] из зависимости от давления энергий оптических d–d-возбуждений. Второй мы оцениваем по зависящей от давления температуре Нееля [51]. Затем мы можем экстраполировать диэлектрическую щель до нуля, чтобы оценить, что переход Мотта – Хаббарда и магнитный коллапс в NiO можно ожидать в интервале 450–650 ГПа.

Остальная часть статьи организована следующим образом. Основные идеи многоэлектронного обобщенного подхода сильной связи (GTB) и его связь с точным представлением Лемана обсуждаются в разд. 2. Влияние спинового кроссовера в состояниях с одной дыркой на зависимость $U_{eff}(P)$ от давления описано в разд. 3. Оценка приращения ширины электронной зоны с ростом давления по

экспериментальным данным для температуры Нееля $T_N(P)$ обсуждается в разд. 4. Раздел 5 содержит анализ зависимостей от давления диэлектрической щели E_g ниже и выше спинового кроссовера. Оценка критического давления перехода Мотта – Хаббарда в рамках двух подходов также приведена в разд. 5. Линейная экстраполяция ширины зоны приводит к $P_{IMT} = 900$ ГПа, более реалистичный подход с использованием уравнения состояний Берча – Мурнагана дает P_{IMT} в интервале 450–650 ГПа. Обсуждение результатов приведено в разд. 6.

2. ОСНОВНЫЕ ИДЕИ МНГОЭЛЕКТРОННОГО ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Для прояснения понятия электрона в сильнокоррелированных системах, где привычная одноэлектронная теория неприменима, мы начнем с точного представления Лемана для одноэлектронной функции Грина при нулевой температуре [52]:

$$G_\sigma(k,\omega) = \sum_m \left(\frac{A_m(k,\omega)}{\omega - \Omega_m^+} + \frac{B_m(k,\omega)}{\omega - \Omega_m^-} \right).$$

Полюса этой функции определяются набором одночастичных возбуждений (квазичастиц) с энергиями

$$\Omega_m^+ = E_m(N+1) - E_0(N) - \mu,$$
$$\Omega_m^- = E_0(N) - E_m(N-1) - \mu$$

и спектральными весами

$$A_m(k,\omega) = |\langle 0, N | a_{k\sigma} | m, N+1 \rangle|^2,$$
$$B_m(k,\omega) = |\langle m, N-1 | a_{k\sigma} | 0, N \rangle|^2.$$

Здесь $|m, N\rangle$ обозначает m-ое собственное состояние системы с N электронами,

$$H|m,N\rangle = E_m|m,N\rangle.$$

При конечных температурах представление Лемана выглядит следующим образом:

$$G_\sigma^R(k,\omega) = \sum_{mn} W_n \frac{A_{mn}(k,\omega)}{\omega - \Omega_{mn}^+ + i0} \left(1 + e^{-\Omega_{mn}^+/T}\right).$$

Теперь квазичастица определяется как возбуждение из начального состояния n в конечное m с энергией

$$\Omega_{mn}^+ = E_m(N+1) - E_n(N) - \mu.$$

Статистический вес состояния $|n\rangle$ находится из распределения Гиббса с термодинамическим потенциалом Ω:

$$W_n = \exp\{(\Omega - E_n + \mu N)/T\}.$$

При ненулевой температуре оба состояния, основное $|0, N\rangle$ и возбужденное $|n, N\rangle$ частично заняты. Таким образом, квазичастица нумеруется парой индексов $(m,\, n)$. Это одноэлектронное возбуждение в многоэлектронной системе за счет добавления одного электрона к исходному N-электронному состоянию $|n, N\rangle$ с образованием конечного $(N+1)$-электронного состояния $|m, N+1\rangle$. Энергия добавления электронов равна

$$\Omega_{mn}^+ = E_m(N+1) - E_n(N) - \mu,$$

в то время как энергия удаления электронов равна

$$\Omega_{mn}^- = E_m(N) - E_n(N-1) - \mu.$$

В практических расчетах представление Лемана бесполезно, поскольку точные многоэлектрные собственные состояния $|m, N\rangle$ для кристалла неизвестны.

Метод GTB — это реализация многоэлектронных идей представления Лемана в рамках кластерной теории возмущений. В этом подходе полный гамильтониан переписывается как сумма всех внутрикластерных членов H_f, $H_0 = \sum H_f$ и сумма всех межкластерных членов H_{fg}, $H_{int} = \sum H_{fg}$. Внутрикластерный гамильтониан H_f включает в себя все d-электроны и ближайшие кислородные p-орбитали, которые ортогонализированы для формирования молекулярных орбиталей с центром на узле решетки f (подробнее см. [45, 46]), и все локальные взаимодействия p- и d-электронов. Численная точная диагонализация локальной части обеспечивает точные многоэлектронные собственные энергии и собственные состояния кластера,

$$H_f|m\rangle = E_m|m\rangle.$$

Подобно обычной модели Хаббарда, мы вводим операторы Хаббарда

$$X_f^{m,n} = |m\rangle\langle n|,$$

определяемые набором точных внутрикластерных собственных состояний. Тогда локальная часть полного гамильтониана становится диагональной

$$H_f = \sum_m E_m X_f^{m,m}$$

и описывает энергию многоэлектронных термов $|m\rangle$ в различных конфигурациях. Гильбертово пространство точных собственных состояний для кластера NiO_6 схематично показано на рис. 1. Здесь занятый при $T = 0$ основной терм d^8 с $S = 1$ отмечен

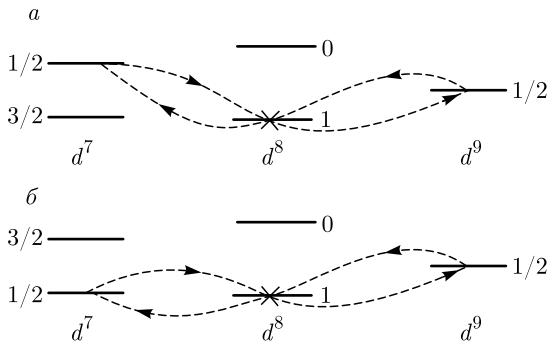


Рис. 1. Схема многоэлектронных термов кластера NiO_6 для трех секторов гильбертова пространства для конфигураций с 8 электронами (зарядово-нейтральное состояние), с одной дыркой (7 электронов) и с одним добавленным электроном (9 электронов). Для каждого терма указано значение спина, нижний терм d^8 заселен при нулевой температуре, что отмечено крестиком. Штриховые линии показывают виртуальные электронно-дырочные возбуждения, формирующие антиферромагнитное суперобменное взаимодействие. Верхняя часть (*а*) относится к давлениям ниже спинового кроссовера P_S в дырочном секторе, нижняя часть (*б*) для давления выше кроссовера

крестиком, а возбужденный d^8 синглет пуст. Термы с удалением электрона (рождением дырки) в конфигурации d^7 — это HS с $S = 3/2$ и LS с возбужденным $S = 1/2$ термами для низкого давления (рис. 1*а*), которые инвертируются выше спинового кроссовера, см. уравнение (4) ниже (рис. 1*б*). Для состояний d^9 с добавлением электрона мы показываем только основной терм с $S = 1/2$.

Следующим шагом в GTB является включение эффектов межкластерных перескоков и взаимодействий, которые рассматриваются в рамках теории возмущений. Анализ диаграммного ряда в рамках диаграммной техники для операторов Хаббарда [53] приводит к точному обобщенному уравнению Дайсона [54] для фермионных квазичастиц с электрическим зарядом e и спином 1/2. Таким образом, электрон представляет собой линейную комбинацию возбуждений между различными многоэлектронными термами, аналогичную представлению Лемана. Они были названы хаббардовскими электронами в подходе GTB, чтобы подчеркнуть разницу со свободным электроном.

3. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭФФЕКТИВНАЯ МОДЕЛЬ ХАББАРДА ДЛЯ NiO

Хорошо известно, что сильные корреляции расщепляют одноэлектронную зону в модели Хаббарда на нижнюю и верхнюю подзоны Хаббарда (соответственно LHB и UHB). В обычной модели Хаббарда с орбитально-невырожденной зоной шириной $2W$ и внутриатомным кулоновским параметром Хаббарда U запрещенная зона в пределе сильных электронных корреляций ($U \gg W$), $E_g = U - W$, уменьшается с ростом давления P из-за расширения зоны, возникающего в результате уменьшения межатомного расстояния,

$$W(P) = W(0) + \alpha_W P.$$

Это приводит к переходу изолятор–металл Мотта–Хаббарда в случае наполовину заполненной зоны, когда полуширина зоны достигает критического значения $W_C = aU$ ($a \sim 1$) [1, 45]. Параметр Хаббарда U имеет внутриатомную природу и считается независимым от давления.

Ситуация становится иной в многоорбитальных аналогах модели Хаббарда, которые могут быть использованы для описания NiO. Для таких моделей исходные концепции Хаббарда должны быть дополнены с учетом различных многоэлектронных термов d^n и анионных состояний sp. В низкоэнергетическом диапазоне эффективный гамильтониан такой многозонной p–d-модели в рамках подхода GTB может быть записан в виде эффективной модели Хаббарда, в которой атомные термы d^0, d^1 и d^2 исходной модели Хаббарда заменены локальными многоэлектронными термами d^7, d^8 и d^9 [17,55]. Здесь каждый термин d^n — это просто обозначение, означающее гибридизованный терм $d^n + d^{n+1}\underline{L} + d^{n+2}\underline{L}^2$, как в кластерных подходах. В атомном пределе ($W = 0$) аналоги LHB и UHB соответствуют энергиям

$$\Omega_v = E_0\left(d^8\right) - E_0\left(d^7\right)$$

(валентная зона) и

$$\Omega_c = E_0\left(d^9\right) - E_0\left(d^8\right)$$

(зона проводимости). Предполагается, что среднее число электронов равно $\langle n_e \rangle = 8$. Щель между UHB и LHB определяется эффективным параметром Хаббарда [17]

$$U_{eff} = \Omega_c - \Omega_v = E_0(9) + E_0(7) - 2E_0(8). \quad (1)$$

Из-за конкуренции между внутриатомным обменом Хунда J_H и кубической составляющей кристаллического поля $10Dq$ каждая конфигурация d^n ($n = 4$–7) может иметь основные состояния либо HS, либо LS [56]. Спин-кроссовер HS-LS может происходить за счет роста кристаллического поля с давлением, которое также может быть аппроксимировано линейной зависимостью [57]

$$10Dq\,(P) = 10Dq\,(0) + \alpha_\Delta P.$$

В результате спиновый кроссовер изменяет $U_{eff}(d^n)$, что и приводит к связи с переходом Мотта – Хаббарда. Влияние спин-кроссовера на параметр электронной корреляции оказывается не универсальным; для ионов d^5 U_{eff} подавляется, тогда как для ионов d^6 U_{eff} увеличивается из-за спинового кроссовера [47, 48, 58], для ионов d^7 в CoO U_{eff} не изменяется при спиновом кроссовере [49].

Для NiO только состояние с удалением электрона может проявить спиновый кроссовер между двумя термами:

а) терм с высоким спином (HS) со спином $S = 3/2$ и энергией

$$E_{HS}\left(d^7\right) = E_C\left(d^7\right) - 8Dq - 11J_H; \qquad (2)$$

б) низкоспиновый (LS) терм, со спином $S = 1/2$ и энергией

$$E_{LS}\left(d^7\right) = E_C\left(d^7\right) - 18Dq - 9J_H. \qquad (3)$$

Здесь $E_C(d^7)$ является независимой от спина частью кулоновского взаимодействия для семи электронов в кластере $(NiO_6)^{9-}$. Из этих формул следует, что для свободного иона в нулевом кристаллическом поле состояние с высоким спином более благоприятно по энергии, но с увеличением кристаллического поля энергия состояния с низким спином уменьшается быстрее, и обе энергии становятся равными при $10Dq = 2J_H$. Это условие соответствует давлению

$$P_S = (2J_H - 10Dq\,(0))/\alpha_\Delta. \qquad (4)$$

Для конфигураций d^8 и d^9 энергии основных термов равны

$$E\left(d^8\right) = E_C\left(d^8\right) - 12Dq - 13J_H, \qquad (5)$$

$$E(d^9) = E_C(d^9) - 6Dq - 16J_H. \qquad (6)$$

Окончательно, мы можем записать $U_{eff}(P)$ ниже и выше давления кроссовера P_S следующим образом:

$$\begin{aligned} U_{eff} &= U\,(8) + 10Dq - J_H, \quad P < P_S, \\ U_{eff} &= U\,(8) + J_H, \quad P > P_S. \end{aligned} \qquad (7)$$

Здесь

$$U(8) = E_C(d^9) + E_C(d^7) - 2E_C(d^8)$$

— не зависящий от давления вклад. Зависящая от давления диэлектрическая щель может быть записана в виде

$$\begin{aligned} E_g\,(P) &= U\,(8) - J_H + \Delta_0 - W\,(0) + (\alpha_\Delta - \alpha_W)\,P, \\ &\qquad P < P_S, \qquad (8) \\ E_g\,(P) &= U\,(8) + J_H - W\,(0) - \alpha_W P, \quad P > P_S. \end{aligned}$$

Здесь мы обозначили $10Dq\,(P = 0) = \Delta_0$. Из уравнения (8) следует, что увеличение кристаллического поля при малом давлении ниже давления спинового кроссовера приводит к росту диэлектрической щели, в то время как увеличение ширины зоны приводит к уменьшению щели для всех давлений. Таким образом, кроссовер HS-LS для соединений с ионными состояниями d^8 конкурирует с тенденцией к переходу изолятор–металл (IMT) при росте давления. В зависимости от соотношений между двумя барическими производными α_Δ и α_W щель может изменять начальный рост на уменьшение с дальнейшим увеличением давления или монотонно уменьшаться с давлением. Во всяком случае, в обоих случаях щель будет иметь излом при давлении спинового кроссовера P_S в незанятой конфигурации d^7.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Некоторые параметры известны из литературы. Например, кристаллическое поле в отсутствие внешнего давлении $\Delta_0 = 0.08\,\text{Ry} = 1.08$ эВ найдено из спектров оптического поглощения [59, 60], его барическая производная $\alpha_\Delta = 7.28$ мэВ/ГПа взята из оптических спектров, зависящих от давления [50]. Полуширина электронной зоны $W(0)$ и кулоновские параметры U и J_H были оценены на основе анализа экспериментальных данных [16]. Дополнительная подгонка этих параметров с использованием зависящих от давления спектров оптического поглощения NiO была приведена в [11] и дает следующие результаты: $U(8) = U = 5.45$ эВ, $J_H = 0.75$ эВ, $W(0) = 1.8$ эВ.

При этих параметрах давление спинового кроссовера $P_S = 57.7$ ГПа очень близко к излому в щели E_g при 55 ГПа, измеренному в [11]. Единственным до сих пор неизвестным параметром является барическая производная ширины зоны α_W, ниже мы обсудим, как можно использовать барическую зависимость температуры Нееля $T_N(P)$ [51], $dT_N/dP = 7.33$ К/ГПа, для оценки этого параметра. В теории Андерсона [61] для NiO известно, что 180-градусное антиферромагнитное сверхобменное взаимодействие ближайших магнитных катионов равно $J = 2t^2/U_{eff}$. Здесь t — параметр катион-анион-катион межатомного перескока электронов, определяющий полуширину зоны $W(0) = 6t_0$. При $W(0) = 1.8$ эВ получается $t_0 = 0.3$ эВ. Для NiO 90-градусный обмен ближайшими соседями ничтожно мал, и мы будем пренебрегать им. Параметр $U_{eff} = U + J_H$ в знаменателе эффективного

обмена Гейзенберга в случае NiO определяется рождением и аннигиляцией виртуальной электронно-дырочной пары. Эти возбуждения включают в себя LS-конфигурацию с удалением электрона (см. рис. 1, при $P = 0$ основной член d^7 имеет $S = 3/2$, но обменная АФМ-связь осуществляется через $S = 1/2$ LS-терм d^7 для всех давлений [62]), поэтому для $P = 0$ в приближении среднего поля для эффективной модели Гейзенберга с обменным взаимодействием J, $S = 1$ и числом вторых соседей $z_2 = 6$ температура Нееля может быть записана в виде

$$T_N(0) = S(S+1)Jz_2/3 = 8{t_0}^2/(U + J_H). \qquad (9)$$

Барическая производная температуры Нееля равна

$$\frac{dT_N}{dP} = \frac{16t_0}{U + J_H}\alpha_t, \qquad (10)$$

где α_t определяет увеличение параметра перескока под давлением,

$$t(P) = t_0 + \alpha_t P.$$

С приведенными выше параметрами U, J_H, t_0 и экспериментальным значением $dT_N/dP = 7.33$ К/ГПа, измеренным в [39] ниже 30 ГПа, мы получили $\alpha_t = 9.47$ К/ГПа $= 0.815$ мэВ/ГПа. Барическая зависимость полуширины зоны $\alpha_W = 6\alpha_t = 4.89$ мэВ/ГПа.

5. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ЩЕЛЬ, ЗАВИСЯЩАЯ ОТ ДАВЛЕНИЯ, НИЖЕ И ВЫШЕ СПИНОВОГО КРОССОВЕРА

Теперь мы готовы обсудить диэлектрическую щель (8) при давлении окружающей среды и ее зависимость от внешнего давления. При нулевом давлении $E_g(0) = 3.98$ эВ. Из-за большей барической производной кристаллического поля $\alpha_\Delta = 7.28$ мэВ/ГПа по сравнению с $\alpha_W = 6\alpha_t = 4.89$ мэВ/ГПа щель растет до давления спинового кроссовера P_S (рис. 2). В точке кроссовера $E_g(P_S) = 4.12$ эВ. Барическую зависимость щели 2.39 мэВ/ГПа можно сравнить с экспериментальным значением 2.78 ± 0.30 мэВ/ГПа из рис. S5 в приложении к статье [11].

Выше давления спинового кроссовера диэлектрическая щель уменьшается с производной $\alpha_W = -4.89$ мэВ/ГПа, что можно сравнить с экспериментальным значением -5.0 ± 0.3 мэВ/ГПа [11]. Предполагая тот же линейный тренд, мы экстраполируем щель до нуля и получаем оценку величины давления перехода изолятор–металл $P_{IMT} = 900$ ГПа. Следует отметить, что линейная экстраполяция зависимостей кристаллического поля и

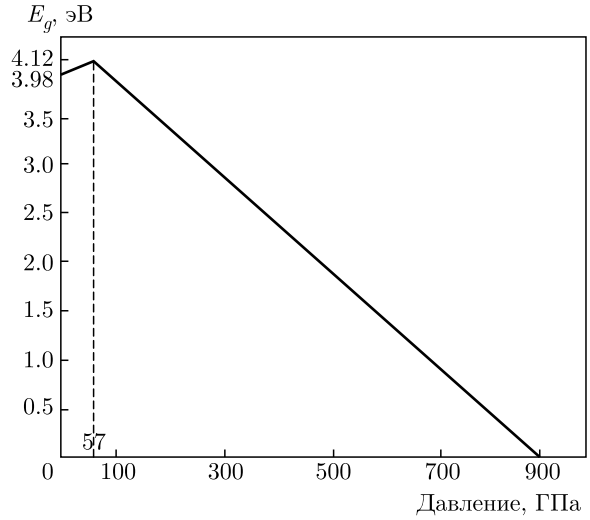


Рис. 2. Зависимость диэлектрической щели в NiO от давления

полуширины электронной зоны от давления, которая справедлива при малых давлениях вплоть 240 ГПа (линейная зависимость щели была измерена в [11] до этого давления), сомнительна при более высоких давлениях. Вот почему ниже мы приводим другую оценку ширины зоны и давления перехода изолятор–металл с использованием уравнения состояний Берча – Мурнагана. Известно, что параметр межатомного перескока для d-электронов зависит от межатомного расстояния как $t \sim r^{-5}$ [63]. Мы запишем это соотношение как функцию объема

$$t(P) = t_0(V/V_0)^{-5/3}, \qquad (11)$$

где t_0 и V_0 есть параметры перескока и объем в отсутствие внешнего давления. Объем и давление связаны уравнением состояния, или уравнением Берча – Мурнагана. Вводя безразмерный объем $u = V/V_0$, мы можем записать уравнение Берча – Мурнагана в виде

$$P = \frac{3}{2}B_0\left[u^{-7/3} - u^{-5/3}\right] \times \\ \times \left\{1 - \frac{3}{4}(4 - B')\left(u^{-2/3} - 1\right)\right\}. \qquad (12)$$

Вводя новую переменную

$$x(P) = (V/V_0)^{-5/3},$$

можем записать уравнение для критического давления перехода изолятор–металл в виде

$$E_g(P_{IMT}) = U + J_H - W_0 x(P_{IMT}) = 0. \qquad (13)$$

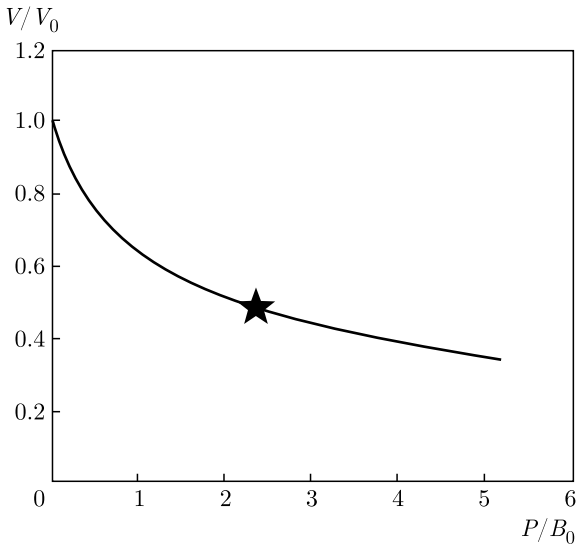


Рис. 3. Зависимость объема от безразмерного давления из уравнения Берча – Мурнагана. Звездочка указывает на точку перехода изолятор–металл

Величина критического давления находится из условия

$$x\left(P_{IMT}\right) = \left(U + J_H\right)/W_0. \tag{14}$$

Подчеркнем, что это условие не использует линейную экстраполяцию и пригодно при любых величинах давления. Для введенного выше набора параметров $U = 5.45$ эВ, $J_H = 0.75$ эВ, $W_0 = 1.8$ эВ из работы [11] критическое давление определяется условием

$$x(P_{IMT}) = 3.44. \tag{15}$$

Для этого значения x из уравнения Берча – Мурнагана определяем критические значения объема $V/V_0 = 0.47$ и давления $P/B_0 = 2.34$, при которых происходит переход изолятор–металл (рис. 3). Для значений упругих модулей из работы [50] $B_0 = 197$ ГПа и $B' = 3.4$ мы получаем $P_{IMT} = 461$ ГПа.

Критическое давление зависит от значений объемных модулей, которые различаются в литературе. В таблице мы представляем набор данных, выбранных из литературы. Когда несколько пар B_0 и B' были доступны от одних и тех же авторов, мы берем данные, измеренные при небольшом давлении, чтобы избежать негидростатических эффектов. Из этой таблицы видно, что ожидаемое значение P_{IMT} составляет 450–650 ГПа, а значение 900 ГПа, полученное в рамках линейной экстраполяции, слишком завышено.

Таблица. Значения упругих модулей для NiO по данным работ разных авторов и соответствующие им значения критического давления перехода изолятор–металл

Работы	B_0, ГПа	B'	P_{IMT}, ГПа
[50]	197	3.4	461
[10]	170	4.35	552
[9]	192	4.0	634
[65]	187	4.0	617
[64]	189	4.0	624

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В настоящей работе мы берем эмпирические значения параметров модели, в основном полученные из зависимостей давления спектров оптического поглощения [11] и барической зависимости температуры Нееля. Теперь мы можем сравнить величину диэлектрической щели при нулевом давлении $E_g(0) = 3.98$ эВ со значениями 4.3 эВ, полученными при измерениях XPS и BIS [16], и 4 эВ при измерениях XAS и XES [14, 66, 67]. Существует множество теоретических работ с различными подходами на основе DFT для расчета электронных параметров и спектров NiO [3, 14, 68–84], а также экспериментальных исследований [9–11, 16, 50, 70, 85–90]. Основным выводом из этих работ является важность сильных электронных корреляций, что является центральной идеей нашей статьи. Мы также хотим упомянуть статью по расчетам методом DFT [84] с гибридным потенциалом B3LYP, который дает разумное значение для щели при нулевом давлении $E_g(0) = 4.2$ эВ и огромное значение давления перехода 2.4 ТПа и магнитного коллапса при 3.7 ТПа. При другом выборе расчетной схемы, PWGGA, те же авторы получили заниженное значение щели $E_g(0) = 1.3$ эВ и давление перехода 700 ГПа.

Наш подход слишком упрощен, чтобы рассматривать тонкие детали электронных спектров NiO. Тем не менее он позволяет понять происхождение излома на зависимости диэлектрической щели от давления, обнаруженного ранее при исследовании оптических спектров [11], и описать в хорошем согласии с экспериментом как величину щели при нулевом давлении, так и ее барические производные ниже и выше кроссовера. Возникновение излома на

зависимости щели от давления связано со спиновым кроссовером в виртуальных состояниях электронной d^7-конфигурации. Эти состояния не заселены, тем не менее они участвуют в формировании диэлектрической щели в рамках многоэлектронного подхода. Предсказанный нами переход изолятор–металл можно ожидать при давлениях 450–650 ГПа. Уточнение экспериментальных данных по объемным модулям упругости позволит более точно предсказать величину критического давления.

Высокое значение давления 450–650 ГПа для перехода Мотта – Хаббарда согласуется со стабильностью магнитного состояния в NiO по крайней мере до 280 ГПа [10]. Ранее переход изолятор–металл в NiO был обнаружен в [11] при давлении 240 ГПа. Это сопровождается изменением наклона удельного сопротивления по отношению к давлению, что характерно для перехода изолятор–металл, и энергия активации от измерений удельного сопротивления падает до нуля. Тем не менее абсолютное значение энергии активации ниже перехода составляет около 0.15 эВ, поэтому сами авторы [11] рассматривают этот эффект как металлизацию некоторых миноритарных носителей заряда, связанных с дефектами образца.

Таким образом, NiO является наиболее стабильным моттовским изолятором среди других $3d$-монооксидов. Мы обнаружили, что зависимость диэлектрической щели от давления характеризуется изломом, возникающим в результате пересечения HS–LS-термов в незанятой конфигурации d^7. Эти состояния участвуют в образовании диэлектрической щели из-за эффектов сильных корреляций. Наш анализ показывает, что переход изолятор–металл и магнитный коллапс ожидаются при очень высоком давлении в интервалах 450–650 ГПа.

Благодарности. Авторы благодарят А. Гаврилюка и Л. Дубровинского за стимулирующие дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-12-00022).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. F. Mott, *Metal–Insulator Transitions, 2nd ed.*, Taylor and Francis, London (1990).

2. I. G. Austin and N. F. Mott, Science **168**, 71 (1970).

3. R. E. Cohen, I. I. Mazin, and D. G. Isaak, Science **275**, 654 (1997).

4. J. Kunes, A. V. Lukoyanov, V. I. Anisimov, R. T. Scalettar, and W. E. Pickett, Nat. Mater. **7**, 198 (2008).

5. J.-P. Rueff, A. Mattila, J. Badro, G. Vanko, and A. Shukla, J. Phys.: Condens. Matter **17**, S717 (2005).

6. C. S. Yoo, B. Maddox, J. H. P. Klepeis, V. Iota, W. Evans, A. McMahan, M. Y. Hu, P. Chow, M. Somayazulu, D. Hausermann, R. T. Scalettar, and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett. **94**, 115502 (2005).

7. Q. Guo, H. K. Mao, J. Hu, J. Shu, and R. J. Hemley, J. Phys. Condens. Matter. **14**, 11369 (2002).

8. T. Atou, M. Kawasaki, and S. Nakajima, Jpn. J. Appl. Phys. **43**, 10A, L1281 (2004).

9. T. Eto, S. Endo, M. Imai, Y. Katayama, and T. Kikegawa, Phys. Rev. B **61**, 14984 (2000).

10. V. Potapkin, L. Dubrovinsky, I. Sergueev, M. Ekholm, I. Kantor, D. Bessas, E. Bykova, V. Prakapenka, R. P. Hermann, R. Ruffer, V. Cerantola, H. J. M. Jonsson, W. Olovsson, S. Mankovsky, H. Ebert, and I. A. Abrikosov, Phys. Rev. B **93**, 201110(R) (2016).

11. A. G. Gavriliuk, I. A. Trojan, and V. V. Struzhkin, Phys. Rev. Lett. **109**, 086402 (2012).

12. W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. **61**, 433 (1989).

13. T. C. Leung, C. T. Chan, and B. N. Harmon, Phys. Rev. B **44**, 2923 (1991).

14. A. Fujimori, F. Minami, and S. Sugano, Phys. Rev. B **29**, 5225 (1984).

15. G. VanderLaan, C. Westra, C. Haas, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **23**, 4369 (1981).

16. G. A. Sawatzky, and J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **53**, 2339 (1984).

17. J. Zaanen, G. A. Sawatzky, and J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **55**, 418 (1985).

18. C.-Y. Kuo, T. Haupricht, J. Weinen, Hua Wu, K.-D. Tsuei, M. W. Haverkort, A. Tanaka, and L. H. Tjeng, Eur. Phys. J. Special Topics **226**, 2445 (2017).

19. N. Bulut, D. J. Scalapino, and S. R. White, Phys. Rev. B **50**, 7215 (1994).

20. R. Preuss, W. Hanke, and W. von der Linden, Phys. Rev. Lett. **75**, 1344 (1995).

21. R. Preuss, W. Hanke, C. Grober, and H. G. Evertz, Phys. Rev. Lett. **79**, 1122 (1997).

22. C. Grober, R. Eder, and W. Hanke, Phys. Rev. B **62**, 4336 (2000).

23. B. Moritz, F. Schmitt, W. Meevasana, S. Johnston, E. M. Motoyama, M. Greven, D. H. Lu, C. Kim, R. T. Scalettar, Z.-X. Shen, and T. P. Devereaux, New J. Phys. **11**, 093020 (2009).

24. D. Senechal, D. Perez, and M. Pioro-Ladriere, Phys. Rev. Lett. **84**, 522 (2000).

25. D. Senechal, D. Perez, and D. Plouffe, Phys. Rev. B **66**, 075129 (2002).

26. M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. **91**, 206402 (2003).

27. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

28. M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, and H. R. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **61**, 12739 (2000).

29. T. A. Maier, M. Jarrell, T. Prushke, and M. Hettler, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).

30. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).

31. Н. М. Плакида, В. С. Удовенко, ЖЭТФ **131**, 259 (2007).

32. A. Avella and F. Mancini, Phys. Rev. B **75**, 134518 (2007).

33. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).

34. A. Sherman, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 195601 (2018).

35. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held, Rev. Mod. Phys. **90**, 025003 (2018).

36. V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, J. Phys. Condens. Matter **9**, 7359 (1997).

37. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **57**, 6884 (1998).

38. K. Held, I. A. Nekrasov, N. Blumer, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2611 (2001).

39. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).

40. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **58**, R7475 (1998).

41. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Palsson, and G. Biroli, Phys. Rev. Lett. **87**, 186401 (2001).

42. M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **32**, 249 (2003).

43. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, Physica C **161**, 607 (1989).

44. J. C. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **285**, 542 (1965).

45. М. М. Коршунов, В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, З. В. Пчелкина, И. А. Некрасов, М. А. Коротин, В. И. Анисимов, ЖЭТФ **126**, 642 (2004).

46. M. M. Korshunov, S. G. Ovchinnikov, E. I. Shneyder, V. A. Gavrichkov, Yu. S. Orlov, I. A. Nekrasov, and Z. V. Pchelkina, Mod. Phys. Lett. B **26**, 1230016 (2012).

47. С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **134**, 172 (2008).

48. I. S. Lyubutin, S. G. Ovchinnikov, A. G. Gavriliuk, and V. V. Struzhkin, Phys. Rev. B **79**, 085125 (2009).

49. В. А. Гавричков, Ю. С. Орлов, Т. М. Овчинникова, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **112**, 258 (2020).

50. А. Г. Гаврилюк, И. А. Троян, И. С. Любутин, В. А. Сидоров, ЖЭТФ **119**, 799 (2001).

51. M. J. Massey, N. H. Chen, J. W. Allen, and R. Merlin, Phys. Rev. B **42**, 8776 (1990).

52. H. Lehmann, Nuovo Cimento **11**, 342 (1954).

53. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).

54. S. Ovchinnikov and V. Val'kov, *Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons*, Imperial College Press, London (2004).

55. С. Г. Овчинников, УФН **167**, 1043 (1997).

56. Y. Tanabe and S. Sugano, J. Phys. Soc. Jpn. **9**, 753 (1954).

57. А. Г. Гаврилюк, И. А. Троян, С. Г. Овчинников, И. С. Любутин, В. А. Саркисян, ЖЭТФ **126**, 650 (2004).

58. С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **143**, 141 (2013).

59. D. R. Stephens and H. G. Drickamer, J. Chem. Phys. **34**, 937 (1961).

60. D. Reinen, Ber. Bunsenges Phys. Chem. **69**, 82 (1965).

61. P. W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).

62. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **101**, 094409 (2020).

63. W. A. Harrison, *Elementary Electronic Structure*, World Scientific, Singapore (1999).

64. L. Liu, X. D. Li, J. Liu, S. Jiang, Y. C. Li, G. Y. Shen, H. K. Mao, Y. Bi, and J. Xu, J. Appl. Phys. **104**, 113521 (2008).

65. E. Huang, High Press. Res. **13**, 307 (1995).

66. S. Hufner, J. Osterwalder, T. Riesterer, and F. Hulliger, Solid State Commun. **52**, 793 (1984).

67. E. Z. Kurmaev, R. G. Wilks, A. Moewes, L. D. Finkelstein, S. N. Shamin, and J. Kunes, Phys. Rev. B **77**, 165127 (2008).

68. B. Brandow, Adv. Phys. **26**, 651 (1977).

69. Z.-X. Shen, R. S. List, D. S. Dessau, B. O. Wells, O. Jepsen, A. J. Arko, R. Barttlet, C. K. Shih, F. Parmigiani, J. C. Huang, and P. A. P. Lindberg, Phys. Rev. B **44**, 3604 (1991).

70. J. Kunes, V. I. Anisimov, S. L. Skornyakov, A. V. Lukoyanov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **99**, 156404 (2007).

71. M. R. Norman and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **33**, 8896 (1986).

72. D. D. Sarma, J. Solid State Chemistry **88**, 45 (1990).

73. G. J. M. Janssen and W. C. Nieuwpoort, Phys. Rev. B **38**, 3449 (1988).

74. Z.-X. Shen, C. K. Shih, O. Jepsen, W. E. Spicer, I. Lindau, and J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **64**, 2442 (1990).

75. V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czyzyk, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **48**, 16929 (1993).

76. V. I. Anisimov, P. Kuiper, and J. Nordgren, Phys. Rev. B **50**, 8257 (1994).

77. O. Bengone, M. Alouani, P. Blochl, and J. Hugel, Phys. Rev. B **62**, 16392 (2000).

78. X. Ren, I. Leonov, G. Keller, M. Kollar, I. Nekrasov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. B **74**, 195114 (2006).

79. C. Rodl, F. Fuchs, J. Furthmuller, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **79**, 235114 (2009).

80. H. Jiang, R. I. Gomez-Abal, P. Rinke, and M. Scheffler, Phys. Rev. B **82**, 045108 (2010).

81. P. Thunstrom, I. Di Marco, and O. Eriksson, Phys. Rev. Lett. **109**, 186401 (2012).

82. S. Das, J. E. Coulter, and E. Manousakis, Phys. Rev. B **91**, 115105 (2015).

83. S. K. Panda, H. Jiang, and S. Biermann, Phys. Rev. B **96**, 045137 (2017).

84. X.-B. Feng and N. M. Harrison, Phys. Rev. B **69**, 035114 (2004).

85. D. E. Eastman and J. L. Freeouf, Phys. Rev. Lett. **34**, 395 (1975).

86. S. J. Oh, J. W. Allen, I. Lindau, and J. C. Mikkelsen, Phys. Rev. B **26**, 4845 (1982).

87. G. van der Laan, J. Zaanen, G. A. Sawatzky, R. Karnatak, and J.-M. Esteva, Phys. Rev. B **33**, 4253 (1986).

88. O. Tjernberg, S. Soderholm, U. O. Karlsson, G. Chiaia, M. Qvarford, H. Nylen, and I. Lindau, Phys. Rev. B **53**, 10372 (1996).

89. M. Taguchi, M. Matsunami, Y. Ishida, R. Eguchi, A. Chainani, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin, Phys. Rev. Lett. **100**, 206401 (2008).

90. J. Weinen, T. Koethe, C. Chang, S. Agrestini, D. Kasinathan, Y. Liao, H. Fujiwara, C. Schubler-Langeheine, F. Strigari, T. Haupricht, G. Panaccione, F. Offi, G. Monaco, S. Huotari, K.-D. Tsuei, and L. Tjeng, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena **198**, 6 (2015).

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:

а) 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 LaTeX 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 ps 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_{opt}, а не $P_{\mathrm{опт}}$. 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:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.

2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).

3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).

4. 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.

5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.

6. 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).

9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/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