

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 162, ВЫПУСК 2 (8)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

АВГУСТ 2022

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Ядерная резонансная дифракция синхротронного излучения: игра сочетаний анизотропии поляризуемости ядер и асимметрии дифракционной геометрии	Смирнов Г. В.	165
The Casimir effect in Bose–Einstein condensate mixtures confined by a parallel plate geometry in the improved Hartree–Fock approximation	Thu Nguyen Van	177
О генерации четных гармоник ондуляторного излучения пучками релятивистских электронов	Федоров И. А., Жуковский К. В.	181
Рассеяние света одномерным поглощающим слоем с непрерывным показателем преломления между двумя диэлектриками	Ванюшкин Н. А., Геворгян А. А., Голик С. С.	198
Аналитическая оценка потенциалов ионизации многозарядных ионов элементов от аргона до ксенона	Шпатаковская Г. В.	205
Статистические свойства псевдотеплового излучения, формируемого пространственным модулятором света	Агапов Д. П., Беловолов И. А., Гостев П. П., Магницкий С. А., Фроловцев Д. Н., Чиркин А. С.	215

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Квантовое теоретико-полевое описание осцилляций нейтрино в магнитном поле и проблема солнечных нейтрино	Егоров В. О., Волобуев И. П.	226
Отношение выходов антиядер и ядер в столкновениях релятивистских ядер в центральной области быстрой	Малахов А. И., Зайцев А. А.	240

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Кинетика рекомбинации экситонов и трионов в свободностоящих квантовых точках CdS, синтезированных с помощью метода Ленгмюра–Блоджетт Свит К. А., Зарубанов А. А., Журавлев К. С. 247

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

- Диодный эффект в сверхпроводящей гибридной полоске Cu/MoN с боковым разрезом Уставщиков С. С., Левичев М. Ю., Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С., Гусев С. А., Водолазов Д. Ю. 261

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА,
ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ**

- Расчет параметров лавины релятивистских убегających электронов методом групповых уравнений для моментов функции распределения электронов Бочков Е. И. 267

ОБЗОРЫ

- Хаотические траектории на поверхностях Ферми и нетривиальные режимы поведения магнитной проводимости Дынников И. А., Мальцев А. Я., Новиков С. П. 276

ЯДЕРНАЯ РЕЗОНАНСНАЯ ДИФРАКЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ: ИГРА СОЧЕТАНИЙ АНИЗОТРОПИИ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ ЯДЕР И АСИММЕТРИИ ДИФРАКЦИОННОЙ ГЕОМЕТРИИ

Г. В. Смирнов*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 января 2022 г.,
после переработки 18 марта 2022 г.
Принята к публикации 6 апреля 2022 г.

Рассматриваются возможности дальнейшего развития источников синхротронного мёссбауэровского излучения (СМИ), физические принципы и характеристики которых описаны в работах [1–3]. Чисто ядерная дифракция синхротронного излучения в резонансной ядерной матрице, в данном случае в кристалле бората железа, $^{57}\text{FeBO}_3$, является физической основой для генерации СМИ. При когерентной флюоресценции ядер, возбужденных синхротронным излучением, формируется остро направленный пучок поляризованного резонансного гамма-излучения, которое находит применение в уникальных областях мёссбауэровской спектроскопии. В настоящей работе проведено численное моделирование процессов чисто ядерной дифракции гамма-излучения в кристалле бората железа около точки Нееля, вблизи которой реализуется сильная анизотропия ядерной поляризуемости кристалла. Полученные результаты моделирования раскрыли возможности существенно поднять (при данных характеристиках ускорительных центров) интенсивность источников СМИ за счет использования асимметричных условий дифракции Брэгга и подходящей поляризации излучения возбуждающего ядра. Результаты работы могут служить развитию спектроскопии высокого разрешения на синхротронных источниках.

DOI: 10.31857/S0044451022080016
EDN: EFIQWW

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1997 году на синхротронном источнике ESRF была показана возможность генерации непрерывного когерентного мёссбауэровского излучения ядер ^{57}Fe с энергией $E = 14.41$ кэВ [1]. Физическая основа и принципы генерации излучения изложены в работах [2, 3]. В первом эксперименте интенсивность когерентного гамма-излучения была невелика и составляла всего 100 квантов/с. В дальнейшем в ускорительных центрах Spring8 и ESRF [424] интенсивность была доведена до уровня 10^4 – $3 \cdot 10^4$ квантов/с, главным образом, за счет увеличения интенсивности синхротронного излучения возбуждающего ядра. Уникальные свойства генерируемого гамма-излучения: отсутствие в спектре излучения нерезонансной компоненты, высокая направ-

ленность пучка $\Delta\theta = 10$ – 20 мкрад, малое сечение пучка 10 мкм и высокая степень поляризации излучения около 100 % — нашли успешное применение в мёссбауэровской спектроскопии при экстремальных условиях, в которых традиционные источники оказываются непригодными или малоэффективными [5–16].

В основе генерации СМИ лежит возможность реализации чисто ядерной дифракции гамма-лучей в кристаллах с антиферромагнитным упорядочением локальных магнитных полей, впервые обнаруженная в 1969 году [17]. В первом эксперименте использовался антиферромагнитный кристалл гематита Fe_2O_3 . Однако в дальнейшем предпочтение было отдано кристаллу бората железа FeBO_3 , имеющему целый ряд преимуществ перед гематитом для исследования чисто ядерной дифракции [18]. Отраженное гамма-излучение при чисто ядерной дифракции оказывается полностью безотдачным. Однако в силу сверхтонкого расщепления ядерных

* E-mail: g.smirnov@gmx.net

уровней в кристалле спектр резонансного излучения содержит несколько частотных компонент. Последнее обстоятельство практически закрывает возможность использования подобного излучения для целей мёссбауэровской спектроскопии. Но, как показали дальнейшие исследования, уникальные природные свойства чисто ядерной дифракции в кристалле бората железа FeBO_3 позволяют получить при температуре вблизи точки Нееля резонансное гамма-излучение, в спектре которого содержится только одна линия [19, 20]. Раскрытые возможности и были в дальнейшем успешно использованы для генерации стационарного резонансного гамма-излучения на синхротронных источниках.

В недавно опубликованной работе [21] было показано, что в условиях сверхтонкого взаимодействия ядра ^{57}Fe с внутрикристаллическими полями в борате железа большую роль в когерентном рассеянии гамма-лучей может играть интерференция волн излучения в спиновом пространстве. В частности, при определенных условиях эта разновидность интерференции приводит к сильной анизотропии рассеяния уже на одиночном ядре в зависимости от направления на нем магнитного поля. В настоящей работе анализируется роль интерференции в спиновом пространстве при чисто ядерной дифракции гамма-лучей в кристалле бората железа. Исследуется анизотропия ядерной восприимчивости для разных поляризаций падающего излучения. В модельных экспериментах изучаются угловые и энергетические зависимости отражательной способности кристалла в окрестности брэгговского угла при разной асимметрии дифракционной геометрии.

В проведенных исследованиях преследуется цель найти физические условия чисто ядерной дифракции, в которых можно было бы получить максимально возможную интенсивность когерентной флюоресценции ядер ^{57}Fe при данной интенсивности возбуждающего синхротронного излучения.

2. ОСОБЕННОСТИ ЧИСТО ЯДЕРНОЙ ДИФРАКЦИИ В КРИСТАЛЛЕ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

После импульсного возбуждения долгоживущего изомерного состояния ядер ^{57}Fe синхротронным пучком наблюдается задержанное свечение ядерной мишени с испусканием флюоресцентного гамма-излучения. В общем случае флюоресцентное гамма-излучение распространяется в телесном угле 4π . Но при выполнении условий Брэгга для падающего пучка возникает так называемая когерентная ядер-

ная резонансная флюоресценция, при которой гамма-кванты испускаются только в определенных направлениях [16, 22, 23]. При чисто ядерной дифракции кристалл светится, испуская в избранных направлениях кванты с энергией 14.41 кэВ на протяжении всего времени, пока возбужденное состояние ядер подпитывается синхротронными импульсами. Испускаемое ядрами когерентное гамма-излучение мы называем синхротронным мёссбауэровским излучением (СМИ) [1–3, 24]. СМИ обладает уникальными свойствами: оно полностью безотрадное, остро направленное и поляризованное.

Существенной особенностью возбужденных ядерных состояний в кристалле бората железа является то обстоятельство, что они оказываются смешанными по проекции спина. Такое положение объясняется сверхтонким взаимодействием ядра ^{57}Fe с внутрикристаллическими полями в этом кристалле. Наряду с локальным магнитным полем на ядро действует электрическое поле, градиент которого ортогонален магнитному. Комбинированное взаимодействие ядра с внутрикристаллическими полями приводит к тому, что энергетический уровень, отвечающий возбужденному состоянию, расщепляется на четыре подуровня, причем на каждом из них состояние ядра оказывается суперпозицией двух состояний с разными проекциями спина ядра на ось квантования, ориентированную по локальному магнитному полю [2, 3]. Как было показано в работе [21], перечисленные особенности играют существенную роль в формировании спектра флюоресцентного гамма-излучения.

При большом сверхтонком расщеплении ядерных уровней, которое наблюдается при комнатной температуре, спектр излучения содержит четыре далеко отстоящие друг от друга линии. Очевидно, это обстоятельство делает флюоресцентное гамма-излучение крайне неудобным для спектроскопических исследований. К счастью природа дает выход из этого положения. Такая возможность опять же связана с уникальными свойствами кристалла бората железа. Если кристалл нагреть выше температуры магнитного фазового перехода — точки Нееля, $T_N \sim 75.3^\circ$, то когерентная ядерная флюоресценция исчезает в силу деструктивной интерференции рассеянных ядрами волн. Однако после приложения к кристаллу небольшого магнитного поля, порядка 10–100 Э, магнитное сверхтонкое поле восстанавливается, а вместе с ним возобновляется и когерентная ядерная флюоресценция [19, 20]. В этих условиях основной вклад в испускаемое излучение дают два ядерных перехода, которым в мёссбауэров-

ском спектре бората железа соответствуют третий и шестой резонансы [2, 3]. В частности, при восстановленном локальном магнитном поле 2 кЭ третья и шестая резонансные линии находятся на расстоянии не более ширины ядерного уровня, т. е. существенно перекрываются, образуя псевдоодиночный резонанс. В этих условиях спектр гамма-излучения имеет вид одиночной линии [19, 20], что полностью отвечает требованиям мессбауэровской спектроскопии.

При двухволновой дифракции в кристалле существуют два направления, в которых может распространяться излучение. Одно из них лежит близко к направлению падающей волны, а второе составляет с первым угол, равный $2\theta_B$, где θ_B — угол Брэгга. Обозначим эти направления цифрами 0 и 1. В достаточно толстом кристалле происходит многократное перерассеяние распространяющихся волн из одного направления в другое: $0 \rightarrow 0$, $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 0$, $1 \rightarrow 1$, реализуются условия динамической дифракции. При этом формируется самосогласованное состояние электромагнитного поля ядерного излучения и возбуждаемых этим полем ядерных токов.

В случае линейной поляризации падающего излучения особенностью чисто ядерной дифракции в кристалле бората железа является переход поляризованного излучения из одного состояния в другое в процессе отражении из направления 0 в направление 1. Падающая π -волна при возбуждении $M = \pm 1$ ядерных переходов превращается в отраженную σ -волну и наоборот. Эта особенность обусловлена антиферромагнитным упорядочением магнитных полей на ядрах железа в элементарной ячейке кристалла. Поворот плоскости поляризации происходит потому, что спины двух ядер, входящих в элементарную ячейку кристалла, оказываются противоположно ориентированными [2]. По этой причине при соответствующей частоте падающего излучения в одном из ядер возбуждается переход $M = +1$, а в другом $M = -1$. Интерференция эллиптически право- и левополяризованных волн, испускаемых ядрами элементарной ячейки, дает линейно-поляризованную волну, поляризация которой ортогональна поляризации падающей.

3. ИГРА СОЧЕТАНИЙ АНИЗОТРОПИИ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ЯДЕР И АСИММЕТРИИ ДИФРАКЦИОННОЙ ГЕОМЕТРИИ

Результатом упомянутого выше смешивания ядерных состояний и антипараллельного упоря-

дочения ядерных спинов оказывается сильное различие ядерной восприимчивости и, следовательно, амплитуд рассеяния поляризованного излучения в каналах $0 \rightarrow 0$ и $1 \rightarrow 1$, т. е. своеобразная анизотропия рассеяния. Возникает вопрос, может ли упомянутая анизотропия сказываться на отражательной способности кристалла. Остановимся на этом вопросе подробнее. Отражательная способность кристалла определяется следующим выражением [25]:

$$Q = |R|^2 \frac{1}{|\beta|}, \quad (1)$$

где R представляет коэффициент отражения, а β — фактор асимметрии отражения, $\beta = -\sin \theta_0 / \sin \theta_1$, где θ_0 — угол скольжения падающего на кристалл пучка, а θ_1 — угол скольжения отраженного пучка. Для кристалла полубесконечного по толщине коэффициент отражения имеет вид

$$R = -\frac{\beta \tilde{\eta}_{10}}{2\varepsilon_0^{(1)} - \tilde{\eta}_{00}}. \quad (2)$$

В последнее выражение входят параметры: $\tilde{\eta}_{00}$ и $\tilde{\eta}_{10}$ — элементы матрицы ядерной и электронной восприимчивостей кристалла, пропорциональные амплитуде рассеяния [2, 3], и $\varepsilon_0^{(1)}$ — малая комплексная добавка к рефракционному индексу, которая определяется следующим выражением:

$$\varepsilon_0^{(1)} = \frac{1}{4} \left\{ \tilde{\eta}_{00} + \beta \tilde{\eta}_{11} - \alpha \beta - \sqrt{(\tilde{\eta}_{00} - \beta \tilde{\eta}_{11} + \alpha \beta)^2 + 4\beta \tilde{\eta}_{01} \tilde{\eta}_{10}} \right\}, \quad (3)$$

куда помимо восприимчивостей кристалла входит угловой параметр α , прямо связанный с отклонением от угла Брэгга: $\theta - \theta_B$. Введем обозначение Z для знаменателя в уравнении (2) и запишем знаменатель с учетом уравнения (3):

$$Z = \frac{1}{2} \left\{ -\tilde{\eta}_{00} + \beta \tilde{\eta}_{11} - \alpha \beta - \sqrt{(\tilde{\eta}_{00} - \beta \tilde{\eta}_{11} + \alpha \beta)^2 + 4\beta \tilde{\eta}_{01} \tilde{\eta}_{10}} \right\}. \quad (4)$$

Поскольку при чисто ядерной дифракции электроны кристалла не участвуют в дифракционном процессе, мы выделим ядерную часть восприимчивости. Упомянутая выше анизотропия проявляется в том, что элементы матрицы ядерной восприимчивости η_{00} и η_{11} могут сильно различаться по величине (об этом пойдет речь ниже). При поле 2 кЭ

один элемент доминирует над другим. Так, для падающей π -поляризованной волны будет справедливо $|\eta_{00}^{\pi\pi}| \ll |\eta_{11}^{\sigma\sigma}|$, т.е. доминирует канал рассеяния $1 \rightarrow 1$, а для падающей σ -поляризованной волны будет справедливо $|\eta_{00}^{\sigma\sigma}| \gg |\eta_{11}^{\pi\pi}|$ и доминирует канал рассеяния $0 \rightarrow 0$. При этом $\eta_{00}^{\pi\pi} = \eta_{11}^{\pi\pi}$ и $\eta_{00}^{\sigma\sigma} = \eta_{11}^{\sigma\sigma}$ (заметим, что при поле на ядрах ^{57}Fe , имеющем место при комнатной температуре, справедливо $\eta_{00}^{\pi\pi} \approx \eta_{11}^{\sigma\sigma}$ и $\eta_{00}^{\sigma\sigma} \approx \eta_{11}^{\pi\pi}$, т.е. анизотропия рассеяния отсутствует). Пренебрегая малой величиной восприимчивости, получим приблизительно для знаменателя коэффициента отражения в случае падающей π -волны:

$$Z = \frac{1}{2} \left\{ \beta\eta_{11}^{\sigma\sigma} - \alpha\beta - \sqrt{(-\beta\eta_{11}^{\sigma\sigma} + \alpha\beta)^2 + 4\beta\eta_{01}^{\pi\sigma}\eta_{10}^{\sigma\pi}} \right\}, \quad (5)$$

и в случае падающей σ -волны:

$$Z = \frac{1}{2} \left\{ -\eta_{00}^{\sigma\sigma} - \alpha\beta - \sqrt{(\eta_{00}^{\sigma\sigma} + \alpha\beta)^2 + 4\beta\eta_{01}^{\sigma\pi}\eta_{10}^{\pi\sigma}} \right\}. \quad (6)$$

Легко увидеть, что в симметричной геометрии дифракции, когда $\beta = -1$, оба выражения идентичны и, следовательно, отражательная способность имеет одинаковую величину при всех углах для разных поляризаций падающей волны, независимо от анизотропии. В случае асимметричной геометрии, $\beta \neq -1$, это положение нарушается и Q уже зависит от того, какой является поляризация падающей волны, формулы (5), (6). В следующем разделе приведены результаты расчетов, которые подтверждают этот вывод.

3.1. Ландшафт интенсивности отражения

Сила дифракционного отражения гамма-лучей от ядерной решетки кристалла зависит не только от угла падения лучей в окрестности брэгговского угла, как в случае рентгеновских лучей, но и от энергии излучения по отношению к ядерному резонансу. Соответственно отражательная способность кристалла имеет вид поверхности сложной формы, возвышающейся над плоскостью на нулевом уровне в координатах угол–энергия. До последнего времени для получения синхротронного мессбауэровского излучения использовались отражения (111) и (333) в кристалле бората железа (отражения бората железа даны в ромбоэдрической системе координат). Плоскости (111) выходят на поверхность

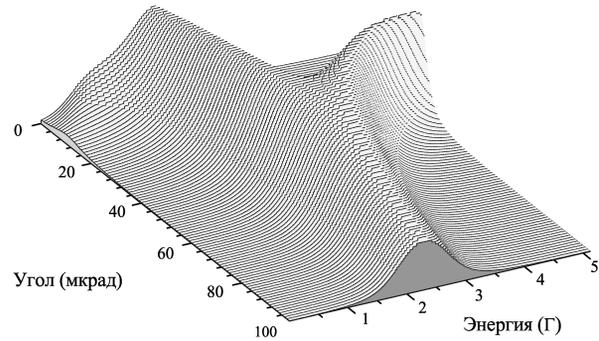


Рис. 1. Ландшафт отражательной способности Q кристалла $^{57}\text{FeVO}_3$ при поле на ядрах 2 кЭ для симметричного отражения (333) в окрестности брэгговского угла и в области ядерного резонанса. Энергетическая шкала охватывает область 5Г, где Г — естественная ширина ядерного уровня в первом возбужденном состоянии ядра ^{57}Fe . Угловая шкала охватывает интервал 100 мкрад

пластинчатого кристалла, поэтому упомянутые отражения относятся к симметричным. На рис. 1 показан ландшафт отражательной способности кристалла для отражения (333) в области ядерного резонанса вблизи температуры Нееля и в окрестности брэгговского угла. Начало отсчета на энергетической шкале соответствует положению резонанса без учета сверхтонкого взаимодействия. На угловой шкале оно соответствует положению брэгговского максимума без учета преломления излучения за счет его взаимодействия с электронами.

Ландшафт отражательной способности формируется в результате многопутевой интерференции гамма-излучения в каждом из открытых для его рассеяния пространств: геометрическом, энергетическом и спиновом [3, 21]. Поверхность отражательной способности Q имеет достаточно сложную форму. Сечение поверхности при заданном угле падения лучей на кристалл представляет собой энергетическую зависимость силы отражения в области ядерного резонанса при данном угле падения. Например, при угле падения 100 мкрад сечение имеет форму одиночного максимума (на рис. 1 срез оранжевого цвета).

Поскольку падающее излучение имеет конечную расходимость, необходимо интегрировать функцию отражения Q по углу с учетом углового распределения падающего излучения. В результате получим зависимость, которая характеризует энергетический спектр отраженного излучения:

$$\hat{Q}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx F(x, x_p) \cdot Q(x, E), \quad (7)$$

Таблица 1. Матрицы ядерной восприимчивости кристалла $^{57}\text{FeVO}_3$ для симметричного отражения (3 3 3)

Ядерный резонанс	1	3	4	6
330 кЭ $\beta = -1$, π -поляризованное излучение на входе				
Положение в ед. Г	-53.78	-9.45	7.50	55.73
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -22.41 & 22.58i \\ -22.58i & -22.74 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.81 & -7.50i \\ 7.50i & -8.25 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.89 & 7.50i \\ -7.50i & -8.17 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -22.50 & -22.59i \\ 22.59i & -22.67 \end{Bmatrix}$
2 кЭ $\beta = -1$, π -поляризованное излучение на входе				
Положение в ед. Г	-2.08	1.70	-1.84	2.22
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.85i \\ -0.85i & -22.59 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & 14.23i \\ -14.23i & -29.04 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.77i \\ -0.77i & -21.04 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & -15.85i \\ 15.85i & -29.04 \end{Bmatrix}$
$\beta = -0.25$, π -поляризованное излучение на входе				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.80i \\ -0.80i & -20.00 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & 13.39i \\ -13.39i & -25.71 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.72i \\ -0.72i & -18.63 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & -14.91i \\ 14.91i & -25.72 \end{Bmatrix}$
$\beta = -0.25$, σ -поляризованное излучение на входе				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\sigma\sigma} & \eta_{01}^{\sigma\pi} \\ \eta_{10}^{\pi\sigma} & \eta_{11}^{\pi\pi} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -24.06 & -0.88i \\ 0.88i & -0.03 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -30.92 & -14.68i \\ 14.68i & -6.97 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -22.40 & -0.79i \\ 0.79i & -0.03 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -30.93 & 16.35i \\ -16.35i & -8.65 \end{Bmatrix}$
$\beta = -4.0$, π -поляризованное излучение на входе				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.88i \\ -0.88i & -24.06 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & 14.68i \\ -14.68i & -30.92 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.79i \\ -0.79i & -22.40 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & -16.35i \\ 16.35i & -30.93 \end{Bmatrix}$
$\beta = -4.0$, σ -поляризованное излучение на входе				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\sigma\sigma} & \eta_{01}^{\sigma\pi} \\ \eta_{10}^{\pi\sigma} & \eta_{11}^{\pi\pi} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -20.01 & -0.80i \\ 0.80i & -0.03 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -25.71 & -13.39i \\ 13.39i & -6.97 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -18.63 & -0.72i \\ 0.72i & -0.03 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -25.72 & 14.91i \\ -14.91i & -8.65 \end{Bmatrix}$

здесь F представляет функцию углового распределения падающего пучка, $x = (\theta - \theta_B)$, x_p — фиксированное угловое положение центра распределения пучка. В случае распределения Гаусса она имеет вид

$$F(x, x_p) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x - x_p)^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (8)$$

где σ обозначает стандартное отклонение.

Угол падения синхротронного излучения возбуждающего ядра должен быть выбран, исходя из соображений получения оптимальных интенсивности и формы синхротронного мёссбауэровского излучения. Как показывает ландшафт отражательной способности кристалла, рис. 1, оптимальная угловая зона в симметричной геометрии находится в интервале от 60 до 100 мкрад. В данном интервале сечение поверхности имеет форму, близкую к одиночному резонансному максимуму.

3.2. Угловые зависимости отражений

Угловую зависимость отражательной силы кристалла получим путем интегрирования по энергии функции, представляющей собой сечение ландшафта при данном угле x . При этом будем учитывать тот факт, что интенсивность синхротронного излучения является константой в энергетическом интервале ядерного резонанса. И тогда для угловой функции отражения синхротронного излучения получим

$$\hat{Q}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE Q(x, E). \quad (9)$$

Угловая зависимость интенсивности генерируемого гамма-излучения пропорциональна $\hat{Q}(x)$. Чтобы проверить игру разных сочетаний анизотропии ядерной восприимчивости и асимметрии дифракции проведем расчеты отражательной способности кри-

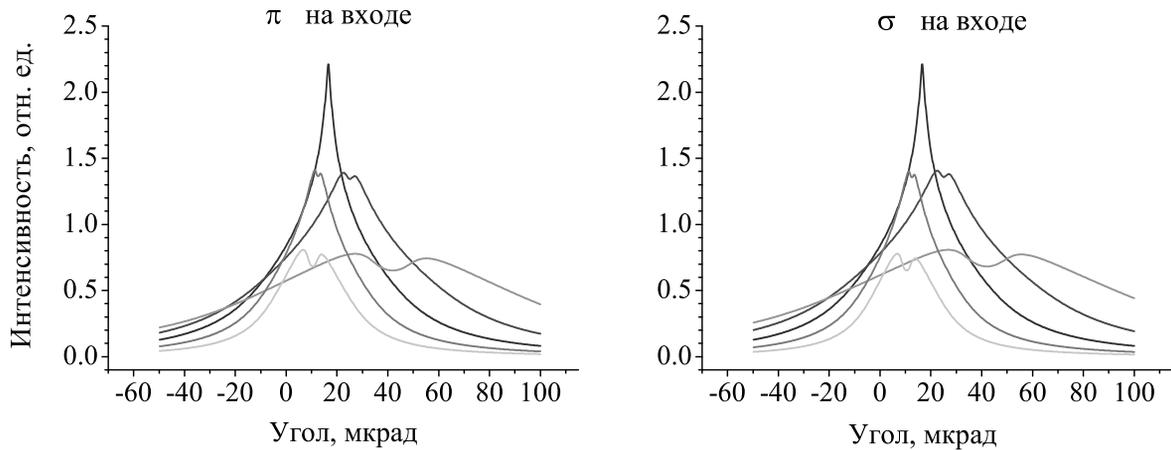


Рис. 2. Угловые зависимости интенсивности чисто ядерной дифракции синхротронного излучения от кристалла $^{57}\text{FeBO}_3$ в отражении (333) при локальном магнитном поле на ядрах 330 кЭ при комнатной температуре и различных факторах асимметрии. По горизонтальной оси отложен угол отклонения от брэгговского положения кристалла. Интеграл по энергии взят в окрестности шестого резонанса. Правая и левая панели показывают зависимости соответственно для π - и σ -поляризации падающего излучения. Симметричному случаю дифракции, $b = -1$, соответствуют кривые фиолетового цвета, асимметричным случаям: $\beta = -0.5$ — кривые темно-голубого цвета, $\beta = -0.25$ — оранжевого, $\beta = -2.0$ — розового, $\beta = -4.0$ — голубого

сталла бората железа при чисто ядерной дифракции с использованием отражения (333). Будем предполагать, что плоскости (111) могут быть отклонены от поверхности кристалла на произвольный угол вокруг нормали к плоскости рассеяния так, чтобы можно было бы сравнить отражательную способность кристалла в геометрии скользящего падения, при которой угол скольжения падающего луча меньше угла скольжения отраженного луча с отражательной способностью в геометрии кругого падения, при которой соотношение скользящих углов обратное. В табл. 1 приведены результаты расчетов матриц ядерной восприимчивости для отражения (333) при разных температурах и факторах асимметрии для π - и σ -поляризованного падающего излучения (в табл. 1 и далее термину «излучение на входе» соответствует термин «падающее излучение»). Величины восприимчивости даны для резонансных значений энергии возбуждающего излучения.

Матрицы рассчитаны для четырех ядерных резонансов, которые разрешены при чисто ядерной дифракции в кристалле бората железа. Резонансы соответствуют 1, 3, 4 и 6 линиям в мёссбауэровском спектре ядра ^{57}Fe при магнитном расщеплении ядерных уровней. Поскольку локальные магнитные поля на двух ядрах в элементарной ячейке кристалла антипараллельны, то этим резонансам

на разных ядрах соответствуют переходы, в которых магнитное квантовое число излучения имеет противоположные знаки. Прежде всего рассмотрим ситуацию, в которой анизотропия рассеяния отсутствует. Такая ситуация реализуется при комнатной температуре. Поле на ядрах при этой температуре равно приблизительно 330 кЭ. За счет сверхтонкого расщепления ядерных уровней энергии при таком большом поле ядерные резонансы хорошо разделены, минимальное расстояние между ними составляет 17Г. При этом для всех резонансов матричные элементы восприимчивости $\eta_{00}^{\pi\pi} \approx \eta_{11}^{\sigma\sigma}$, $\eta_{00}^{\sigma\sigma} \approx \eta_{11}^{\pi\pi}$ (близкие соотношения при поле 330 кЭ сохраняются и в асимметричной геометрии дифракции). На рис. 2 сравниваются угловые зависимости интенсивности отражения для 6-го ядерного резонанса. Интегрирование по энергии проведено в окрестности этого резонанса в интервале $55.73\text{Г} \pm 1.5\text{Г}$. Сравняются угловые зависимости в симметричной и асимметричной геометриях при скользящем падении $|\beta| < 1$ и при крутом падении $|\beta| > 1$. Как видно, при скользящем падении с ростом асимметрии угловая зависимость значительно уширяется и смещается в сторону больших углов. Напротив, с ростом асимметрии при крутом падении зависимость сужается и смещается в сторону меньших углов. И, что важно отметить, в отсутствие анизотропии рассеяния при комнатной температуре максимальная

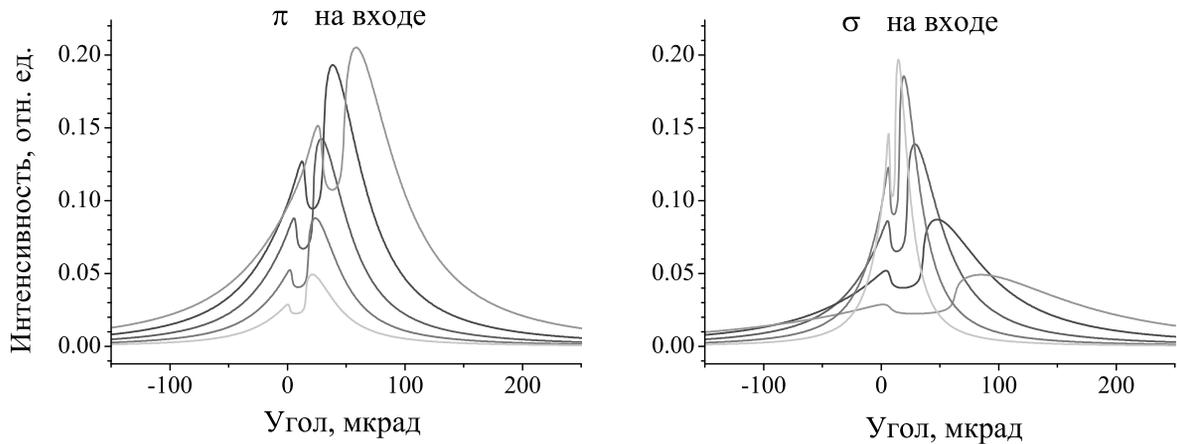


Рис. 3. Угловые зависимости интенсивности чисто ядерной дифракции синхротронного излучения от кристалла $^{57}\text{FeVO}_3$ в отражении (333) при локальном магнитном поле на ядрах 2 кЭ вблизи температуры Нееля и различных факторах асимметрии. По горизонтальной оси отложен угол отклонения от брэгговского положения кристалла. Интеграл по энергии взят в резонансной области от -7Г до 10Г . Симметричному случаю дифракции, $\beta = -1$, соответствуют кривые фиолетового цвета, асимметричным случаям: $\beta = -0.5$ — кривые темно-голубого цвета, $\beta = -0.25$ — оранжевого, $\beta = -2.0$ — розового, $\beta = -4.0$ — голубого

интенсивность отражения симметрично уменьшается с отходом от геометрии с $|\beta| = 1$.

Обратимся теперь к ситуации, в которой становится существенной анизотропия рассеяния. Такая ситуация реализуется в окрестности точки Нееля, где магнитное и электрическое квадрупольное расщепления ядерных уровней в борате железа становятся сравнимыми по величине. Матрицы восприимчивости для этих условий представлены в табл. 1 (напряженность магнитного поля на ядрах принята равной 2 кЭ вблизи температуры Нееля). Как следует из таблицы, в рассматриваемых условиях матрицы ядерной восприимчивости, а следовательно, и амплитуды рассеяния для π - и σ -поляризаций падающего излучения показывают существенную анизотропию в направлениях рассеяния $0 \rightarrow 0$ и $1 \rightarrow 1$. Основной вклад в картину дифракции дают 3-й и 6-й резонансы (отмеченные жирным шрифтом). Они находятся друг от друга на расстоянии всего 0.5Г . Матричные элементы для каналов рассеяния 00 и 11 соотносятся следующим образом:

$$\eta_{00}^{\pi\pi} / \eta_{11}^{\sigma\sigma} \approx 0.25$$

и

$$\eta_{00}^{\sigma\sigma} / \eta_{11}^{\pi\pi} \approx 4.$$

соответственно для скользящего $\beta = 0.25$ и для крутого $\beta = 4.0$ падения лучей на кристалл. Таким образом, имеет место сильная анизотропия рассеяния

по направлениям $0 \rightarrow 0$ и $1 \rightarrow 1$ для π - и σ -поляризаций излучения. На рис. 3 показаны угловые зависимости интенсивности отражения для разных факторов асимметрии и разных поляризаций падающего излучения при поле 2 кЭ.

При отходе в сторону скользящего падения лучей на кристалл угловые кривые по-прежнему уширяются и сдвигаются в сторону положительных угловых смещений, а при отходе в сторону крутого падения сужаются и сдвигаются в сторону отрицательных угловых смещений. Однако в отличие от случая рассеяния при комнатной температуре, где анизотропия ядерной восприимчивости отсутствует, теперь наблюдается сильная асимметрия в максимальной интенсивности отражения при скользящем и крутом падении излучения. Причем асимметрия в интенсивности имеет разную направленность для π - и σ -поляризации падающего излучения. Для π -поляризованного излучения отражательная способность растет при смещении в сторону скользящего падения и снижается в сторону крутого. Для σ -поляризованного излучения отражательная способность, напротив, снижается при смещении в сторону скользящего падения и растет в сторону крутого. Если говорить о выигрыше в интенсивности излучения, то в случае π -поляризации предпочтительным оказывается скользящее падение, а в случае σ -поляризации крутое падение лучей, однако при

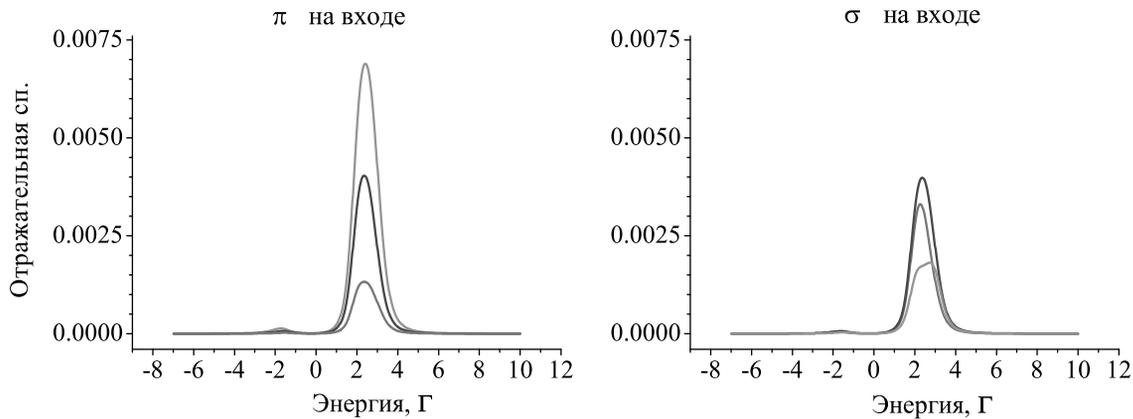


Рис. 4. Спектры гамма-излучения, испускаемого кристаллом $^{57}\text{FeVO}_3$ при возбуждении ядер железа синхротронным излучением, падающего на кристалл в окрестности брэгговского отражения (333) на правых склонах угловых кривых. Локальное магнитное поле на ядрах равно 2 кЭ. Спектры в симметричной геометрии дифракции $\beta = -1.0$ отображены линиями темно-голубого цвета, при скольльзящем падении $\beta = -0.25$ — линиями оранжевого цвета и при крутом падении $\beta = -4.0$ — линиями розового цвета

этом важно отметить, что угловая область сильного отражения для первой существенно расширяется, а для второй заметно сужается.

3.3. Энергетические зависимости отражений

Рассмотрим энергетические зависимости отражательной способности кристалла в окрестности температуры Нееля в предпочтительной угловой области, там где формируется одиночный резонанс. Выше отмечалось, что эта область лежит в стороне положительных отклонений от брэгговского угла, рис. 1. Этой области соответствуют правые склоны угловых кривых на рис. 3. Как видно на рисунке, с точки зрения выигрыша интенсивности, нас должны интересовать угловые кривые, полученные для π -поляризованного падающего излучения при факторе асимметрии $\beta < 1$, а для σ -поляризованного падающего излучения при факторе асимметрии $\beta > 1$. Рисунок 4 дает возможность сравнить энергетические зависимости отражательной силы кристалла в симметричной и асимметричной геометриях для разных поляризаций падающего излучения. Очевидно спектры флюоресцентного гамма-излучения кристалла $^{57}\text{FeVO}_3$ имеют аналогичную форму.

Для описания углового распределения падающего излучения принята функция Гаусса шириной на полувысоте 25 мкрад. Центр распределения, или угол падения падающего излучения варьировался во всем интервале углов на правом склоне кривых.

Подбирался оптимальный для каждой поляризации падающего излучения и каждого фактора асимметрии угол, при котором спектр испускаемого излучения имел вид одиночного пика с шириной на полувысоте 1.25Г.

Для сравнения спектров в асимметричной геометрии были выбраны случаи скольльзящего падения с фактором асимметрии $\beta = -0.25$ и крутого падения с $\beta = -4.0$ (соответствующие матрицы ядерной восприимчивости представлены в табл. 1). В симметричной геометрии, $|\beta| = 1$, угол падения составил 80 мкрад для каждой из поляризаций падающего излучения; в асимметричной геометрии при $|\beta| = 0.25$ углы падения были 110 мкрад и 260 мкрад соответственно для π - и для σ -поляризованного излучения, при $|\beta| = 4$ углы падения были 60 мкрад и 45 мкрад соответственно для π - и σ -поляризованного излучения.

Как видно на рис. 4, при выбранных условиях в спектрах гамма-излучения доминирует одиночная резонансная линия. В симметричной геометрии энергетические распределения испускаемых гамма-лучей для разных поляризаций падающего излучения очень схожи между собой (кривые темно-голубого цвета). На рисунке видно также, что комбинация скольльзящей геометрии и π -поляризованного синхротронного излучения имеет существенные преимущества с точки зрения интенсивности испускаемых возбужденными ядрами гамма-лу-

Таблица 2. Матрицы ядерной восприимчивости кристалла $^{57}\text{FeBO}_3$ для асимметричных отражений (445), (566) и (3311)

Ядерные резонансы	1	3	4	6
Падающее π -поляризованное излучение, 2 кЭ				
Положение в ед. Г	-2.08	1.70	-1.84	2.22
Рефлекс (3311), $\beta = -0.731$				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & -0.72i \\ 0.72i & -16.10 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & -12.01i \\ 12.01i & -20.69 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & -0.65i \\ 0.65i & -14.99 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & 13.38i \\ -13.38i & -20.70 \end{Bmatrix}$
Рефлекс (445), $\beta = -0.221$				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.68i \\ -0.68i & -14.62 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & 11.45i \\ -11.45i & -18.79 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.62i \\ -0.62i & -13.62 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & -12.75i \\ 12.75i & -18.80 \end{Bmatrix}$
Рефлекс (566), $\beta = -0.477$				
$\begin{Bmatrix} \eta_{00}^{\pi\pi} & \eta_{01}^{\pi\sigma} \\ \eta_{10}^{\sigma\pi} & \eta_{11}^{\sigma\sigma} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.65i \\ -0.65i & -12.98 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -6.97 & 10.79i \\ -10.79i & -16.69 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -0.03 & 0.58i \\ -0.58i & -12.09 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -8.65 & -12.01i \\ 12.01i & -16.69 \end{Bmatrix}$

чей. В этом случае интенсивность излучения почти в два раза выше интенсивности излучения в симметричной геометрии. Геометрия крутого падения при любой поляризации уступает упомянутому выше случаю. Очевидно, что причиной таких результатов является анизотропия рассеяния в направлениях $0 \rightarrow 0$ и $1 \rightarrow 1$, которая, как было показано в работе [21], обусловлена интерференцией волн излучения в спиновом пространстве. Обнаруженные нами в гипотетической ситуации свойства чисто ядерной дифракции в кристалле бората железа стали мотивацией поисков оптимальных решений в реальных случаях. Изложенные выше особенности позволяют ожидать и в реальном кристалле заметного увеличения его отражательной силы при переходе к асимметричной геометрии дифракции.

3.4. Асимметричные отражения в реальном кристалле

До сих пор мы рассматривали искусственно смоделированные случаи асимметричных отражений. В реальности для генерации синхротронного мессбауэровского излучения используются пластинчатые кристаллы бората железа, у которых плоскости (111) лежат параллельно поверхности кристалла. Тем не менее в этих кристаллах можно найти ряд отклоненных от поверхности кристалла плоскостей, отвечающих требованиям чисто ядерной ди-

фракции. Брэгговские отражения от этих плоскостей должны иметь сумму индексов Миллера равную нечетному числу. Для выбора подходящих отражений был необходим соответствующий анализ. С этой целью был проведен расчет матриц ядерной восприимчивости кристалла для целого ряда асимметричных отражений в геометрии Брэгга. Из них мы выбрали те, которые имеют явное преимущество по интенсивности генерируемого гамма-излучения. В качестве первых кандидатов оказались отражения (3311), (445), (566). В табл. 2 представлены матричные элементы ядерной восприимчивости для этих асимметричных отражений в геометрии скользящего падения лучей, которая, как мы выяснили выше, является более выгодной для достижения поставленных целей. В сравнении с геометрией крутого падения она предоставляет существенно более широкую угловую зону для генерации гамма-излучения, обладающего однолинейным спектром. Кроме того выбор был сделан в пользу π -поляризации синхротронного излучения, которая также является предпочтительной в отношении интенсивности генерируемого гамма-излучения (см. рис. 4). На рис. 5 показаны угловые зависимости интенсивности отражений для представленных в табл. 2 рефлексов и π -поляризованного синхротронного излучения, возбуждающего ядра. Интенсивность в максимуме для всех изученных отражений оказалась приблизительно одинаковой. Но размер угловой области пра-

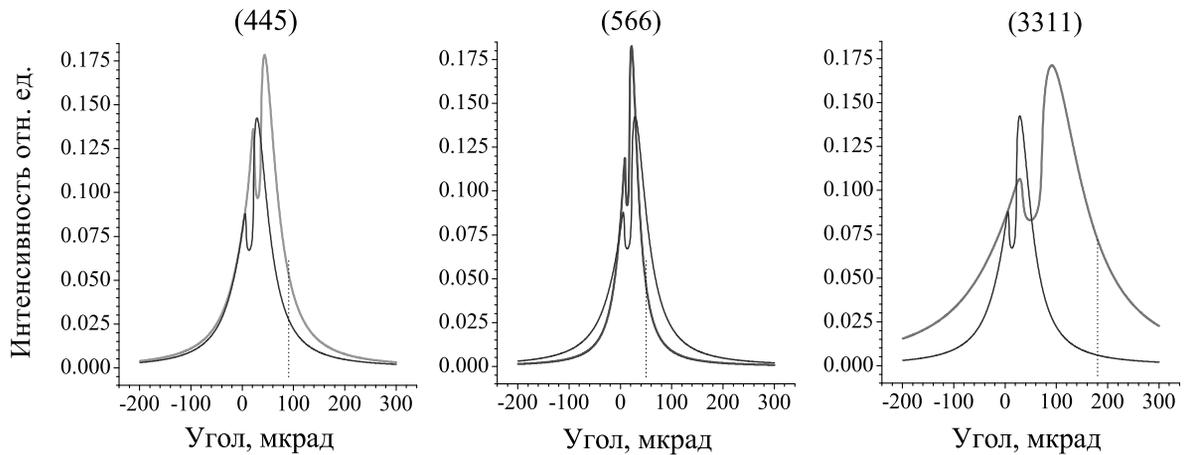


Рис. 5. Угловые зависимости интенсивности чисто ядерной дифракции π -поляризованного синхротронного излучения от кристалла $^{57}\text{FeBO}_3$ в асимметричных отражениях (445), (566), (3311) при локальном магнитном поле на ядрах 2 кЭ. Кривая фиолетового цвета показывает для сравнения угловую зависимость для симметричного отражения (333). По горизонтальной оси отложен угол отклонения от брэгговского положения кристалла. Интеграл по энергии взят во всей резонансной области от -7Γ до 10Γ . Вертикальные пунктирные линии указывают углы падения синхротронного излучения, выбранные для генерации ядерного резонансного гамма-излучения (спектры излучения показаны на рис. 6)

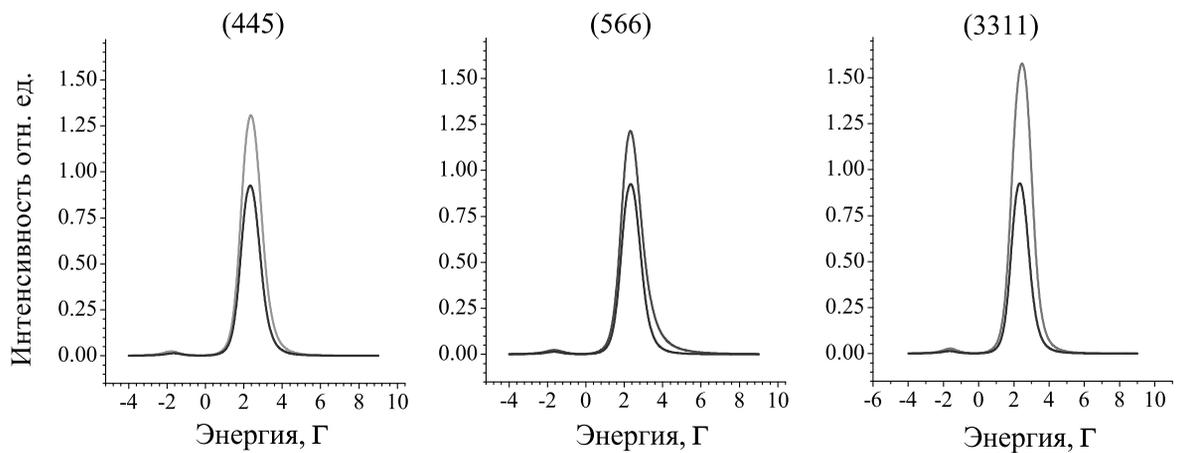


Рис. 6. Спектры гамма-излучения, испускаемого кристаллом $^{57}\text{FeBO}_3$ при возбуждении ядер железа синхротронным π -поляризованным излучением. Излучение падает на кристалл в окрестности брэгговских асимметричных отражений (445), (566), (3311) в геометрии скользящего падения. Угол падения фиксирован на правых склонах угловых кривых (см. рис. 5). Локальное магнитное поле на ядрах 2 кЭ. Спектры для отражения (333) в симметричной геометрии дифракции $\beta = -1.0$ отображены кривыми фиолетового цвета

вого склона кривых — того, на котором спектр генерируемого гамма-излучения содержит одиночную резонансную линию, заметно различается. Самый протяженный правый склон имеет отражение

(3311). Как известно, существенную роль в угловой протяженности брэгговского отражения играет лоренц-фактор, который из всех рассматриваемых случаев имеет максимальное значение для отраже-

ния (3 3 11), $1/\sin 2\theta_{3311} = 5.8$ [26]. Это обстоятельство дает дополнительные преимущества рассматриваемому отражению. Далее были выполнены расчеты спектров генерируемого гамма-излучения при разных значениях угла падения синхротронного излучения во всей угловой области правого склона.

При этом предполагалось, что угловая зависимость падающего излучения имеет форму гауссовой кривой шириной 25 мкрад. Спектры, полученные при разных углах падения, различались формой и имели разную ширину энергетического распределения. Для всех рассматриваемых отражений были выбраны такие углы падения, при которых спектры имели форму одиночного резонанса с шириной на полувысоте 1.25Г.

Полученные спектры показаны на рис. 6, где они сравниваются со спектром гамма-излучения, генерируемого при тех же требованиях к углу падения в симметричном отражении (3 3 3). Как следует из рисунка, во всех рассмотренных случаях асимметричных отражений интенсивность генерируемого гамма-излучения превышает ту, которая достигается в отражении (3 3 3). Углы падения отмечены на рис. 5 вертикальными пунктирными линиями. Наибольшее превышение, почти в 1.8 раза, достигается в отражении (3 3 11). Очевидно, кроме выявленного преимущества в силе отражения, оно дает возможность использовать более высокую расходимость падающего пучка при сохранении требуемого спектра гамма-излучения. Поэтому превосходство этого отражения может быть еще более значительным.

4. ВЫВОДЫ

В условиях сверхтонкого взаимодействия ядра ^{57}Fe с магнитным и электрическим полями в кристалле $^{57}\text{FeVO}_3$ вблизи температуры Нееля большую роль в когерентном рассеянии гамма-излучения играет интерференция в спиновом пространстве [21]. В частности, эта разновидность интерференции приводит к сильной анизотропии поляризуемости ядерной среды кристалла. В условиях анизотропии ядерной поляризуемости появляется своеобразная зависимость отражательной способности ядерной системы от выбора поляризации синхротронного излучения, возбуждающего ядра, и асимметрии геометрии брэгговской дифракции. В модельных расчетах найдены оптимальные, с точки зрения интенсивности и ширины спектральной линии, условия для генерации синхротронного мессбауэровского излучения. Показано, что наибольшие преимущества достигаются в асимметричном обрат-

ном отражении (3 3 11) от пластинчатого кристалла бората железа и π -поляризованном синхротронном излучении, возбуждающем ядра ^{57}Fe .

Благодарность. Автор выражает глубокую благодарность А. И. Чумакову за обсуждение статьи и полезные советы.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. V. Smirnov, U. van Buerck, A. I. Chumakov, A. Q. R. Baron, and R. Rueffer, *Phys. Rev. B* **55**, 5811 (1997).
2. G. V. Smirnov, *Hyperf. Inter.* **25**, 91 (2000).
3. G. V. Smirnov, A. I. Chumakov, V. B. Potapkin, R. Rueffer, and S. L. Popov, *Phys. Rev. A* **84**, 053851 (2011).
4. T. Mitsui, N. Hirao, Y. Ohishi, R. Masuda, Y. Nakamura, H. Enoki, K. Sakaki, and M. Seto, *J. Synchrotron Rad.* **16**, 723 (2009).
5. V. Potapkin, C. McCammon, K. Glazyrin, A. Kantor, I. Kupenko, C. Prescher, R. Sinmyo, G. V. Smirnov, A. I. Chumakov, R. Rueffer, and L. Dubrovinsky, *Nature Commun.* **4**, 1427 (2013).
6. M. A. Andreeva, R. A. Baulin, A. I. Chumakov, R. Rueffer, G. V. Smirnov, Y. A. Babanov, D. I. Devyaterikov, M. A. Milyaev, D. A. Ponomarev, L. N. Romashev, and V. V. Ustinov, *Phys. Rev. B* **97**, 024417 (2018).
7. J. A. Sans, V. Monteseguro, G. Garbarino, M. Gich, V. Cerantola, V. Cuartero, M. Monte, T. Irifune, A. Munoz, and C. Popescu, *Nature Commun.* **9**, 4554 (2018).
8. A. Cini, M. Mannini, F. Totti, M. Fittipaldi, G. Spina, A. Chumakov, R. Rueffer, A. Cornia, and R. Sessoli, *Nature Commun.* **9**, 480 (2018).
9. S. V. Ovsyannikov, M. Bykov, E. Bykova, K. Glazyrin, R. Sekhar Manna, A. A. Tsirlin, V. Cerantola, I. Kupenko, A. V. Kurnosov, I. Kantor, A. S. Pakhomova, I. Chuvashova, A. I. Chumakov, R. Rueffer, C. McCammon, and L. S. Dubrovinsky, *Nature Commun.* **9**, 4142 (2018).
10. I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, A. G. Gavriiliuk, I. A. Troyan, Yu. A. Nikiforova, A. G. Ivanova, A. I. Chumakov, and R. Rueffer, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 242405 (2018).
11. E. S. Kiseeva, D. M. Vasiukov, B. J. Wood, C. McCammon, T. Stachel, M. Bykov, E. Bykova, A. Chumakov, V. Cerantola, J. W. Harris, and L. Dubrovinsky, *Nature Geoscience* **11**, 144 (2018).

12. D. Andrault, M. Munoz, G. Pesce, V. Cerantola, A. Chumakov, I. Kantor, S. Pascarelli, R. Rueffer, and L. Hennet, *Geochem. Persp. Lett.* **6**, 5 (2018).
13. I. Kupenko, G. Aprilis, D. M. Vasiukov, C. McCammon, S. Chariton, V. Cerantola, I. Kantor, A. I. Chumakov, R. Rueffer, L. Dubrovinsky, and C. Sanchez-Valle, *Nature* **570**, 102 (2019).
14. Takaya Mitsui, Ko Mibu, Masaaki Tanaka, Shinji Kitao, Yasuhiro Kobayashi, Ryo Masuda, and Makoto Seto, *J. Phys. Soc. Jpn* **89**, 054707 (2020).
15. R. A. Baulin, M. A. Andreeva, A. I. Chumakov, D. Bessas, B. S. Roshchin, D. N. Karimov, and V. E. Asadchikov, *JETP Lett.* **113**, 162 (2021).
16. R. Rueffer and A. Chumakov, *Historical Developments and Future Perspectives in Nuclear Resonance Scattering in Modern Mossbauer Spectroscopy: New Challenges Based on Cutting-Edge Techniques*, ed. by Y. Yoshida and G. Langouche, Springer (2021).
17. Г. В. Смирнов, В. В. Скляревский, Р. А. Восканян, А. Н. Артемьев, *Письма в ЖЭТФ* **9**, 123 (1969) [*JETP Lett.* **9**, 70 (1969)].
18. Г. В. Смирнов, В. В. Мостовой, Ю. В. Швыдько, В. Н. Селезнев, В. В. Руденко, *ЖЭТФ* **78**, 1196 (1980) [*JETP* **51**, 603 (1980)].
19. М. В. Зелепухин, Г. В. Смирнов, У. ван Бюрк, *ВАНТ* **4**(33), 76 (1985).
20. Г. В. Смирнов, М. В. Зелепухин, У. ван Бюрк, *Письма в ЖЭТФ* **43**, 274 (1986) [*JETP Lett.* **43**, 353 (1986)].
21. Г. В. Смирнов, *ЖЭТФ* **160**, 13 (2021) [*JETP* **133**, 7 (2021)].
22. E. Gerdau, R. Rueffer, R. Hollatz, and J. P. Hannon, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1141 (1986).
23. G. V. Smirnov, in *The Rudolf Moessbauer Story*, ed. by M. Kalvius and P. Kienly (2012), Ch. 16, p. 317.
24. V. B. Potapkin, A. I. Chumakov, G. V. Smirnov, J.-Ph. Celse, R. Rueffer, C. McCammon, and L. Dubrovinsky, *J. Synchrotron Rad.* **19**, 559 (2012).
25. G. V. Smirnov and A. I. Chumakov, *Phys. Rev. A* **100**, 043830 (2019).
26. U. van Buerck, G. V. Smirnov, and R. L. Moessbauer, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, 5843 (1988).

THE CASIMIR EFFECT IN BOSE–EINSTEIN CONDENSATE MIXTURES CONFINED BY A PARALLEL PLATE GEOMETRY IN THE IMPROVED HARTREE–FOCK APPROXIMATION

Nguyen Van Thu^{*}

*Department of Physics, Hanoi Pedagogical University 2
100000, Hanoi, Vietnam*

Received February 4, 2022

revised version February 4, 2022.

Accepted for publication March 18, 2022

DOI: 10.31857/S0044451022080028

EDN: Van Thu EFLSKB

The Casimir effect was first discovered [1] for the electromagnetic field confined between two neutral parallel plates at zero temperature. This effect has been studied for other fields [2–7]. In field of the Bose–Einstein condensate (BEC), the Casimir effect has been considered in both experiment [8–12] and theory, for example, [13–18] in the grand canonical ensemble and [17, 19] in the canonical ensemble. In these papers, the Casimir effect was investigated in the one-loop approximation within the framework of perturbative theory for a single dilute BEC. For two-component BEC (BECs), our previous work [20] pointed out that the Casimir force is not a simple superposition of the one of two single component BEC because of the mutual repulsive interactions. It was also proven to be zero in some cases: (i) the inter-distance between two plates becomes large enough; (ii) both the inter- and intraspecies interactions are zero (ideal gases); and an important case (iii) the interspecies interaction is the full strong segregation. Even so, the case (iii) result is controversial because of the interpretation that the original Casimir force and interspecies interactive force are of the same order in the full strong separation. As an improvement, in Ref. [21] the Casimir effect in the BECs was studied in the improved Hartree–Fock (IHF) approximation, which based on the Cornwall–Jackiw–Tomboulis (CJT) effective action formalism [22]. In this approximation the two-loop diagrams were taken into account and the Goldstone theory is obeyed. However, the momentum

integrals were calculated at the lowest-order approximation, which we call the lowest-order Hartree–Fock (LIHF) approximation. Therefore, the vanishing of the Casimir force in the limit of the full strong segregation did not change.

In this paper, the Casimir effect in the BECs at zero temperature is researched in the IHF approximation with the higher-order terms of the momentum integrals and it is called the higher-order improved Hartree–Fock (HIHF) approximation. To do so, we start from the Lagrangian density of the BECs without external field [23, 24],

$$\mathcal{L} = \sum_{j=1,2} \psi_j^* \left(-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla^2 \right) \psi_j - V, \quad (1)$$

with

$$V = \sum_{j=1,2} \left(-\mu_j |\psi_j|^2 + \frac{g_{jj}}{2} |\psi_j|^4 \right) + g_{12} |\psi_1|^2 |\psi_2|^2. \quad (2)$$

Here \hbar is the reduced Planck constant, μ_j and m_j are the chemical potential and atomic mass of component j , respectively. The coupling constant

$$g_{jj} = 4\pi\hbar^2 a_{jj}/m_j > 0$$

represents the strength of the repulsive intraspecies interaction and

$$g_{jj'} = 2\pi\hbar^2 \left(\frac{1}{m_j} + \frac{1}{m_{j'}} \right) a_{jj'} > 0$$

is the strength of the repulsive interspecies interaction, $a_{jj'}$ being the s -wave scattering length between components j and j' . The field operator ψ_j has the expectation value ψ_{j0} , which plays the role of the order

^{*} E-mail: nvthu@live.com

parameter. Recall that for $g_{12}^2 > g_{11}g_{22}$ the two components are immiscible and a phase-segregated BEC forms [25], and vice versa. Shifting the field operators

$$\psi_j \rightarrow \psi_{j0} + \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{j1} + i\psi_{j2})$$

one can obtain the CJT effective potential in the Hartree–Fock approximation. Unfortunately, this CJT effective potential was proved violating the Goldstone theorem [26] by finding the dispersion relation from the request for vanishing of the determinant of the inverse propagators [27]. To solve this problem, the method developed in [28] is invoked. After adding the extra term in the CJT effective potential, one arrives at the IHF approximation. Minimizing the CJT effective potential with respect to the order parameter one has the gap equations

$$\begin{aligned} -1 + \phi_1^2 + K\phi_2^2 + \frac{1}{g_{11}n_{10}}\Sigma_2^{(1)} &= 0, \\ -1 + \phi_2^2 + K\phi_1^2 + \frac{1}{g_{22}n_{20}}\Sigma_2^{(2)} &= 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Similarly, the Schwinger–Dyson equations can be achieved by minimizing the CJT effective potential with respect to the elements of the propagators

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_1^2 &= -1 + 3\phi_1^2 + K\phi_2^2 + \frac{1}{g_{11}n_{10}}\Sigma_1^{(1)}, \\ \mathcal{M}_2^2 &= -1 + 3\phi_2^2 + K\phi_1^2 + \frac{1}{g_{22}n_{20}}\Sigma_1^{(2)}. \end{aligned} \tag{4}$$

In Eqs. (3) and (4), n_{j0} is the bulk density of the component j , $K = g_{12}/\sqrt{g_{11}g_{22}}$, $\phi_j = \psi_{j0}/\sqrt{n_{j0}}$ is the dimensionless order parameter, and \mathcal{M}_j is dimensionless effective mass. The self energies are defined as

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{(1)} &= \frac{1}{2}(g_{11}P_{11} + 3g_{11}P_{22} + g_{12}Q_{11} + g_{12}Q_{22}), \\ \Sigma_1^{(2)} &= \frac{1}{2}(g_{22}Q_{11} + 3g_{22}Q_{22} + g_{12}P_{11} + g_{12}P_{22}), \\ \Sigma_2^{(1)} &= \frac{1}{2}(3g_{11}P_{11} + g_{11}P_{22} + g_{12}Q_{11} + g_{12}Q_{22}), \\ \Sigma_2^{(2)} &= \frac{1}{2}(3g_{22}Q_{11} + g_{22}Q_{22} + g_{12}P_{11} + g_{12}P_{22}), \end{aligned} \tag{5}$$

with P_{aa}, Q_{bb} are the momentum integrals.

We now consider a binary mixture of Bose gases confined between two parallel plates, which perpendicular to the z -axis. This means that the system is confined to a parallel plate geometry with the size ℓ_x, ℓ_y and distance between the two plates of $\ell = \ell_z$, which satisfies condition $\ell_x, \ell_y \gg \ell$ as was discussed in

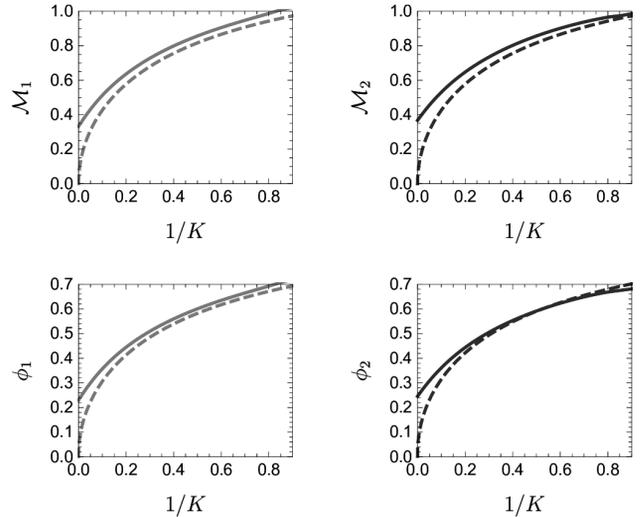


Fig. 1. (Color online) The effective masses (top panel) and order parameters (bottom panel) as a function of $1/K$ at $L = 1$. The solid red (first component) and solid blue (second component) lines are in the HIHF approximation, the dashed red (first component) and dashed blue (second component) are the corresponding quantities in the LIHF approximation

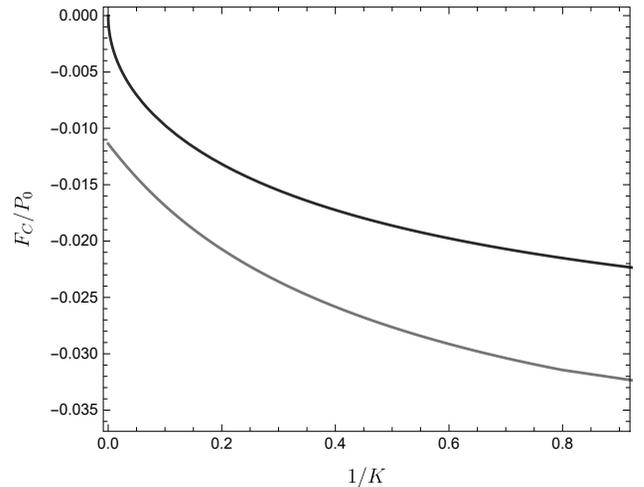


Fig. 2. (Color online) The Casimir force versus $1/K$ at $L = 1$ in the HIHF approximation (red line). The blue line corresponds to the LIHF and one-loop approximations, respectively

[29]. The periodic boundary condition is imposed at the plates, which can be realized in experiments by using toroidal traps [30,31] or optical lattices [32]. Due to the confinement, the wave vectors are quantized. Using the Euler–Maclaurin formula [33], the momentum integrals are calculated in the HIHF approximation at zero temperature

$$\begin{aligned}
P_{11} &= -\frac{\pi^2 m_1 g_{11} n_{10} \xi_1^2}{90 \hbar^2 \ell^3 \mathcal{M}_1}, \\
Q_{11} &= -\frac{\pi^2 m_2 g_{22} n_{20} \xi_2^2}{90 \hbar^2 \ell^3 \mathcal{M}_2}, \\
P_{22} &= \frac{m_1 g_{11} n_{10} \mathcal{M}_1}{12 \hbar^2 \ell} - \frac{m_1 g_{11} n_{10} \xi_1^2 \pi^2}{90 \hbar^2 \mathcal{M}_1 \ell^3}, \\
Q_{22} &= \frac{m_2 g_{22} n_{20} \mathcal{M}_2}{12 \hbar^2 \ell} - \frac{m_2 g_{22} n_{20} \xi_2^2 \pi^2}{90 \hbar^2 \mathcal{M}_2 \ell^3},
\end{aligned} \tag{6}$$

where $\xi_j = \hbar / \sqrt{2m_j g_{jj} n_{j0}}$ is the healing length of j th component.

In order to illustrate these calculations, numerical computations are performed for a dual-species Bose–Einstein condensates of rubidium 87 (first component) and cesium 133 (second component). For this system the parameters are in order $m_1 = 86.909u$, $a_{11} = 100.4a_0$ for rubidium 87 and $m_2 = 132.905u$, $a_{22} = 280a_0$ for cesium 133 [34]. Here $u = 1.66 \cdot 10^{-27}$ kg and $a_0 = 0.529$ nm are the atomic mass unit and Bohr radius, respectively. The dimensionless length is chosen as $L = \ell / \xi_1$ with $\xi_1 = 4000$ nm being the healing length of rubidium 87. The numerical computations show a significant difference compared with the corre-

sponding result in the LIHF approximation, that is the effective masses depend on both the distance ℓ and K . The comparison of the evolution of the effective masses (top panel) and order parameters (bottom panel) in the HHHF approximation (solid lines) with those in the LIHF approximation (dashed lines) is sketched in Fig. 1 at $L = 1$. A remarkable difference in regime of the strong segregated region can be observed. In this region, at a given value of $1/K$, the values of the effective masses and order parameters in the HHHF approximation are bigger than the corresponding ones in the LIHF approximation. At the full strong segregation, both the effective masses and order parameters are different from zero whereas they vanish in the LIHF approximation. This fact confirms that the influence of the higher-order terms in the momentum integrals is not negligible. In the regime of the full strong separation, the HHHF approximation gives

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_j &\simeq \frac{\mathcal{M}_{j0}}{\ell}, \\
\phi_j &\simeq \frac{\phi_{j0}}{\ell^2},
\end{aligned} \tag{7}$$

in which

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{j0} &= \left(\frac{m_j g_{jj} \xi_j^2 \pi^2}{45 \hbar^2} \right)^{1/3}, \\
\phi_{j0} &= \frac{12 \sqrt[3]{5} \pi^{4/3} g_{jj}^{2/3} m_j^{2/3} \xi_j^{4/3} \hbar^{4/3} - (15\pi)^{2/3} g_{jj}^{4/3} m_j^{4/3} \xi_j^{2/3}}{360 \sqrt[3]{3} \hbar^{8/3}}.
\end{aligned} \tag{8}$$

Formally resemble the momentum integrals, the Casimir force energy density is found

$$\mathcal{E}_C = \sum_{j=1,2} -\frac{\pi^2 m_j g_{jj} \xi_j^2 \mathcal{M}_j}{360 \hbar^2 \ell^3}. \tag{9}$$

It is clear that the Casimir energy is negative and, neglecting the ℓ -dependence of \mathcal{M}_j , it has the same form as the one in the LIHF approximation and one-loop approximation. However, in the LIHF and one-loop approximations, the effective masses are independent of the distance so that the Casimir energy density will be the same as the one in the one-loop approximation. The Casimir force is defined as the negative derivative of the Casimir energy with respect to a change in the distance between two parallel plates. Combining with (9) one obtains the Casimir force acting on per unit area of the plates

$$\begin{aligned}
F_C &= \\
&= \sum_{j=1,2} \left(-\frac{\pi^2 m_j g_{jj} \xi_j^2 \mathcal{M}_j}{120 \hbar^2 \ell^4} + \frac{\pi^2 m_j g_{jj} \xi_j^2}{360 \hbar^2 \ell^3} \frac{\partial \mathcal{M}_j}{\partial \ell} \right). \tag{10}
\end{aligned}$$

Owing to the ℓ -dependence of the effective masses, the contribution of the higher-order terms in the momentum integrals is shown by second term in right-hand side of Eq. (10). The evolution of the Casimir force versus $1/K$ is plotted in Fig. 2 at $L = 1$ and other parameters are the same as in Fig. 1. The red line is drawn in the HHHF approximation whereas the blue line corresponds to the LIHF and one-loop approximations. This figure shows that the strength of the Casimir force decreases as the interspecies interaction increases. This fact is understandable if we note that the Casimir force is attractive whereas the interspecies interaction is repulsive. The red line in Fig. 2 show that the Casimir force is non-zero in the limit of the

full strong segregation within the H1HF approximation, whereas it vanishes in the L1HF and one-loop approximations as shown by the blue line in Fig. 2. This is an interesting result in comparison with that in [20]. This result gives us the conclusion that the Casimir force is always on top of interspecies interaction and this is an important improvement on the result in our previous paper [20]. Mathematically, the Casimir force in full strong separation is

$$F_C = - \sum_{j=1,2} \frac{(m_j g_{jj} \pi^2)^{4/3}}{90.3^{2/3} 5^{1/3} \hbar^8 / 3 \ell^5}. \quad (11)$$

This equation confirms again that the Casimir force is non-zero in the full strong separation limit.

Acknowledgments. We are grateful to Shyamal Biswas for their useful discussions.

Funding. This work is funded by the Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under Grant No. 103.01-2018.02.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. H. B. G. Casimir, Proc. K. Ned. Akad. Wet. **51**, 793 (1948).
2. F. Chen, G. L. Klimchitskaya, V. M. Mostepanenko, and U. Mohideen, Phys. Rev. B **76**, 035338 (2007).
3. G. Bimonte, Phys. Rev. A **78**, 062101 (2008).
4. J. F. Babb, Adv. Atom. Mol. Opt. Phys. **59**, 1 (2010).
5. Tran Huu Phat and Nguyen Van Thu, Int. J. Mod. Phys. A **29**, 1450078 (2014).
6. M. Bordag, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko, Phys. Rep. **353**, 1 (2001).
7. G. L. Klimchitskaya and U. Mohideen, Rev. Mod. Phys. **81**, 1827 (2009).
8. M. Fukuto, Y. F. Yano, and P. S. Pershan, Phys. Rev. Lett. **94**, 135702 (2005).
9. A. Ganshin, S. Scheidemantel, R. Garcia, and M. H. W. Chan, Phys. Rev. Lett. **97**, 075301 (2006).
10. D. M. Harber, J. M. Obrecht, J. M. McGuirk, and E. A. Cornell, Phys. Rev. **72**, 033610 (2005).
11. J. M. Obrecht, R. J. Wild, M. Antezza, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **98**, 063201 (2007).
12. G. L. Klimchitskaya and V. M. Mostepanenko, J. Phys. A **41**, 312002 (2008).
13. J. Schiefele and C. Henkel, J. Phys. A **42**, 045401 (2009).
14. J. O. Andersen, Rev. Mod. Phys. **76**, 599 (2004).
15. D. C. Roberts and Y. Pomeau, Phys. Rev. Lett. **95**, 145303 (2005).
16. S. Biswas, J. K. Bhattacharjee, D. Majumder, K. Saha, and N. Chakravarty, J. Phys. B **43**, 085305 (2010).
17. Nguyen Van Thu, Phys. Lett. A **382**, 1078 (2018).
18. Nguyen Van Thu and Pham The Song, Physica A **540**, 123018 (2020).
19. Nguyen Van Thu, Luong Thi Theu, and Dang Thanh Hai, JETP **130**, 321 (2020).
20. Nguyen Van Thu and Luong Thi Theu, J. Stat. Phys. **168**, 1 (2017).
21. Nguyen Van Thu and Luong Thi Theu, Int. J. Mod. Phys. B **33**, 1950114 (2019).
22. J. M. Cornwall, R. Jackiw, and E. Tomboulis, Phys. Rev. D **10**, 2428 (1974).
23. L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press (2003).
24. C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge University Press (2008).
25. P. Ao and S. T. Chui, Phys. Rev. A **58**, 4836 (1998).
26. T. H. Phat, L. V. Hoa, N. T. Anh, and N. V. Long, Ann. Phys. **324**, 2074 (2009).
27. S. Floerchinger and C. Wetterich, Phys. Rev. A **79**, 013601 (2009).
28. Yu. B. Ivanov, F. Riek, and J. Knoll, Phys. Rev. D **71**, 105016 (2005).
29. R. Lipowsky, in *Random Fluctuations and Pattern Growth*, ed. by H. Stanley and N. Ostrowsky, NATO ASI Series E, Vol. **157**, Kluwer Akad. Publ., Dordrecht (1988), pp. 227–245.
30. P. D. Drummond, A. Eleftheriou, K. Huang, and K. V. Kheruntsyan, Phys. Rev. A **63**, 053602 (2001).
31. J. Brand and W. P. Reinhardt, J. Phys. B **34**, L113 (2001).
32. A. A. Shams and H. R. Glyde, Phys. Rev. B **79**, 214508 (2009).
33. G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic, San Diego (2005).
34. D. J. McCarron, H. W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Koppinger, and S. L. Cornish, Phys. Rev. A **84**, 011603 (2011).

О ГЕНЕРАЦИИ ЧЕТНЫХ ГАРМОНИК ОНДУЛЯТОРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПУЧКАМИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

*И. А. Федоров**, *К. В. Жуковский***

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 февраля 2022 г.,
после переработки 8 февраля 2022 г.
Принята к публикации 25 марта 2022 г.

Теоретически исследуется генерация гармоник спонтанного и вынужденного ондуляторного излучения (ОИ) в плоских ондуляторах лазеров на свободных электронах (ЛСЭ). Проводится сравнительный анализ теоретических результатов излучения четных гармоник ОИ, следуя собственным теоретическим расчетам и расчетам других авторов. Анализируется и сравнивается с экспериментом излучение второй гармоники в ондуляторах LCLS, хорошо документированное с учетом всех характеристик ЛСЭ. Исследуется влияние на генерацию гармоник таких характеристик, как сечение пучка, его отклонение от оси, эмиттанс и разброс энергий. Проводится сравнение результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными по генерации гармоник. Исследуется также возможность использования и усиления четных гармоник в ЛСЭ SwissFEL и LCLS-II с выделенными каскадами группирователя и усилителя второй и третьей гармоник.

DOI: 10.31857/S004445102208003X
EDN: EFWFAZ

1. ВВЕДЕНИЕ

Ондуляторное излучение (ОИ) было предсказано Гинзбургом в середине 20 века [1]. Гинзбург также высказал гипотезу [2], что электроны могут излучать когерентно, если они сгруппированы в банчи размером меньше длины волны. Первый ондулятор был построен Мотцем [3], который продемонстрировал генерацию спонтанного ОИ. Строгую теорию вынужденного излучения электронов в ондуляторе как следствие их группировки из-за взаимодействия электронов с электромагнитной волной, предложил Мадэй [4]; он построил первый лазер на свободных электронах и продемонстрировал генерацию когерентного излучения в миллиметровом диапазоне. Теория ЛСЭ представлена во многих работах, например, [5–13]. В основе группировки электронов в ЛСЭ лежит тот факт, что электроны движутся со скоростью меньше скорости света и немного отстают от фотонов. Когда электроны проходят полпериода ондулятора, фотоны проходят это расстояние и еще

полдлины волны, при этом оба вектора магнитного поля ондулятора и волны меняют свои направления и направление силы Лоренца, действующей на электрон, сохраняется на каждом периоде ондулятора. Таким образом, сила Лоренца ускоряет электроны позади узлов волны и замедляет электроны впереди узлов волны; в результате электроны в ондуляторе группируются на длине волны. Группировка на длинах волн гармоник также происходит, но она слабее, чем группировка на длине волны основного тона. Современные ЛСЭ позволяют генерировать импульсы фемтосекундной длительности в рентгеновском диапазоне на длине волны порядка ангстрем. Из-за отсутствия отражающих элементов на таких длинах волн трудно сделать оптический резонатор. Поэтому в рентгеновском и ультрафиолетовом диапазонах в основном применяют однопроходные ЛСЭ высокого усиления, в которых взаимодействие с пучком электронов происходит за один проход излучения в ондуляторах. Недостатком однопроходных рентгеновских ЛСЭ являются очень большие размеры и стоимость: длина ускорителя доходит до 1 км, энергия электронов до 15 ГэВ, ток — до 5 кА, длина ондуляторов — до 100 м. Уменьшение размеров и стоимости является приоритетной задачей в развитии источников излучения четвертого поколения и

* E-mail: fedorov.ia15@physics.msu.ru

** E-mail: zhukovsk@physics.msu.ru

может быть достигнуто, например, путем использования гармоник излучения. Резонансы гармоник ОИ под углом θ к оси ондулятора с периодом λ_u и параметром дипольности k происходят на следующих длинах волн:

$$\lambda_n = \frac{\lambda_u}{2n\gamma^2} \left(1 + \frac{k_{eff}^2}{2} + (\gamma\theta)^2 \right), \quad (1)$$

$$k_{eff}^2 = k^2 \varpi, \quad \varpi = 1 + (d/h)^2.$$

где γ — релятивистский фактор электронов, $k = H_0 \lambda_u e / 2\pi m c^2 \approx 0.9337 H_0 [\text{Тл}] \lambda_u [\text{см}]$ — параметр дипольности, а $\varpi > 1$ учитывает возможное присутствие гармоник магнитного поля с амплитудой d и номером гармоники h . В ондуляторах период обычно составляет несколько сантиметров; значительно уменьшить его не представляется возможным. Получить более коротковолновое излучение с электронами меньшей энергии можно, используя излучение гармоник [14–17]. Однако, чем выше номер гармоники n , тем больше потери, связанные с конечным эмиттансом пучка, разбросом энергии электронов, дифракцией и другими факторами. Особенно сильно это сказывается на вынужденном излучении, где электрон-фотонное взаимодействие на длинах волн гармоник сильнее подвержено влиянию потерь. В источниках излучения четвертого поколения пучки имеют высокий релятивистский фактор $\gamma \sim 10^3$ – 10^4 , низкий разброс энергии $\sigma_e \sim 10^{-3}$ – 10^{-4} , малые эмиттансы $\epsilon_{x,y} \sim 0.5$ мм · мрад и сечение $\sigma_{x,y} \sim 10$ – 30 мкм. Это открывает возможность использовать гармоники излучения в рентгеновском диапазоне.

Целью работы является анализ генерации гармоник, в особенности четных, как спонтанного ОИ, так и вынужденного излучения ЛСЭ, и сравнительный анализ различных методов расчета мощности гармоник путем сравнения соответствующих результатов с данными рентгеновского ЛСЭ LCLS, который выбран в качестве референтной установки ввиду наличия обширной документации по излучению гармоник. Также мы теоретически исследуем возможности усиления и излучения второй гармоники ЛСЭ в выделенных каскадах ондуляторов, настроенных в резонанс.

2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОИ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ СПЕТРА

Программа СПЕТРА [18–21] позволяет проводить численное моделирование ОИ; она считает поток фотонов, спектрально-угловое распределение и

другие характеристики излучения. Согласно [18], дифференциальное распределение плотности числа фотонов dN_p и связанная с этим мощность dP на единицу площади dS в спектральном интервале $d\omega/\omega$ рассчитываются численно с помощью интеграла свертки [18]:

$$\frac{d^2 N_p}{dS d\omega/\omega} = \frac{d^2 P}{hdS d\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega_1} N S_N(\omega - \omega') \Phi|_{\omega=\omega'} \quad (2)$$

где

$$S_N(x) = (\text{sinc } \pi N x)^2 \equiv (\sin \pi N x / \pi N x)^2,$$

ω_1 — основной тон ОИ, N — число периодов ондулятора, $\Phi = d^2 N_{p\infty} / dS d\omega/\omega$ — плотность потока фотонов [18]:

$$\Phi = \frac{N}{4\pi\sigma_x\sigma_y} \frac{4\pi\gamma^2 c / \lambda_u}{\omega} \times \sum_{k>\omega/\omega_1}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi f_k [\rho_k(\omega) \cos(\varphi), \rho_k(\omega) \sin(\varphi)] \times G_k(X, Y, \varphi, \omega), \quad (3)$$

λ_u — период ондулятора, φ — полярный угол вокруг оси ондулятора [18] и

$$\rho_k(\omega) = Z \left(\frac{4\pi\gamma^2 c k}{\omega \lambda_u} - \langle (\gamma\beta)^2 \rangle - 1 \right)^{1/2},$$

$$G_k(X, Y, \varphi, \omega) = \exp \left(- \frac{(X - \rho_k(\omega) \cos \varphi)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(Y - \rho_k(\omega) \sin \varphi)^2}{2\sigma_y^2} \right), \quad (4)$$

$$f_k(X, Y) = \frac{\alpha}{4\pi^2} |\mathbf{F}_k|^2,$$

$$\mathbf{F}_k = \frac{ik}{cRT} \int_0^{\lambda_u} (\boldsymbol{\beta}(z) - \mathbf{n}) e^{ik\omega_1 t(z)} dz, \quad (5)$$

где σ_x, σ_y — размеры пучка, γ — его релятивистский фактор, c — скорость света, $\alpha \simeq 1/137$ — постоянная тонкой структуры,

$$\langle (\gamma\beta)^2 \rangle = \int_0^{\lambda_u} \left((\gamma\beta_x)^2 + (\gamma\beta_y)^2 \right) \frac{dz}{\lambda_u},$$

$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$ — скорость электрона, $t = t' + R(t')/c$ — запаздывающее время, $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, $R = |\mathbf{R}|$, $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ —

вектор от заряда к наблюдателю, $\mathbf{r} = (X, Y, Z)$, $\mathbf{r}' = (x, y, z)$. Разброс энергий электронов и эмиттанс учитываются в коде SPECTRA и вычисляются в обеих поперечных плоскостях. Эмиттанс учитывается в свертке для излучения одного электрона с двумерной функцией распределения электронов. Разброс энергий σ_e вызывает уширение линий спектра и учитывается в свертке с гауссовым распределением со средним квадратичным $2\hbar\omega\sigma_e/E$, где $\hbar\omega$ — энергия фотона, E — энергия электрона. Численный счет ведется, как обычно, в волновой зоне: $|Z - z| \gg |X - x|, |Y - y|$. Ближнюю зону можно также включить в расчет, но это существенно замедляет вычисления. Мы использовали во всех численных и аналитических вычислениях приближения волновой (дальней) зоны.

Интегрирование по частотам ω' в (2) сводится к взятию свертки с обычной для ОИ функцией sinc линии спектра S_N , что позволяет осуществить быстрый счет с помощью алгоритмов SPECTRA для преобразований Фурье [18] в свертке. При интегрировании быстроосциллирующих функций по времени движения электрона в ондуляторе, интервал интегрирования разбивается в SPECTRA на несколько отрезков, на каждом из которых проводится аппроксимация функции полиномами третьего порядка. Для функции $g(t)$ в аппроксимации полиномом порядка n в области интегрирования, n -я производная $d^n g/dt^n$ будет константой. Тогда, интегрируя $G = \int g(t)e^{i\omega t} dt$ по частям n раз, получим

$$G = \left(-\frac{1}{i\omega}\right)^n \int \frac{d^n g(t)}{dt^n} e^{i\omega t} dt - \sum_{k=1}^n \left(-\frac{1}{i\omega}\right)^k \left[\frac{d^k g(t)}{dt^{k-1}} e^{i\omega t} \right]. \quad (6)$$

С учетом $d^n g/dt^n = \text{const}$, первый член имеет вид

$$\left(-\frac{1}{i\omega}\right)^{n+1} \frac{d^n g(t)}{dt^n} (e^{i\omega t_1} - e^{i\omega t_2}),$$

где $t \in [t_1, t_2]$ — малый интервал времени, на котором $g(t)$ аппроксимирована полиномом третьего порядка. В SPECTRA производные до третьего порядка определяются методом интерполяции кубическими сплайнами [22]. Тогда [18] весь интервал интегрирования $t \in [t_1, t_{m+1}]$ оказывается разбит на m отрезков, и интегрирование в G сводится к суммированию:

$$G = \sum_{k=1}^4 \left(-\frac{1}{i\omega}\right)^k \left(g^{(k-1)}(t_1) e^{i\omega t_1} - g^{(k-1)}(t_{m+1}) e^{i\omega t_{m+1}} \right) + \frac{1}{\omega^4} \sum_{j=1}^{m-1} \left(g^{(3)}(t_{j+1}) - g^{(3)}(t_j) \right) e^{i\omega t_{j+1}}, \quad (7)$$

где $g^{(k)}(x)$ — производная порядка k от функции $g(x)$.

Описанная выше схема численного счета дает высокую точность результатов. Учет конечного эмиттанса проводится при интегрировании по радиусу, которое ведется со сверткой по разбросу энергий и при азимутальном интегрировании. В диапазоне энергий фотонов, где доминируют высшие гармоники, свертка с функцией S_N мало меняет форму спектра, и в этом случае программа SPECTRA не считает свертки и счет ускоряется без существенного ухудшения точности. В расчете использовалась опция “Energy Dependence → Angular Flux Density” для счета интегралов описанным выше способом. Другие детали работы программы SPECTRA содержатся в [18].

3. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОИ С ПОМОЩЬЮ КОЭФФИЦИЕНТОВ БЕССЕЛЯ

Простейшей аппроксимацией магнитного поля по длине ондулятора является чисто синусоидальная зависимость $H = H_0 \sin(k_\lambda z)$, $k_\lambda = 2\pi/\lambda_u$, где H_0 — амплитуда поля на оси z . Поле реального ондулятора более сложное, в нем могут присутствовать гармоники и непериодические компоненты [23–30]; кроме того, пучок имеет конечный размер, и простейшее гармоническое поле не удовлетворяет уравнениям Максвелла во всем зазоре ондулятора [31–35]. Для генерации в рентгеновском и ультрафиолетовом диапазонах используются пучки малого сечения: $\sigma_e \sim 0.2\text{--}0.5$ мм для UV-ЛСЭ, $\sigma_e \sim 10\text{--}50$ мкм для рентгеновского ЛСЭ. Вблизи оси поле ондулятора близко к идеально синусоидальному и может быть представлено единственной гармоникой. Поле H_0 на оси ондулятора слабее, чем поле H_{max} у полюсов магнитов: $H_0 \simeq H_{max}/\text{ch}(\pi g/\lambda_u)$, где g — зазор ондулятора. В пучке конечного сечения происходят бетатронные колебания, которые расщепляют линию излучения n -й гармоники ОИ на частоте $\omega_n = 2\pi c/\lambda_n$ на бетатронные гармоники p , отстоящие друг от друга на частоту, значительно меньшую, чем сам резонанс ОИ [29, 33, 34]: $\omega_\beta \simeq \omega_n k/\sqrt{2}n\gamma$. Для релятивистских электронов

$\gamma \ll 1$ и $\omega_\beta \propto \omega_n/\gamma$, так что в рентгеновском и ультрафиолетовом диапазонах $\omega_\beta \ll \omega_n$ и бетатронные гармоники, составляющие линию излучения, расположены очень близко друг к другу. В то же время, поскольку длина волны излучения λ_n мала, уширение расщепленной линии излучения может быть заметно. Бетатронные колебания в пучке конечного размера вызывают четные гармоники ОИ на оси (см. [33, 34] и др.).

Отметим, что возможные непериодические компоненты магнитного поля ондулятора тщательно компенсируются после вычислений интегралов поля, так как они уводят пучок с оси и вызывают расстройку когерентности осцилляций электрона по длине ондулятора. Индуцированный угол изгиба тоже вызывает четные гармоники ОИ на оси [36–39], нечетные гармоники ослабевают, линия спектра искажается и вместо привычной функции $\text{sinc}(\nu_n/2)$, где $\nu_n = 2\pi nN((\omega/\omega_n) - 1)$ — параметр расстройки относительно резонансов ОИ ($\omega_n = 2\pi c/\lambda_n$), получается обобщенная функция Эйри

$$S(\nu_n, \eta, \beta) \equiv \int_0^1 e^{i(\nu_n \tau + \eta \tau^2 + \beta \tau^3)} d\tau$$

(см., например, [40]). Спектрально угловые характеристики ОИ аналитически описываются с помощью коэффициентов Бесселя $f_{n;x,y}$ x - и y -поляризаций излучения, которые выражаются через обобщенные функции Бесселя. Интенсивность излучения одного электрона записывается следующим образом:

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \gamma^2 N^2 k^2}{c \left(1 + \left(k_{eff}^2/2\right) + (\gamma\Theta)^2\right)} \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 \text{sinc}^2\left(\frac{\nu_n}{2}\right) (f_{n;x}^2 + f_{n;y}^2). \quad (8)$$

Влияние разброса энергий в реальном пучке электронов на излучение описывается сверткой

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^2 I(\nu_n + 4\pi n N \epsilon) e^{-\epsilon^2/2\sigma_\epsilon^2} d\epsilon/d\omega d\Omega \sqrt{2\pi}\sigma_\epsilon;$$

учет угловых и бетатронных эффектов ведется в коэффициентах Бесселя $f_{n;x,y}$. В [41] было показано соответствие аналитического расчета излучения гармоник численному моделированию СПЕКТРА для различных ондуляторов; там же была подтверждена справедливость аналитических результатов и коэффициентов Бесселя для ондуляторов

с гармониками поля. Аналитические выражения для ондулятора с тремя гармониками поля в двух взаимно-ортогональных плоскостях представлены в работе [41], для эллиптического ондулятора — в [26, 27], учет и анализ влияния гармоник поля эллиптического и плоского ондуляторов проведен также в [42–47]. Для плоского ондулятора и узких пучков релятивистских электронов сложные формулы для коэффициентов Бесселя упрощаются до следующих выражений (см. [47, 48]):

$$f_{n;x} = \sum_p \tilde{J}_p \left| (J_{n+1}^n + J_{n-1}^n) + \frac{2}{k} \gamma \theta \cos \varphi J_n^n \right|,$$

$$f_{n;y} = \sum_p \left(\tilde{J}_p \left| \frac{2}{k} \gamma \theta \sin \varphi J_n^n \right| + J_n^n \frac{\sqrt{2}\pi y_0}{\lambda_u} (\tilde{J}_{p+1} - \tilde{J}_{p-1}) \right), \quad (9)$$

где y_0 — расстояние от оси ондулятора, p — номер бетатронной гармоники расщепления линии ОИ, φ — угол вокруг оси ондулятора, J_n^m и \tilde{J}_p — функции Бесселя:

$$J_n^m \equiv J_n^m(\zeta, \xi) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} \times \exp[i(n\alpha + m\zeta \sin \alpha + m\xi \sin(2\alpha))], \quad (10)$$

$$\tilde{J}_p \equiv J_p^1(-\kappa, -\eta),$$

$$\zeta = \theta \cos \varphi \frac{\lambda_u k}{n\lambda_n \gamma}, \quad \xi = \frac{\lambda_u k^2}{8n\lambda_n \gamma^2}, \quad (11)$$

$$\kappa = \frac{4\pi\theta y_0 \gamma^2}{\lambda_u (1 + (k^2/2))}, \quad \eta = \frac{\pi^2 \gamma y_0^2 k}{\sqrt{2}\lambda_u^2 (1 + (k^2/2))}.$$

Четные гармоники появляются из-за угловых эффектов и бетатронных колебаний; угловые эффекты и конечный размер пучка учитываются также в аргументах функций Бесселя. Ниже мы сравним вклады бетатронных колебаний и угловых эффектов в рентгеновское излучение плоского ондулятора ЛСЭ LCLS. Выбор установки диктуется обилием информации по излучению гармоник в LCLS. Мы оценим влияние бетатронных и угловых вкладов на излучение четных и нечетных гармоник спонтанного и вынужденного ОИ и сравним с результатами численного моделирования спектра и с данными по ЛСЭ.

4. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МОЩНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ОДНОПРОХОДНОГО ЛСЭ

Когерентное излучение ЛСЭ генерируется электронами в банчах, разделенных длиной волны излучения в точном соответствии с гипотезой Гинзбурга [2]. Группировка электронов в ондуляторе происходит вследствие взаимодействия электромагнитной волны с электронами банча. Строгая теория этого явления была развита Мадейем [4]. Сила Лоренца в ондуляторе группирует электроны около узлов волны в банчи размером менее длины волны, и излучение становится близким к когерентному (детальное описание см. [5–13, 49]). В начале ЛСЭ присутствует сильная некогерентная составляющая излучения и происходит квадратичный рост напряженности поля излучения и мощности. В результате взаимодействия электронов и излучения происходит модуляция энергии электронов и затем развивается модуляция электронной плотности банча. Это приводит к экспоненциальному росту мощности:

$$P(z) \propto P_0 e^{z/L_{g0}}.$$

Длина усиления ЛСЭ $L_{g0} = 1/\sqrt{3}g_0$ обратно пропорциональна коэффициенту усиления g_0 и входит в безразмерный параметр Пирса $\rho = (\lambda_u g_0)/4\pi$ [5–7], который является фундаментальным для описания процессов в ЛСЭ. Параметр Пирса зависит от параметров ондулятора и плотности тока (см. [5–9, 49–51]):

$$\rho_n = \frac{1}{2\gamma} \left(\frac{J}{4\pi i} \right)^{1/3} (\lambda_u k_{eff} |f_n|)^{2/3}, \quad (12)$$

где $i = 4\pi\epsilon_0 m c^3 / e \simeq 1.7045 \cdot 10^4$ — размерная постоянная тока Альфвена [A], λ_u — период ондулятора, f_n — коэффициент Бесселя n -й гармоники ОИ, $J = I_0/\Sigma$ — плотность тока, I_0 — ток, $\Sigma = 2\pi\sqrt{\beta_x \epsilon_x \beta_y \epsilon_y}$ — сечение пучка, $\epsilon_{x,y} = \sigma_{x,y} \theta_{x,y}$ — эмиттансы, $\sigma_{x,y} = \sqrt{\epsilon_{x,y} \beta_{x,y}}$ — поперечные размеры, $\beta_{x,y} = \epsilon_{x,y} / \theta_{x,y}^2$ — параметры Твисса, $\theta_{x,y}$ — расходимости пучка; в ЛСЭ обычно применяется фокусировка квадрупольными магнитными линзами, которые задают фокусные расстояния $\beta_{x,y}$ и эмиттансы $\epsilon_{x,y}$. Параметр Пирса ЛСЭ ρ_n определяет максимально возможную мощность излучения гармоники $P_{F,n} \approx \sqrt{2}\rho_n P_{beam}$, где $P_{beam} = EI_0$ — мощность электронного пучка, а также длину усиления $L_{n,g} \simeq \lambda_u / (4\pi\sqrt{3}n^{1/3}\rho_n)$ и длину насыщения ЛСЭ: $L_s \sim \lambda_u / \rho \sim 10\text{--}20 L_g$. Отметим, что начальная мощность в ЛСЭ с самоусилением спонтанного излучения SASE задается когерентной составляющей шума электронного банча: $P_{noise} \approx 1.6\rho^2 e 4\pi c P_e / (I_0 \lambda)$ [49, 50]. Начальная

мощность ЛСЭ может также происходить от затравочного когерентного излучения, которое стабилизирует фазу и временные характеристики излучения. Разного рода потери, связанные с дифракцией, разбросом энергии, эмиттансом и др., уменьшают мощность излучения ЛСЭ, увеличивают длину усиления и насыщения. Дифракция может быть учтена с помощью поправки κ к параметру Пирса, предложенной в работах [14, 38, 39, 52–54]:

$$\rho_n \rightarrow \frac{\rho_n}{\kappa}, \quad \kappa = \sqrt[3]{1 + \frac{\lambda_u \lambda_n}{16\pi\rho_n \Sigma}}. \quad (13)$$

Влияние разброса энергий и эмиттанса пучка на длину усиления и мощность излучения описывается феноменологически с помощью следующих коэффициентов:

$$\begin{aligned} \Phi_n &\simeq (\zeta^n + 0.165\mu_{\epsilon,n}^2) e^{0.034\mu_{\epsilon,n}^2}, \\ \mu_{\epsilon,n} &\simeq 2\sigma_\epsilon / n^{1/3} \tilde{\rho}_n, \\ \eta_n &\simeq 0.942 \left(e^{-\Phi_n(\Phi_n-0.9)} + 1.57(\Phi_n-0.9)/\Phi_n^3 \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где σ_ϵ — разброс энергий, а эмиттанс учитывается в ζ [52, 53]; для согласованного пучка $\zeta \approx 1\text{--}1.1$, а в рентгеновском диапазоне $\zeta \approx 1$. Коэффициенты (14) были выверены в ходе сравнительного анализа теоретических результатов, численных симуляций (см. [43, 55, 56]) и экспериментальных данных ЛСЭ в диапазоне от видимого до рентгеновского [41, 42, 47, 48]. Длина усиления $L_{n,g}$ и мощность насыщения $P_{n,F}$ гармоник в режиме их независимого роста в однопроходном ЛСЭ записываются с учетом потерь и соответствующих им коэффициентов (13), (14) следующим образом [52, 53]:

$$L_{n,g} \rightarrow L_{n,g} \kappa \Phi_n, \quad (15)$$

$$P_{n,F} \simeq \sqrt{2}\rho_n P_{beam} \left(\eta_n \frac{1}{\kappa^2} \right). \quad (16)$$

Независимый рост мощности гармоник обычно происходит медленнее роста мощности основного тона. В то же время, n -я гармоника может быть индуцирована основным тоном в режиме нелинейной генерации. Тогда ее мощность растет быстрее, как n -я степень основного тона, пропорционально e^{nz/L_g} [5–7, 14, 15]. Насыщение n -й гармоники в режиме нелинейной генерации определяется насыщением основного тона. Соответствующая мощность насыщения приближенно записывается следующим образом [52, 53]:

$$P_{n,F} \simeq \eta_n \frac{P_{1,F}}{\sqrt{n}} \left(\frac{f_n}{n f_1} \right)^2. \quad (17)$$

Экспоненциальный рост мощности излучения в конце ЛСЭ переходит в осцилляции около мощности насыщения. Насыщение гармоник в режиме нелинейной генерации начинается несколько раньше насыщения основного тона и развивается постепенно. Приближенное аналитическое описание этого процесса дано в [57].

Влияния разного рода потерь на излучение ЛСЭ было учтено в работах [58, 59] посредством феноменологической коррекции Λ к длине усиления L_g : $L_g = L_{g0} (1 + \Lambda)$, где Λ описывает влияние дифракции, разброса энергий и эмиттанса пучка. Формулы (13)–(15) проще, а результаты хорошо согласуются с высокоточной аппроксимацией Λ [58, 59]. Выражение для Λ представляет полином нецелой степени из семи слагаемых с девятнадцатью различными численными коэффициентами (не приводим для краткости). Коррекция длины усиления также корректирует мощность и длину насыщения ЛСЭ.

Аналитическое описание мощности гармоник ЛСЭ в режиме нелинейной генерации было предложено, например, в работе [60]; для отношения мощности третьей гармоники P_3 к мощности основного тона P_1 , в [60] предложена следующая формула:

$$P_3 = \Theta \rho P_{beam} \left(\frac{P_1}{\rho P_{beam}} \right)^3, \quad (18)$$

где численный множитель Θ определяется сложным интегральным выражением и имеет порядок около 10^{-1} . Отметим, что оценки мощности нечетных гармоник (18) дают результаты, сильно отличающиеся от экспериментальных. Однако основные вопросы вызывает генерация четных гармоник, так как на оси плоского ондулятора в идеальном пучке четные гармоники практически не излучаются: излучение на их длинах волн идет в противофазе с соседних периодов ондулятора. Авторы [60] оценивают мощность насыщения P_2 второй гармоники ЛСЭ на основе мощности P_n соседней первой или третьей гармоники, банчинга b_n и коэффициентов Бесселя f_n вовлеченных гармоник; формула учитывает также сечение пучка $\sigma_{x,y}$ и записывается следующим образом:

$$P_{2,[60]} \approx P_n \left(\frac{\lambda_u k f_2}{\gamma 2\pi \sigma_{x,y} f_n} \frac{b_2}{b_n} \right)^2. \quad (19)$$

Отметим, что в идеале, мощности всех гармоник согласованы, но в реальности расчетные результаты для мощности гармоник могут отличаться от измеренных величин на порядок и более. Расчетные результаты для $n = 2$ будут сильно зависеть от того,

значения какой гармоники n , первой или третьей, используются в (19), и используются ли измеренные или вычисленные значения. Мы продемонстрируем это на примере ЛСЭ LCLS. В работах [61, 62] аналитически рассчитаны мощность второй гармоники P_2 в терминах мощности основного тона P_1 следующим образом:

$$P_{2,[61]} \approx \frac{P_1}{450\pi} \frac{1}{\Xi} \frac{A^2 + B^2}{F^2} \times \frac{\ln(1 + 1/(4\Gamma^2))}{\arctg(1/\Gamma) + (\Gamma/2) \ln(\Gamma^2/(1 + \Gamma^2))}, \quad (20)$$

где $\Xi = k^2/(2 + k^2)$, $A = 2\Xi(J_0(\Xi) - J_2(\Xi)) + J_1(\Xi)$, $B = J_1(\Xi)$, $F = J_0(\Xi/2) - J_1(\Xi/2)$ [61], J_i — обычные функции Бесселя, $\Gamma = 4\pi\sigma_{x,y}^2/N\lambda_u\lambda_1$ — число Френеля электронного пучка с сечением $\sigma_{x,y}$ на длине ондулятора $N\lambda_u$. Мы проведем сравнительный анализ мощности гармоник ЛСЭ LCLS по формуле (17) и результатов, полученных на основе теорий других авторов: по формулам (18), (19) из работы [60] и по формуле (20) из работы [61]. Выбор ЛСЭ LCLS объясняется тем, что, в отличие от других рентгеновских ЛСЭ, на этой установке наиболее полно и хорошо документировано излучение гармоник, например, в работах [63–65].

5. СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ОНДУЛЯТОРА LCLS

Первый рентгеновский лазер на свободных электронах был построен в США в 2009 г. на установке Linac Coherent Light Source (LCLS). Излучение ЛСЭ LCLS формируется в 33 ондуляторах с постоянными магнитами; длина каждого ондулятора 3.4 м [63–65], период $\lambda_u = 3$ см, параметр дипольности фиксированный, $k = 3.5$, электронный ток достигает 1 кА с пучком энергии $E = 4.3$ ГэВ и 3.5 кА с $E = 13.6$ ГэВ; некоторые данные собраны в табл. 1.

ЛСЭ LCLS излучает в жестком и мягком рентгеновском диапазоне на длине волны $\lambda_1 = 0.15$ нм с энергией электронов $E = 13.6$ ГэВ и на длине волны $\lambda_1 = 1.5$ нм с $E = 4.3$ ГэВ. В спектре ЛСЭ зарегистрированы и измерены вторая и третья гармоники, зарегистрирована также пятая гармоника. Рассмотрим ОИ в ондуляторе LCLS, например, с пучком энергии $E = 4.3$ ГэВ. Результаты моделирования представлены на рис. 1, 2 с учетом сечения пучка, разброса энергии и других характеристик (см. табл. 1). Спектр ОИ на оси в дальней зоне рассчитан аналитически и численно с помощью SPECTRA

Таблица 1. Параметры электронного пучка и плоского ондулятора LCLS

Параметр	Значение	Параметр	Значение
γ	8400	I_{peak}	1 кА
$\gamma\epsilon_{x,y}$	0.4 мкм · рад	$\theta_{div} = \sqrt{\sigma/\beta}$	2.2 мкрад
$\sigma_{x,y}^{exp}$	20–25 мкм	σ_e	$0.3 \cdot 10^{-3}$
$\sigma_{x,y}^{model}$	23 мкм	$\beta_{x,y}$	10 м

Примечание. Пучок электронов LCLS энергии $E = 4.3$ ГэВ, где $\sigma_{x,y}^{exp}$ — сечение в эксперименте, $\sigma_{x,y}^{model}$ — сечение, использованное в модели, I_{peak} — ток, σ_e — разброс энергий, $\beta_{x,y}$ — параметр Твисса.

Параметр	Значение	Параметр	Значение
γ	26600	I_{peak}	3.5 кА
$\gamma\epsilon_{x,y}$	0.4 мкм · рад	$\theta_{div} = \sqrt{\sigma/\beta}$	0.9 мкрад
$\sigma_{x,y}^{exp}$	20–40 мкм	σ_e	$0.1 \cdot 10^{-3}$
$\sigma_{x,y}^{model}$	30 мкм	$\beta_{x,y}$	25 м

Примечание. Пучок электронов LCLS энергии $E = 13.6$ ГэВ.

Параметр	Значение	Параметр	Значение
λ_u	3 см	N	113
L	3.4 м	k	3.5

Примечание. Ондулятор LCLS, λ_u — период, L — длина, N — число периодов, k — параметр ондулятора.

и показан соответственно на рис. 1 и рис. 2. Отметим большое количество высших нечетных гармоник и малое содержание четных гармоник в спектре (см. рис. 1а, 2а). Для сравнения на рис. 1б, 2б показан спектр ОИ ондулятора LCLS под углом $\gamma\theta = 0.07$, который соответствует углу электрон-фотонного взаимодействия на длине усиления ЛСЭ; четные гармоники ОИ под углом $\gamma\theta = 0.07$ на порядок сильнее, чем на оси.

На оси ондулятора коэффициенты Бесселя для гармоник $n = 1, 2, \dots, 9$ таковы:

$$f_{n=1,2,\dots,9}^{emittance} = \{0.74, 0.02, 0.34, 0.02, 0.23, 0.02, 0.18, 0.02, 0.14\}. \quad (21)$$

В LCLS вклад бетатронных колебаний в коэффициенты Бесселя нечетных гармоник ничтожен: около 10^{-18} . Для четных гармоник в LCLS вклад бетатронных колебаний больше и составляет $f_2^{beta} \sim 0.002$, однако это значение на порядок меньше вклада угловых эффектов; коэффициенты Бесселя первых четных гармоник таковы: $f_{2,4,6} \sim 0.02$.

Спектр ОИ, полученный нами с учетом только эмиттанса пучка и без учета бетатронных эффектов, практически ничем не отличается от спектра на рис. 1; мы не приводим его для краткости. Таким образом, аналитически выделив вклады различных физических эффектов, мы получили, что излучение четных гармоник происходит главным образом из-за конечного эмиттанса и угловых эффектов, а не за счет бетатронных колебаний в пучке конечного размера. Вклад бетатронных колебаний в мощность гармоник ОИ пренебрежимо мал.

Бетатронные колебания могут влиять на ширину линии излучения, расщепляя ее на бетатронные гармоники (см. (9)). Мы провели теоретическую оценку этого эффекта для ондулятора LCLS. Основной вклад дают пять бетатронных гармоник с $p = -2, \dots, 2$ на расстоянии $\delta\lambda \simeq k\lambda/n\sqrt{2}\gamma|_{n=1} \simeq 0.45$ пм друг от друга. Ширине бетатронного расщепления равной примерно 1.8 пм соответствует спектральная плотность $4\delta\lambda/\lambda \approx 0.1\%$; в то же время естественная спектральная плотность ОИ та-

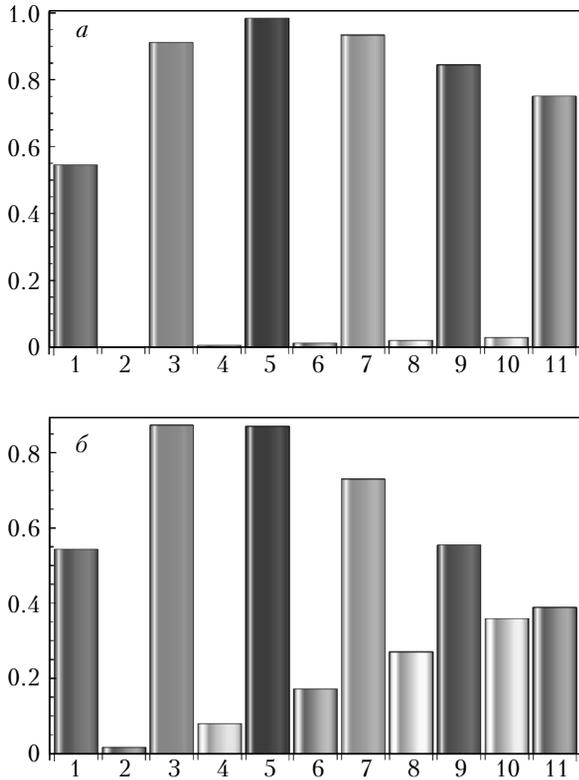


Рис. 1. Аналитическое моделирование с помощью программы SPECTRA: *а* — спектр ОИ ондулятора LCLS с $E = 4.3$ ГэВ на оси с учетом эмиттанса пучка, *б* — спектр ОИ ондулятора LCLS под углом $\gamma\theta = 0.07$ электрон-фотонного взаимодействия ЛСЭ

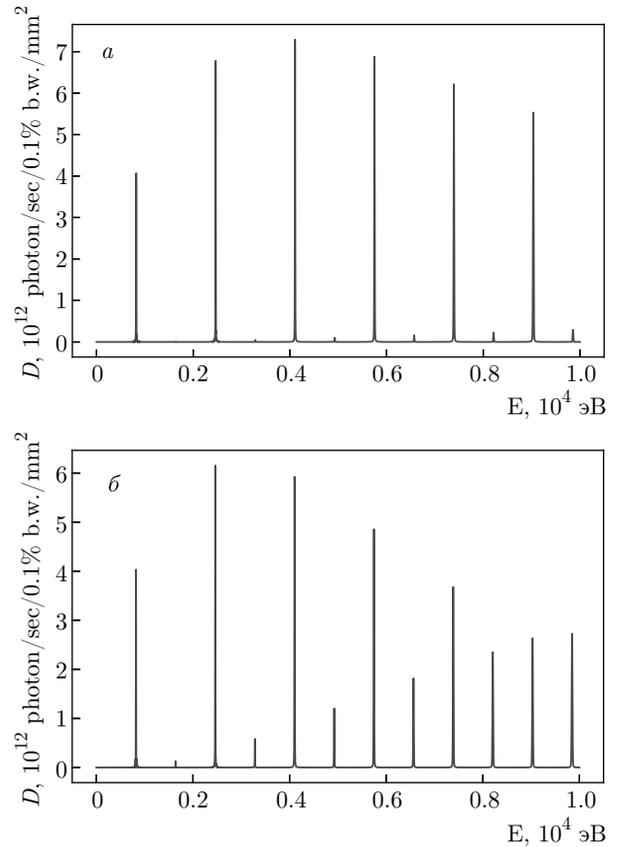


Рис. 2. Численное моделирование с помощью программы SPECTRA: *а* — спектр ОИ ондулятора LCLS с $E = 4.3$ ГэВ на оси с учетом эмиттанса пучка, *б* — спектр ОИ ондулятора LCLS под углом $\gamma\theta = 0.07$ электрон-фотонного взаимодействия ЛСЭ

кова: $1/N|_{N=113} = 0.9\%$. Таким образом, ширина бетатронного расщепления почти на порядок меньше естественной ширины линии спектра ОИ.

6. ИЗЛУЧЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ЛСЭ LCLS

Излучение ЛСЭ LCLS хорошо документировано в работах [63–65], которые мы используем для сравнительного анализа с теоретическими результатами, полученными в рамках различных подходов к исследованию мощности гармоник. Последние представлены на рис. 3*а* для LCLS с пучком энергии $E = 4.3$ ГэВ и на рис. 3*б* для излучения с пучком энергии $E = 13.6$ ГэВ. Мощность основного тона обозначена красной областью на рис. 3*а*, согласно результатам серии экспериментов с длиной волны $\lambda = 1.5$ нм, где энергия излучения составляла 1–2 мДж при длительности банчей около 100–250 фс. Исходя из измеренной энергии фотонного импульса $E_\gamma = 1$ мДж при длине электрон-

ного банча $\tau_e = 0.2$ пс, получаем мощность ЛСЭ $P \approx 8.5$ ГВт, что в точности соответствует значению, полученному нами аналитически. Измеренное на ЛСЭ LCLS содержание третьей гармоники: около 2% [63]; в некоторых случаях отмечалось уменьшение ее содержания до 0.2%. На рис. 3*а* зеленая область соответствуют диапазону измеренных значений мощности третьей гармоники без учета этих флуктуаций, т. е. представлен наиболее узкий диапазон значений согласно [63]. Непосредственные измерения пятой гармоники на LCLS не проводилось, ее содержание было оценено авторами [63] как приблизительно 10% мощности третьей гармоники. Соответствующий диапазон мощности пятой гармоники обозначен синей областью на рис. 3*а*. Измеренное содержание второй гармоники составляло около 0.04–0.1%, и оно показано оранжевой областью на рис. 3*а*. Вторая гармоника измерялась только в диапазоне мягкого рентгеновского излу-

чения ввиду технических особенностей детекторов; на рис. 3б оранжевая область показывает предполагаемую мощность второй гармоники для жесткого рентгеновского излучения LCLS с электронным пучком энергии $E = 13.6$ ГэВ, где содержание второй гармоники предполагается схожим: около 0.04–0.1 %.

Результаты теоретического расчета также представлены на рис. 3: красная сплошная линия показывает мощность основного тона ЛСЭ, зеленая штриховая линия — мощность третьей гармоники, синяя пунктирная линия — пятой гармоники. Мощность второй гармоники рассчитана с учетом эффективного угла электрон-фотонного взаимодействия на длине усиления ЛСЭ — оранжевый штрихпунктир. Все рассчитанные нами значения хорошо согласуются с экспериментом, что подтверждает правильный учет физических явлений и параметров установки в нашем расчете.

Поскольку главная неопределенность теоретических расчетов обычно касается четных гармоник, мы исследовали влияние различных параметров на их излучение. В частности, мы рассчитали мощность второй гармоники, аналитически выделив и учтя только влияние эмиттанса и бетатронных колебаний в пучке; соответствующее значение отмечено на рис. 3а штриховой оранжевой линией. Рассчитанная мощность второй гармоники ЛСЭ при этом оказалась почти на три порядка ниже измеренной.

Соответствие расчета эксперименту восстанавливается, если учесть эффективный угол электрон-фотонного взаимодействия в пучке на характерной длине усиления. Он является определяющим, как показывает расчет, для генерации четных гармоник в ЛСЭ. С учетом этого, получаем значения коэффициентов Бесселя гармоник $n = 1, 2, \dots, 9$:

$$f_{n=1,2,\dots,9}^{e-\gamma} = \{0.74, 0.07, 0.33, 0.08, 0.22, 0.09, 0.15, 0.09, 0.11\}. \quad (22)$$

Сравнение значений коэффициентов Бесселя (22) с соответствующими значениями в (21), где учтен только эмиттанс пучка, показывает, что для низших нечетных гармоник $n = 1, 3, 5$ разница невелика, а для высших нечетных гармоник разница становится значимой, что выражается в заметном ослаблении излучения высших нечетных гармоник. Для четных гармоник, напротив, значения коэффициентов Бесселя с учетом угла электрон-фотонного взаимодействия $f_{n=2,4,6,8}^{e-\gamma} \simeq 0.08$ больше соответствующих значений с учетом только эмиттанса $f_{n=2,4,6,8}^{emittance} \simeq 0.02$ в четыре раза (!). Спектр ОИ под углом электрон-фо-

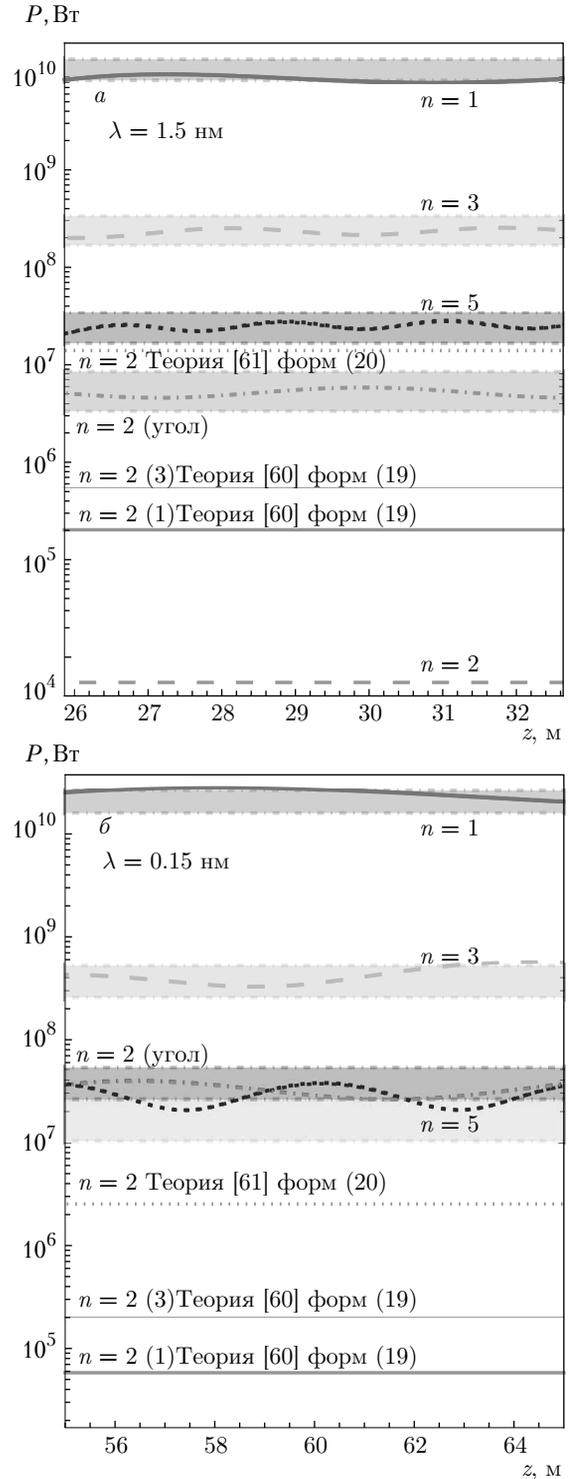


Рис. 3. Мощность гармоник ЛСЭ LCLS; гармоники показаны цветными линиями и обозначены номерами; диапазоны экспериментальных значений мощности показаны цветными областями: *a* — для пучка энергии $E = 4.3$ ГэВ, разброс энергий $\sigma_e = 3 \cdot 10^{-4}$, ток $I_0 = 1$ кА, эмиттанс $\gamma\epsilon_{x,y} = 0.4$ мкм, $\beta_{x,y} = 10$ м; *б* — для пучка энергии $E = 13.6$ ГэВ, разброс энергий $\sigma_e = 1 \cdot 10^{-4}$, ток $I_0 = 3$ кА, эмиттанс $\gamma\epsilon_{x,y} = 0.4$ мкм, $\beta_{x,y} = 25$ м

тонного взаимодействия выглядел бы как на рис. 1б и содержал бы на порядок больше четных гармоник (ср. с рис. 1а). Поскольку для излучения ЛСЭ существенно электрон-фотонное взаимодействие, спектру ОИ ондуляторов LCLS соответствует рис. 1а, а мощности гармоник ЛСЭ показаны на рис. 3а с учетом значений коэффициентов Бесселя $J_{n=1,2,\dots,9}^{angle}$ (22); результаты расчета соответствует измерениям на ЛСЭ LCLS [63–65].

Независимые оценки мощности гармоник LCLS были сделаны в различных работах, см., например, [60, 61]. Мощности гармоник $n = 1, 2, 3, 5$, рассчитанные нами с учетом основных параметров ЛСЭ, соответствуют экспериментальным значениям, как показано выше. Для сравнения мы рассчитали и показали на рис. 3а мощности гармоник по формуле (19) в соответствии с теорией в [60] и по формуле (20) в соответствии с теорией [61]. В [61] теоретическая мощность ЛСЭ LCLS: $P_1 = 8$ ГВт, что хорошо соответствует экспериментам [63–65]. Однако оценка мощности третьей гармоники в [60]: $P_{3,[60]} = 15$ МВт, примерно на порядок меньше, чем в эксперименте [65]. Более того, оценка мощности второй гармоники в [60]: $P_{2,[60]} = 15$ кВт, соответствует ее содержанию порядка $2 \cdot 10^{-4}$ %, что на три порядка меньше измеренного в экспериментах около 0.1 % [65]. Мы учли ошибочное значение мощности третьей гармоники в [60] и пересчитали по формуле (19) в соответствии с теорией [60] мощность второй гармоники на основе мощности первой или третьей гармоник; сплошные оранжевые линии — соответственно сплошная толстая и тонкая оранжевые линии на рис. 3. При этом расчете мощность второй гармоники ЛСЭ оказалась на один–полтора порядка ниже измеренной на LCLS. Отметим, что формула и соответствующая теория [60] применительно к ЛСЭ LEUTL также дает мощность второй гармоники на один–два порядка ниже измеренной в экспериментах.

Другой теоретический подход использован в [61, 62]. В нем вычисляются электрическое поле излучения, распространение фронта волны в различных направлениях и другие характеристики; при этом авторы используют специфические параметры, такие как глубина модуляции электронного пучка и др., доступные только разработчикам ЛСЭ. Расчет по формуле дает результат, близкий к диапазону экспериментальных значений: оранжевая пунктирная линия на рис. 3а показывает мощность второй гармоники LCLS, рассчитанную по формуле (20), соответствующей теории в [61]. Однако в жестком

рентгеновском диапазоне по той же формуле (20) получаем мощность второй гармоники $P_2 \approx 2.5$ МВт (см. рис. 3б), т. е. 0.01 %, что меньше ожидаемого 0.04–0.1 %. С другим подходом [60], вычисляя мощность второй гармоники ЛСЭ LCLS по формуле (19), получаем в жестком рентгеновском диапазоне мощность второй гармоники $P_2 \sim 100$ –200 кВт, что еще на порядок меньше, чем по теории [61] и на два порядка ниже ожидаемого. Итак, в жестком рентгеновском диапазоне расхождение между экспериментом и расчетом по теории [60] или [61] увеличиваются почти на порядок, в то время как результаты по формулам (с учетом эффективного угла электрон-фотонного взаимодействия на длине усиления ЛСЭ) остаются в пределах экспериментальных значений.

Отметим противоречивые выводы разных авторов о причинах генерации четных гармоник в ЛСЭ. Так, авторы работы [66] заключают, что «угол отклонения увеличивает излучение второй гармоники» в ЛСЭ. Напротив, авторы [61, 62] делают вывод о том, что «полная мощность второй гармоники ЛСЭ не зависит от углов отклонения пучка от оси и даже может уменьшиться, если пучок имеет углы отклонения». Последний вывод представляется нам спорным, так как характеристики ОИ определяются свойствами физической системы зарядов и поля; выше нами аналитически показано, что именно угловые вклады в основном вызывают четные гармоники ОИ. Обсуждение и количественные оценки вкладов различных эффектов в генерацию четных гармоник даны выше. В результате анализа различных вкладов в генерацию гармоник мы приходим к выводу, что мощность четных гармоник в ЛСЭ определяется не только размером пучка и его отклонением, как считается в [60, 66], хотя центровка пучка на оси, конечно, имеет значение; например, принимая во внимание экспериментально зарегистрированное в ЛСЭ LCLS [63, 63] отклонение пучка от оси примерно до 10–15 мкм на длине последних ондуляторных секций, получаем угол отклонения, примерно соответствующий эффективному углу электрон-фотонного взаимодействия, и это дает реалистичную оценку мощности второй гармоники. Однако в других экспериментах не было зарегистрировано отклонения пучка, сравнимого с его сечением. Теоретический результат, соответствующий экспериментам, получается во всех случаях, если учесть углы электрон-фотонного взаимодействия на характерной длине усиления в ЛСЭ. Это вызывает вторую гармонику мощностью, соответствующей измеренной в экспериментах как на ЛСЭ LCLS, так

и на ЛСЭ LEUTL и на других установках. Таким образом, мы в определенном смысле подтверждаем заключение работы [66] о том, что в ЛСЭ «угол отклонения увеличивает излучение второй гармоники», замечая, что нужно учитывать эффективный угол электрон-фотонного взаимодействия, а не только отклонение от оси.

Отметим, что мощность излучения второй гармоники ЛСЭ зависит от параметров пучка и ондуляторов и напрямую не отражает то значение мощности, которое может индуцироваться основным тоном на длине волны второй гармоники, но не излучаться. Эквивалентная мощность второй гармоники за счет индуцированного банчинга может быть большой, но она не излучается, так как для второй гармоники излучение приходит в противофазе с каждого периода ондулятора. Однако если такой пучок электронов с индуцированной группировкой на длине волны второй гармоники подать в следующий ондулятор, у которого основной тон настроен в резонанс со второй гармоникой банчера, то индуцированная и эквивалентная банчингу мощность становится реальной, может быть усилена и излучена в следующих ондуляторах.

Работа ЛСЭ в режимах SASE и HLSS может быть реализована на одной установке, если использовать ондуляторы с изменяемым параметром дипольности. Ондуляторы LCLS имеют фиксированный параметр $k = 3.5$, и численное моделирование каскадного усиления второй гармоники на ЛСЭ LCLS проводилось для дополнительных ондуляторов с другим параметром k в [66]; насколько нам известно, проект не был реализован. Усиление гармоник HLSS возможно в SwissFEL, строящемся ЛСЭ LCLS II и в других установках.

7. УСИЛЕНИЕ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ В РЕНТГЕНОВСКОМ ЛСЭ SWISSFEL

Использование самозатравачного лазерного излучения гармоник (HLSS) в мягком рентгеновском диапазоне было впервые осуществлено на ЛСЭ FLASH II с ондуляторами с изменяемым параметром дипольности [67, 68]. В жестком рентгеновском диапазоне работают ЛСЭ с изменяемым параметром дипольности SACLA, SwissFEL, European XFEL, вводится в строй LCLS II. Из действующих в настоящее время ЛСЭ SACLA после апгрейда [69–76] является наиболее сильноточным; в нем течет огромный ток, $I_0 = 27$ кА, но пучок SACLA имеет большой разброс энергий: $\sigma_e \approx 0.093\%$ с $E = 6$ ГэВ [73], и $\sigma_e = 0.1\%$ с $E = 7.8$ ГэВ [69]. Оцен-

ка параметра Пирса ЛСЭ SACLA для излучения с $\lambda = 0.1$ нм дает значения $\rho_1 = 0.00077$ в группирователе и $\rho_{1 \times 2} = 0.00058$ в усилителе; условие стабильной генерации не удовлетворяется уже с начальным разбросом энергий. Если в группирователе электронов генерация возможна с начала ЛСЭ, то в усилителе второй гармоники она невозможна уже в начале усилителя даже без учета индуцированного разброса энергии. Поэтому усиление второй гармоники в ЛСЭ SACLA в настоящей конфигурации не представляется возможным. Рассмотрим ниже возможность усиления гармоник в современных ЛСЭ с малыми эмиттансом и разбросом энергий и с изменяемым параметром дипольности ондуляторов.

Рентгеновский ЛСЭ SwissFEL [77–81] излучает на длинах волн от 1.5 до 0.1 нм. Пучок имеет малый абсолютный разброс энергий $\sigma_e = 350$ кэВ; относительный разброс энергией электронов с энергией $E = 5.8$ ГэВ: $\sigma_e \approx 0.006\%$, стандартный эмиттанс $\gamma_{\epsilon_{x,y}} = 0.4$ мм·мрад. В эксперименте банчи электронов с зарядом $Q = 0.2$ нКл и энергией $E = 5.8$ ГэВ генерировали фотонные импульсы длительностью $\tau_\gamma = 24$ фс с энергией $E_\gamma = 1$ мДж на длине волны $\lambda_1 = 0.1$ нм [79]; оценка длительности электронного банча: $\tau_e = 40$ фс. Мы рассчитали теоретически мощность насыщения: $P_1 \approx 40$ ГВт; это хорошо согласуется со значением, которое получается с измеренной энергией $E_\gamma = 1$ мДж импульса длительностью $\tau_\gamma = 24$ фс. Длина насыщения SwissFEL, $L_s \approx 30$ м, меньше чем в других ЛСЭ в жестком рентгеновском диапазоне, длина усиления по нашим расчетам: $L_g \sim 1.4$ м. Из-за малого разброса энергий и эмиттанса получаем высокую мощность третьей гармоники $P_3 \approx 0.25$ ГВт, ее содержание около 0.7% близко к максимально возможному для ондуляторов с периодом $\lambda_u = 1.5$ см и параметром дипольности $k = 1.2$. Рассчитанное содержание второй гармоники в ЛСЭ SwissFEL около 0.4% определяется сечением пучка и эффективным углом электрон-фотонного взаимодействия $\bar{\theta} = \sigma_{\text{photon}}/L_{\text{gain}} \sim 6$ мкрад на длине усиления. Рассчитанная нами спектральная плотность излучения $\Delta\lambda/\lambda \sim 0.1\%$ находится в середине измеренного диапазона 0.05–0.15% [78]. Рассчитанный параметр Пирса $\rho_1 \approx 0.0005 = \delta\lambda/\lambda \approx \sqrt{\rho\lambda_u/L_s}$ примерно соответствует спектральной плотности SASE. В эксперименте с номинальным током $I_0 = 2$ кА измеренный эмиттанс пучка $\epsilon_{x,y} = 0.2$ мм·мрад, был меньше стандартного, а разброс энергий пучка равный 0.0125% больше стандартного [81].

Рассмотрим возможность излучения и усиления второй гармоники на длине волны $\lambda_2 = 0.07$ нм в

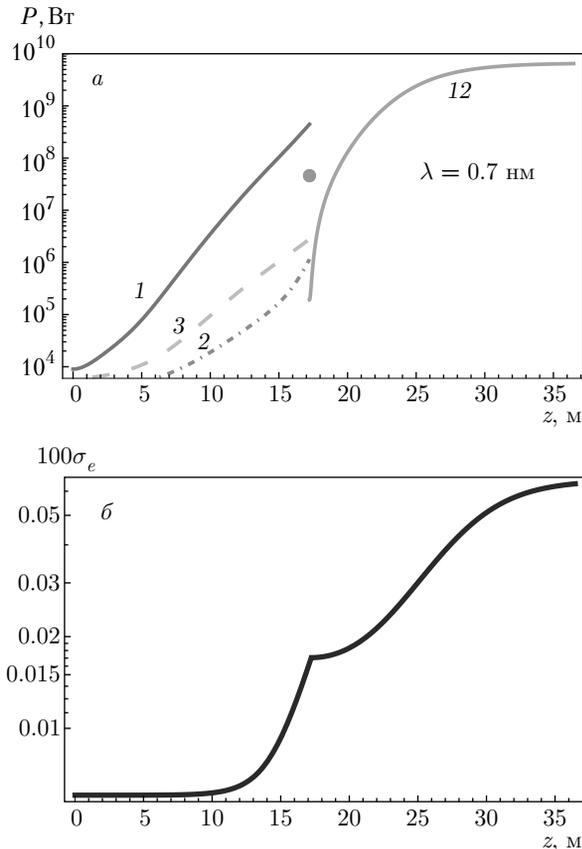


Рис. 4. *а)* Эволюция мощности гармоник ЛСЭ SwissFEL в режиме HLSS с усилением второй гармоники $\lambda = 0.07$ нм, $E = 5.8$ ГэВ, $I_0 = 2.7$ кА, $\sigma_e = 0.006\%$, $\epsilon_{x,y} = 0.4$ мм·мрад, $\beta = 15$ м. Банчер: $\lambda_1 = 0.14$ нм — красная сплошная линия 1, $\lambda_3 = 0.05$ нм — зеленая штриховая 3, $\lambda_2 = 0.07$ нм — оранжевая штрихпунктирная линия 2; усилитель второй гармоники: $\lambda_{1 \times 2} = 0.07$ нм — оранжевая сплошная линия 12. *б)* Эволюция разброса энергии пучка по длине ондуляторов ЛСЭ

ЛСЭ SwissFEL в режиме HLSS усиления самозатраченного излучения второй гармоники группирователя. Мощность второй гармоники в банчере достигает примерно 1 МВт на длине 17 м (штрихпунктирная оранжевая линия 2 на рис. 4а). Длина банчера $z_c = 17$ м выбрана, исходя из требования гарантированно стабильного усиления второй гармоники в усилителе, где параметр Пирса $\rho_{1 \times 2} \approx 0.00033$; при этом разброс энергии электронов в конце банчера с учетом индуцированного ЛСЭ вклада составляет половину параметра Пирса в усилителе: $\sigma_e(z_c) = 0.00017 = \rho_{1 \times 2}/2$ (см. рис. 4б). Банчинг основного тона индуцирует на длине волны второй гармоники эффективную мощность около 50 МВт на длине ондуляторов 17 м, обозначенную оранжевой точкой на рис. 4а. Она не излучается в банчере, где излу-

чение второй гармоники приходит в противофазе с соседних периодов ондуляторов, а излучается только мощность за счет угловых эффектов, эмиттанса и др., обозначенная штрихпунктирной линией на рис. 4а.

Диапазон изменения параметра дипольности k позволяет выбрать для ондуляторов в усилителе $k = 0.7874$, получив резонанс со второй гармоникой банчера, где $k = 1.8$. Мощность в усилителе на длине волны основного тона $\lambda = 0.07$ нм быстро растет и на чуть большей длине усиления достигает эффективного значения, индуцированного в банчере. Далее рост мощности в усилителе продолжается до насыщения; на длине ондуляторов более 35 м вторая гармоника банчера излучается с мощностью порядка 6 ГВт. Для сравнения, в режиме SASE на длине волны $\lambda = 0.07$ нм насыщение происходит примерно на 10 м дальше, чем в режиме HLSS. Отметим, что в конце банчера ЛСЭ SwissFEL индуцированная эффективная мощность второй гармоники на порядок превышает мощность третьей гармоники (ср. оранжевую точку с концом зеленой линии на рис. 4а), и это делает предпочтительным выбор второй гармоники для дальнейшего усиления. При этом в режиме усиления второй гармоники HLSS требуется меньшая длина ондуляторов, чем в режиме SASE на той же длине волны, а длина волны излучения, $\lambda = 0.07$ нм короче, чем стандартная длина волны $\lambda \sim 0.1$ нм ЛСЭ SwissFEL.

8. УСИЛЕНИЕ ГАРМОНИК В РЕНТГЕНОВСКОМ ЛСЭ LCLS-II

В строящемся ЛСЭ LCLS-II используется пучок электронов с энергией $E = 4$ ГэВ для генерации рентгеновского излучения на длинах волн 6.2–0.25 нм (см. [82]). Для более жесткого излучения с длиной волны менее ангстрема планируется модификация LCLS-II-HE с пучком энергии 4 ГэВ. Численное моделирование LCLS-II проводилось в работах [82–85]. В LCLS-II используются ондуляторы с изменяемым параметром дипольности. Для генерации рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 1.2$ –0.25 нм используются ондуляторы с периодом $\lambda_u = 2.6$ см, полем примерно до 1.1 Тл и минимальным зазором около 7 мм. В ЛСЭ предполагается довольно слабый ток менее 1 кА, и малые эмиттансы и разбросы энергий; с током $I \sim 400$ А эмиттансы минимальны, $\epsilon_{x,y} \approx 0.17$ мкм, и $\sigma_e \approx 0.4$ МэВ, с током $I \sim 850$ А минимален разброс энергий, $\sigma \approx 0.36$ МэВ, и $\epsilon_{x,y} \approx 0.45$ мкм [82–85]. Это обеспечит малые потери и возможность использовать гар-

Таблица 2. Параметры электронного пучка и плоского ондулятора LCLS-II

Параметр	Значение	Параметр	Значение
γ	7828	I_{peak}	850 А
$\gamma\epsilon_{x,y}$	0.45 мкм · рад	$\theta_{div} = \sqrt{\sigma/\beta}$	2 мкрад
$\sigma_{x,y} = \sqrt{\sigma\beta}$	27 мкм	σ_e	$0.1 \cdot 10^{-3}$
$\theta_{e-\gamma}$	13 мрад	$\beta_{x,y}$	13 м

Примечание. Пучок электронов LCLS-II энергии $E = 4$ ГэВ.

Параметр	Значение	Параметр	Значение
λ_u	2.6 см	$k_{amp2harm}$	1.9108
$k_{buncher}$	3.0516	$k_{amp3harm}$	1.3307

Примечание. Ондулятор LCLS-II.

моники как в LCLS-II SASE, так и в режиме усиления HLSS. Исследуем возможное усиление второй и третьей гармоник банчера в выделенном усилителе-излучателе. Некоторые данные для моделирования представлены в табл. 2.

Результаты аналитического расчета эволюции мощности гармоник ЛСЭ HLSS с усилением второй гармоники на длине волны $\lambda_2 = 0.6$ нм и третьей гармоники на длине волны $\lambda_3 = 0.4$ нм представлены соответственно на рис. 5а и 5б. Отметим, что реальная мощность излучения второй гармоники банчера (оранжевая штрихпунктирная линия на рис. 5а) гораздо меньше индуцированной эффективной мощности на длине волны второй гармоники (пунктирная оранжевая линия на рис. 5а). Усиление второй гармоники происходит в ондуляторах усилителя, где основной тон резонирует со второй гармоникой банчера и достигает насыщения на длине около 30 м с мощностью около 3 ГВт. Отметим, что на длине ондуляторов 19 м индуцированный банчинг на длине второй гармоники создает эффективное значение мощности (пунктирная оранжевая линия на рис. 5а) только немного больше мощности третьей гармоники (зеленая штриховая линия на рис. 5а, 5б). Вторая или третья гармоники могут быть усилены в следующих ондуляторах, настроенных в резонанс. Основной тон усилителя, например, третьей гармоники $\lambda_{1 \times 3} = 0.4$ нм достигает насыщения на длине $L_s = 35$ м с мощностью $P_{1 \times 3} \approx 3$ ГВт (см. рис. 5б); мощность насыщения второй гармоники $\lambda_{1 \times 2} = 0.6$ нм на длине $L_s \approx 30$ м примерно такая же (см. рис. 5а).

Отметим также, что использовать вторую гармонику целесообразно только в самом конце банчера, так как банчинг на ее длине волны индуцируется основным тоном; его значение в начале ЛСЭ очень мало. Более того, укоротив банчер всего на несколько метров максимально возможного и создав тем самым запас для роста индуцированного разброса энергии в следующих ондуляторах для умножения гармоник, получаем на выходе короткого банчера значение мощности третьей гармоники больше, чем эффективное значение мощности второй гармоники за счет банчинга, индуцированного основным тоном на ее длине волны. Это видно на рис. 5а: значения эффективной мощности второй гармоники на длине банчера 15 м (см. оранжевую пунктирную линию) меньше мощности третьей гармоники на той же длине ондуляторов (см. зеленую штриховую линию). Таким образом, если необходимо сократить длину банчера, например, для возможного дополнительного роста разброса энергий, индуцированного ЛСЭ в следующих каскадах, то использование второй гармоники в коротком банчере становится нецелесообразным. Мощность третьей гармоники оказывается выше, чем эффективная мощность второй, и использование третьей гармоники тогда предпочтительно.

9. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В настоящей работе исследована генерация гармоник, в особенности четных, в ондуляторах рентгеновских ЛСЭ. Для спонтанного излучения прове-

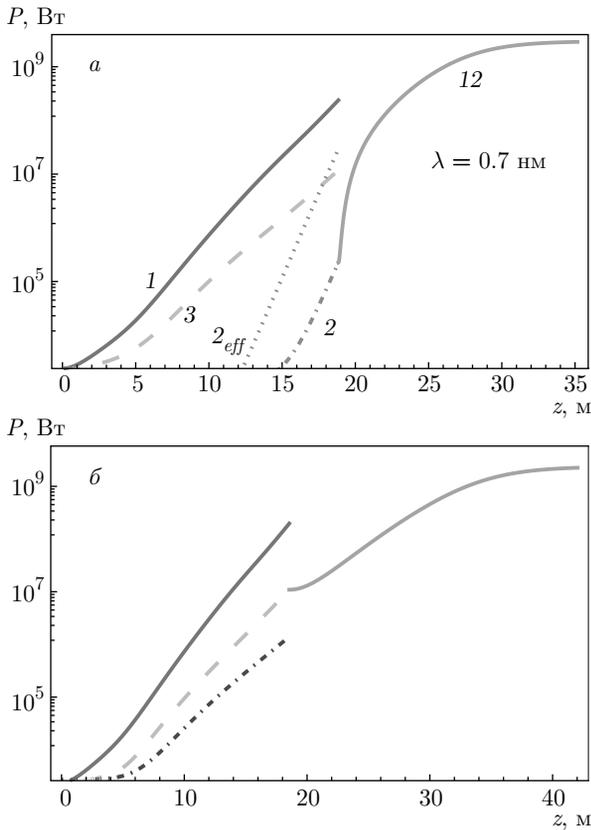


Рис. 5. Эволюция мощности гармоник ЛСЭ LCLS II в режиме HLSS усиления второй гармоники (а) и третьей гармоники (б); энергия электронов $E = 4$ ГэВ, разброс энергий $\sigma_e = 0.009\%$, ток $I_0 = 850$ А, эмиттанс $\epsilon_{x,y} = 0.45$ мм·мрад, $\beta = 13$ м. Мощность в ондуляторах банчера: основной тон $\lambda_1 = 1.2$ нм — красная сплошная линия 1, третья гармоника $\lambda_3 = 0.4$ нм — зеленая штриховая линия 3, реальная мощность второй гармоники $\lambda_2 = 0.6$ нм — оранжевая штрихпунктирная линия 2, эффективная мощность за счет банчинга, индуцированного основным тоном на длине волны $\lambda_2 = 0.6$ нм — оранжевая пунктирная линия 2_{eff} , пятая гармоника $\lambda_5 = 0.24$ нм — синяя штрихпунктирная линия 5; усилитель второй гармоники $\lambda_{1 \times 2} = 0.6$ нм — оранжевая сплошная линия 12, усиление третьей гармоники $\lambda_{1 \times 3} = 0.4$ нм — оранжевая сплошная линия 13

ден аналитический расчет и численное моделирование SPECTRA; для излучения однопроходных ЛСЭ проведены расчеты по различным теориям нескольких авторов и аналитический расчет с коэффициентами Бесселя (9), где учтены все основные характеристики ЛСЭ; проведено сравнение результатов с данными хорошо документированных экспериментов ЛСЭ LCLS.

Полученные численные и аналитические спектральные распределения излучения согласуются друг с другом. В аналитических расчетах учте-

ны и отдельно исследованы вклады эффектов дифракции, эмиттанса, бетатронных колебаний и угловых эффектов в пучке конечного сечения, а также их влияние на излучение гармоник на оси и под углом электрон-фотонного взаимодействия ЛСЭ. Полученные результаты показали, что вторая и другие четные гармоники в ондуляторах рентгеновских ЛСЭ происходят в основном из-за угловых эффектов в пучке конечного сечения. Вклад бетатронных колебаний в генерацию четных гармоник ОИ в узких пучках электронов высоких энергий значительно меньше чем вклад расходимости. Рассматривая спектр под эффективным углом электрон-фотонного взаимодействия, находим, что вклад в мощность четных гармоник от эмиттанса в целом примерно на порядок меньше вклада от угла электрон-фотонного взаимодействия, а вкладом бетатронных колебаний можно пренебречь.

В излучении однопроходного ЛСЭ четные гармоники появляются за счет нескольких факторов. Нами аналитически показано, что бетатронные колебания дают ничтожный вклад в мощность четных гармоник ЛСЭ. Конечное сечение пучка и его расходимость дают около процента экспериментально измеренной мощности второй гармоники ЛСЭ. Отклонение пучка электронов от оси ондуляторов ЛСЭ измерено экспериментально и в некоторых случаях может быть сравнимым с сечением пучка; это может вызывать четные гармоники с мощностью, близкой к измеренной. Таким образом, в некоторых случаях существенное отклонение пучка может давать определяющий вклад в генерацию четных гармоник в ЛСЭ. Реальная мощность второй гармоники, рассчитанная с учетом эффективного угла электрон-фотонного взаимодействия на длине усиления ЛСЭ в пучке конечного сечения, во всех случаях соответствует экспериментальным значениям.

Мощность второй гармоники, рассчитанная по формулам работ [60, 66], отличается от измеренной в LCLS на один-два порядка; оценка мощности по формулам работ [61, 62] отличается от экспериментальных данных LCLS не более чем на порядок. Представления о физических причинах генерации четных гармоник ЛСЭ вследствие углов отклонения пучка от оси, данные в [60, 66], являются неполными. Противоречивым представляется вывод авторов работ [61, 62] о том, что углы отклонения пучка могут уменьшить мощность четных гармоник. Нами аналитически показано, что угловые эффекты электрон-фотонного взаимодействия порождают четные гармоники излучения ЛСЭ с мощностью, соответствующей экспериментальным значениям.

Теоретическое исследование генерации гармоник в каскадном рентгеновском ЛСЭ показало, что вторая гармоника может быть усилена почти до мощности основного тона и излучена в следующих каскадах ондуляторов, настроенных в резонанс с ней. Эффективная мощность второй гармоники происходит от банчинга на ее длине волны, индуцированного первой гармоникой в нелинейном режиме; эта мощность не излучается, она значительно больше реальной мощности второй гармоники в банчере за счет угловых и других эффектов. Эффективная мощность, соответствующая банчингу, является затравочной для усилителя на резонирующей длине волны его основного тона. Мы показали, что для усиления второй гармоники в усилителе целесообразно использовать максимально длинный банчер, так как эффективная мощность индуцируется только в нелинейном режиме и растет как квадрат мощности основного тона. В коротком банчере мощность третьей гармоники в режиме ее независимого роста может превышать эффективное значение мощности второй гармоники. В ЛСЭ SwissFEL и LCLS-II нами теоретически продемонстрирована возможность усиления второй и третьей гармоник банчера в каскадах усилителя с самозатравочным лазерным излучением гармоник HLSS с использованием ондуляторов с изменяемым параметром дипольности. Длина волны при этом в ЛСЭ LCLS-II составляет 0.4 нм и 0.6 нм соответственно для второй и третьей гармоник, а в ЛСЭ SwissFEL равна 0.07 нм для второй гармоники. Мощность гармоник на выходе усилителя составляет 3–6 ГВт, полная длина насыщения ондуляторов равна 30–35 м для обоих ЛСЭ.

Проведенное теоретическое исследование объясняет физические причины генерации четных гармоник: для ОИ это конечный эмиттанс, для излучения однопроходного ЛСЭ это угловые эффекты электрон-фотонного взаимодействия и в некоторых случаях отклонение пучка от оси. Продемонстрированы возможности использования, усиления и излучения гармоник ЛСЭ с изменяемым параметром дипольности. Полученные результаты могут использоваться в работающих, строящихся и планируемых ЛСЭ с целью уменьшения размеров и стоимости установок и генерации высокочастотного излучения с более коротким блоком ондуляторов и электронами с меньшей энергией.

Благодарности. Авторы благодарят А. Борисова, В. Багрова и А. Лобанова за советы и обсуждения математических и физических аспектов излучения релятивистских зарядов.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Л. Гинзбург, Изв. АН СССР, Серия физ. 11, 165 (1947). *Isvestia Akademii Nauk SSSR (Fizika)*, **11N2**, 1651 (1947).
2. H. Motz, *J. Appl. Phys.* **22**, 527 (1951).
3. H. Motz, W. Thon, and R. N. J. Whitehurst, *Appl. Phys.* **24**, 826 (1953).
4. J. M. Madey, *J. Appl. Phys.* **42**, 1906 (1971).
5. B. W. J. McNeil and N. R. Thompson, *Nature Photonics* **4**, 814 (2010).
6. C. Pellegrini, A. Marinelli, and S. Reiche, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 015006 (2016).
7. Z. Huang and K. J. Kim, *Phys. Rev. ST-AB* **10**, 034801 (2007).
8. E. L. Saldin, E. A. Schneidmiller, and M. V. Yurkov, *The Physics of Free Electron Lasers*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2000).
9. R. Bonifacio, C. Pellegrini, and L. Narducci, *Opt. Comm.* **50**, 373 (1984), DOI:10.1016/0030-4018(84)90105-6.
10. P. Schmüser, M. Dohlus, J. Rossbach, and C. Behrens, *Free-Electron Lasers in the Ultraviolet and X-Ray Regime*, Springer Tracts in Modern Physics, 258, Cham (ZG), Springer International Publishing (2014).
11. C. Pellegrini, *Phys. Scripta* **169**, 014004 (2017).
12. G. Margaritondo and P. R. Ribic, *J. Synchrotron Rad.* **18**, 101 (2011).
13. G. Margaritondo, *Rivista del Nuovo Cimento* **40**, 411 (2017).
14. G. Dattoli, P. L. Ottaviani, and S. Pagnutti, *J. Appl. Phys.* **97**, 113102 (2005).
15. F. De Martini, in *Laser Handbook*, Vol. 6, ed. by W. B. Colson, C. Pellegrini, and A. Renieri, North-Holland, Amsterdam (1990), p. 195.
16. R. Bonifacio, L. De Salvo, and P. Pierini, *Nucl. Instrum. A* **293**, 627 (1990).
17. Z. Huang and K.-J. Kim, *Phys. Rev. E* **62**, 7295 (2000).
18. T. Tanaka and H. Kitamura, *J. Synchrotron Rad.* **8**, 1221 (2001).
19. T. Tanaka, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **17**, 060702 (2014).

20. T. Tanaka, *Opt. Lett.* **42**, 1576 (2017).
21. T. Tanaka, *Phys. Rev. Accel. Beams.* **21**, 110704 (2018).
22. J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York (1991).
23. V. I. Alekseev and E. G. Bessonov, in *Proc. of the 6th All-Union Workshop on Use of Synchrotron Radiation SR-84*, IYaF SO AN SSSR, Novosibirsk (1984), p. 92.
24. A. A. Kolomenskii, I. V. Sinil'shchikova, E. G. Bessonov et al., *Tr. FIAN* **214**, 193 (1993). <http://proceedings.lebedev.ru/0214-1993/>
25. E. G. Bessonov, PhIAS Preprint No. 18, *Phys. Inst. Acad. Sci. USSR, Moscow* (1982).
26. E. G. Bessonov, *Nucl. Instr. Meth. A* **282**, 405 (1989).
27. V. I. Alexeev and E. G. Bessonov, *Nucl. Instr. Meth. A* **308**, 140 (1991).
28. V. G. Bagrov, V. F. Zal'mezh, M. M. Nikitin, and V. Y. Epp, *Nucl. Instr. Meth. A* **261**, 54 (1987).
29. B. Prakash, V. Huse, M. Gehlot, G. Mishra, and S. Mishra, *Optik* **127**, 1639 (2016).
30. F. Bazouband and B. Maraghechi, *J. Plasma Phys.* **81**, 905810305 (2015).
31. D. F. Alferov, Yu. A. Bashmakov, and E. G. Bessonov, *Zh. Tekh. Fiz.* **43**, 2126 (1973) [*Sov. Phys.-Tech. Phys.* **18**, 1336 (1974)].
32. D. F. Alferov, Y. A. Bashmakov, E. G. Bessonov, P. A. Cherenkov, and K. A. Belovintsev, *Part. Accel.* **9**, 223 (1979).
33. D. F. Alferov, Yu. A. Bashmakov, and P. A. Cherenkov, *Sov. Phys. Usp.* **32**, N3 200 (1989).
34. N. A. Vinokurov and E. B. Levichev, *Phys.-Usp.* **58**, 850 (2015).
35. Y. A. Bashmakov and E. G. Bessonov, *Radiation Effects* **66**, 85 (1982).
36. K. Zhukovsky, *J. Electromagn. Waves Appl.* **28**, 1869 (2014).
37. K. V. Zhukovsky, *J. Electromagn. Waves Appl.* **29**, 132 (2015).
38. G. Dattoli, V. V. Mikhailin, and K. Zhukovsky, *J. Appl. Phys.* **104**, 124507 (2008).
39. G. Dattoli, V. V. Mikhailin, and K. V. Zhukovsky, *Mosc. Univ. Phys. Bull.* **64**, 507 (2009).
40. K. V. Zhukovsky, *J. Math. Anal. Appl.* **446**, 628 (2017).
41. K. Zhukovsky and I. Fedorov, *Symmetry* **13**(1), 135 (2021).
42. K. Zhukovsky, *Results in Physics* **13**, 102248 (2019).
43. K. Zhukovsky and A. Kalitenko, *J. Synchrotron Rad.* **26**, 159 (2019).
44. K. V. Zhukovsky, *Russian Phys. J.* **62**, 1043 (2019).
45. K. Zhukovsky, *J. Synchrotron Rad.* **27**, 1648 (2020).
46. А. М. Калитенко, К. В. Жуковский, *ЖЭТФ* **157**, 394 (2020).
47. К. В. Жуковский, *УФН* **191**, 318 (2021).
48. K. Zhukovsky, *Opt. Laser Technol.* **131**, 106311 (2020).
49. L. Giannessi, in *Synchrotron Light Sources and Free-Electron Lasers*, ed. by E. J. Jaeschke et al., Springer International Publishing Switzerland 2016. DOI:10.1007/978-3-319-14394-1_3.
50. K.-J. Kim, Z. Huang, and R. Lindberg, *Synchrotron Radiation and Free Electron Lasers; Principles of Coherent X-Ray Radiation*, Cambridge University Press, Cambridge CB2 8BS, United Kingdom (2017). DOI:10.1017/9781316677377.
51. R. Bonifacio, C. Pellegrini, and L. M. Narducci, *Opt. Comm.* **50**(6), 373 (1984).
52. G. Dattoli and P. L. Ottaviani, *Opt. Comm.* **204**, 283 (2002).
53. G. Dattoli, L. Giannessi, P. L. Ottaviani, and C. Ronisvalle, *J. Appl. Phys.* **95**, 3206 (2004).
54. G. Dattoli, V. V. Mikhailin, P. L. Ottaviani, and K. Zhukovsky, *J. Appl. Phys.* **100**, 084507 (2006).
55. K. Zhukovsky and A. Kalitenko, *Russ. Phys. J.* **62**, 354 (2019).
56. K. V. Zhukovskiy and A. M. Kalitenko, *Radiophys. Quant. Electr.* **62**, 52 (2019).
57. К. В. Жуковский, *Вестник МГУ Физика Астрономия № 5*, 60 (2019).
58. M. Xie, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **445**, 59 (2000).
59. M. Xie, in *Proc. of the 1995 Particle Accelerator-Conference*, IEEE, Piscataway, NJ (1995), p. 183.
60. Z. Huang and K.-J. Kim, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **475**, 112 (2001).
61. G. Geloni, E. Saldin, E. Schneidmiller, and M. Yurkov, *Opt. Comm.* **271**, 207 (2007).

62. E. Saldin, E. Schneidmiller, and M. Yurkov, Nucl. Instr. and Meth. A **539**, 499 (2005).
63. P. Emma, R. Akre, J. Arthur et al., Nature, Photonics **4**, 641 (2010).
64. P. Emma, *Proc. of PAC09*, Vancouver, BC, Canada (2009).
65. D. Ratner, A. Brachmann, F. J. Decker et al., Phys. Rev. ST-AB **14**, 060701 (2011).
66. Z. Huang and S. Reiche, in: *Proc. of the FEL 2004 Conference*, ed. by R. Bakker et al., Trieste, Italy (2004), p. 201.
67. B. Faatz et al., Appl. Sci. **7**, 1114 (2017).
68. E. A. Schneidmiller et al., Phys. Rev. AB **20**, 020705 (2017).
69. Ichiro Inoue, Nature Photon. **13**, 319 (2019).
70. S. Owada, K. Togawa, T. Inagaki et al., J. Synchrotron Rad. **25**, 282 (2018).
71. I. Tetsuya, A. Hideki, A. Takao, A. Yoshihiro, A. Noriyoshi, B. Teruhiko, E. Hiroyasu, F. Kenji, F. Toru, F. Yukito et al., Nature Photonics **6**, 540 (2012).
72. <http://xfel.riken.jp/eng/users/bml02-11.html>
73. H. Ego, Proc. of IPAC2016, Busan, Korea, MOPMW009.
74. T. Ishikawa et al., Nature Photon. **6**, 540 (2012).
75. K. Tono et al., J. Synchrotron Rad. **26**, 595 (2019).
76. K. Tono et al., New J. Phys. **15**, 083035 (2013).
77. C. J. Milne et al., Appl. Sci. **7**, 720 (2017).
78. R. Abela et al., Struct. Dyn. **4**, 061602 (2017).
79. P. Juranic et al., J. Synchrotron Rad. **26**, 906 (2019).
80. R. Abela et al., J. Synchrotron Rad. **26**, 1073 (2019).
81. E. Prat et al., Nature Photonics **14**, 748 (2020).
82. https://portal.slac.stanford.edu/sites/lcls_public/lcls_ii/acc_phy/Lists/technotes/Public_view.aspx
83. T. O. Raubenheimer, 60th ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on Future Light Sources FLS2018, Shanghai, China (2018), DOI:10.18429/JACoW-FLS2018-MOP1WA02.
84. G. Marcus and J. Qiang, *LCLS-II SCRF start-to-end simulations and global optimization as of September 2016*, SLAC National Accelerator Lab, LCLS-II TN-17-04, February (2017).
85. G. Marcus and J. Qiang, *LCLS-II SCRF start-to-end simulations as of August 2015*, SLAC National Accelerator Lab, LCLS-II TN-15-33, February (2017).

РАССЕЯНИЕ СВЕТА ОДНОМЕРНЫМ ПОГЛОЩАЮЩИМ СЛОЕМ С НЕПРЕРЫВНЫМ ПОКАЗАТЕЛЕМ ПРЕЛОМЛЕНИЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ДИЭЛЕКТРИКАМИ

Н. А. Ванюшкин^{}, А. А. Геворгян, С. С. Голлик*

*Дальневосточный федеральный университет
690922, Владивосток, Россия*

Поступила в редакцию 26 февраля 2022 г.,

после переработки 12 марта 2022 г.

Принята к публикации 12 апреля 2022 г.

Рассмотрено прохождение плоской электромагнитной волны через одномерный поглощающий слой, который зажат между двумя, в общем случае различными, полубесконечными диэлектриками. На основе метода трансфер-матрицы и метода, основанного на решении задачи Коши для системы из двух дифференциальных уравнений первого порядка, были получены спектры пропускания, отражения и поглощения падающей волны, а также распределения интенсивности электрического поля внутри поглощающего слоя.

DOI: 10.31857/S0044451022080041

EDN: EFYUUG

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача распространения электромагнитных волн в неоднородных слоистых средах часто встречается во многих приложениях. В особенности важную роль она играет при разработке различных слоистых фотонных структур, включая диэлектрические зеркала [1, 2], оптические датчики [3, 4], метаматериалы [5, 6], устройства на основе жидких кристаллов [7, 8] и другие [9, 10]. По этой причине было разработано множество методов решения этой задачи, которые включают в себя прямое решение волнового уравнения [11], классические методы трансфер-матрицы [12, 13] и функции Грина [14, 15], метод инвариантного погружения [16] и другие.

Метод трансфер-матрицы заслуживает особого внимания, поскольку является одним из самых популярных методов, а также используется при выводе многих других методов. Он особенно эффективен при работе со слоистыми средами, поскольку трансфер-матрица, связывающая амплитуды полей на разных границах раздела, может быть легко получена для каждого однородного слоя. В этом случае метод трансфер-матрицы очень удобен как для численных расчетов, так и для аналитического

рассмотрения. Кроме того, этот метод может быть распространен на среды с неоднородными слоями, например, с линейным или параболическим профилем.

Метод функции Грина также часто используется, особенно при решении задач для 2D- и 3D-структур. Он также позволяет вычислить фотонную плотность состояний внутри исследуемого слоя, что является полезным инструментом при анализе различных фотонных структур. Стоит отметить, что каждый из упомянутых методов имеет свои недостатки и ограничения, а потому продолжают появляться новые методы [17–21], которые более оптимизированы с точки зрения численных вычислений или позволяют упростить аналитические выражения для задач с определенными условиями.

Ранее был предложен [22–24] новый метод нахождения коэффициентов пропускания и отражения для неоднородного слоя с непрерывной зависимостью показателя преломления, который основан на решении системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Среди преимуществ можно привести его применимость для среды с произвольной непрерывной зависимостью показателя преломления от координаты. В частности, в методе, разработанном в работе [24], предполагается, что неоднородный слой граничит с двумя диэлектриками, показатели преломления кото-

^{*} E-mail: vaniuschkin.nick@ya.ru

рых совпадают со значениями внутри слоя на соответствующих границах, благодаря чему достигается непрерывность коэффициента преломления n на обеих границах, а также отсутствие вклада границ в отражение проходящей волны. Это упрощает решение задачи рассеяния и нахождения распределения поля внутри слоя в упомянутых выше условиях, однако часто на практике условие непрерывности показателя преломления на границах слоя не выполняется. Поэтому необходимо дополнительно учитывать рассеяние волн на границах.

Подобная проблема уже рассматривалась другими авторами, например, в работе [25], однако там, в частности, предполагалось отсутствие поглощения и усиления излучения внутри среды, которые требуют отдельного учета при выводе выражений. В настоящей работе мы получим выражения для коэффициентов отражения и пропускания, а также распределения интенсивности электрического поля внутри неоднородного слоя с поглощением (усилением), после чего применим полученные формулы при решении различных задач.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДОЛОГИЯ

Сначала рассмотрим задачу рассеяния плоской световой волны на неоднородном одномерном слое (рис. 1), который имеет бесконечную протяженность вдоль осей x и y и расположен между плоскостями $z = 0$ и $z = L$, а его показатель преломления n является произвольной непрерывной функцией только z . Допустим также, что плоскость падения совпадает с плоскостью xz , а волна падает под углом α к нормали границы слоя, которая совпадает с плоскостью xy . Считаем, что среда слоя изотропная и немагнитная ($\mu = 1$). Также предположим отсутствие поглощения в среде ($\text{Im } n \equiv 0$). Области $z < 0$ и $z > L$ заполнены однородными диэлектриками с показателями преломления соответственно n_l и n_r .

Напряженность электрического поля падающей, отраженной и прошедшей волн обозначим соответственно \mathbf{E}_i , \mathbf{E}_r и \mathbf{E}_t . Эти поля представимы в виде

$$\mathbf{E}_{i,r,t} = E_{i,r,t}^s \mathbf{n}_s + E_{i,r,t}^p \mathbf{n}_p = \begin{pmatrix} E_{i,r,t}^s \\ E_{i,r,t}^p \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где \mathbf{n}_s и \mathbf{n}_p — единичные орты s - и p -поляризации, $E_{i,r,t}^s$ и $E_{i,r,t}^p$ — соответствующие амплитуды падающей, отраженной и прошедших волн. Комплексные

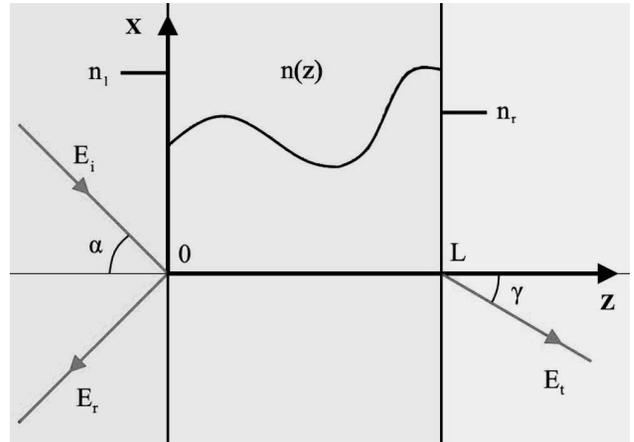


Рис. 1. Прохождение плоской электромагнитной волны через изотропный 1D-слой с произвольной зависимостью показателя преломления

коэффициенты пропускания и отражения для s - и p -волн могут быть записаны в виде

$$r^{s,p} = \frac{E_r^{s,p}}{E_i^{s,p}}, \quad t^{s,p} = \frac{E_t^{s,p}}{E_i^{s,p}}. \quad (2)$$

2.1. Неоднородный слой с непрерывным показателем преломления на границах

В соответствии с подходом, разработанным ранее [24], комплексные амплитудные коэффициенты $t^{s,p}$ и $r^{s,p}$ для слоя с показателем преломления $n(z)$, который граничит с обеих сторон с изотропными диэлектриками с показателями преломления $n_l = n(0)$ и $n_r = n(L)$, могут быть представлены в виде

$$t^{s,p} = \frac{2 \exp(-ikL)}{Q^{s,p}(L) + F^{s,p}(L)}, \quad (3)$$

$$r^{s,p} = \frac{(Q^{s,p}(L) - F^{s,p}(L))^*}{Q^{s,p}(L) + F^{s,p}(L)},$$

где символ «*» обозначает комплексное сопряжение, $k(z) = (2\pi/\lambda)n(z) \cos \beta(z)$, $\beta(z)$ — угол преломления, λ — длина волны падающего излучения. Функции $Q^{s,p}$ и $F^{s,p}$ являются решением системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dF^{s,p}}{dz} = -ikQ^{s,p} + A^{s,p} \frac{1}{k} \frac{dk}{dz} F^{s,p}, \quad (4)$$

$$\frac{dQ^{s,p}}{dz} = -ikF^{s,p} + B^{s,p} \frac{1}{k} \frac{dk}{dz} Q^{s,p} \quad (5)$$

с начальными условиями

$$F^{s,p}(0) = 1, \quad Q^{s,p}(0) = 1.$$

В системе уравнений (4), (5)

$$\frac{dk}{dz} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{1}{\cos\beta} \frac{dn}{dz}, \quad (6)$$

$$A^s = 1, \quad B^s = 0, \quad A^p = \cos^2\beta, \quad B^p = \sin^2\beta.$$

Полное поле в каждой из сред может быть представлено следующим образом:

$$\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r, \quad \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_{in}, \quad \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_t, \quad (7)$$

где индексы «0», «1» и «2» обозначают поля, соответствующие средам слева от 1D-слоя фотонного кристалла, внутри слоя и справа от слоя. Полное поле E_{in} внутри 1D-слоя связано с остальными полями (1) через граничные условия. Для E_{in} имеем

$$E_{in}^{s,p}(z) = \frac{k(0)}{k(L)} [(F^{s,p}(z))^* + r^{s,p} F^{s,p}(z)] E_i^{s,p}. \quad (8)$$

Наконец, интенсивность электрического поля в слое определяется как

$$I_{in}^{s,p}(z) = |E_{in}^{s,p}(z)|^2. \quad (9)$$

Теперь предположим, что внутри слоя присутствует поглощение (усиление) излучения ($\text{Im } n \neq 0$). В соответствии с результатами работы [26], чтобы правильно учесть поглощение (или усиление) излучения, необходимо во всех формулах заменить комплексное сопряжение на инверсию волнового вектора $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. Тогда выражения (3) и (8) примут вид

$$\begin{aligned} t_k^{s,p} &= \frac{2 \exp(-ikL)}{Q_k^{s,p}(L) + F_k^{s,p}(L)}, \\ r_k^{s,p} &= \frac{Q_{-k}^{s,p}(L) - F_{-k}^{s,p}(L)}{Q_k^{s,p}(L) + F_k^{s,p}(L)}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$E^{s,p}(z) = \frac{k(0)}{k(L)} [F_{-k}^{s,p}(z) + r_k^{s,p} F_k^{s,p}(z)] E_i^{s,p}. \quad (11)$$

Здесь функции $Q_k^{s,p}$ и $F_k^{s,p}$ являются решением системы (4), (5), а функции $Q_{-k}^{s,p}$ и $F_{-k}^{s,p}$ — решениями системы уравнений, которая получается из (4), (5) после замены $k \rightarrow -k$.

2.2. Учет отражения на границах слоя

Напомним, что до сих пор мы рассматривали ситуацию, когда показатель преломления непрерывен на границах слоя, т.е. $n_l = n(0)$ и $n_r = n(L)$. Это условие зачастую не выполняется на практике, например, когда слой граничит с обеих сторон с воздухом ($n_l = n_r = 1$). Поэтому важно обобщить данный метод на случай произвольных сред слева

и справа от неоднородного слоя. Сделать это можно, например, при помощи метода сложения слоев Амбарцумяна [27, 28] или метода трансфер-матрицы [12, 13]. Приведем здесь выкладки для метода трансфер-матрицы.

Трансфер-матрица $M^{s,p}$ всей структуры, которая связывает между собой амплитуды падающей, отраженной и прошедшей волн, может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} M^{s,p} &= \frac{k_l}{k_r} \begin{pmatrix} 1/t_r^{s,p} & -r_r^{s,p}/t_r^{s,p} \\ -r_r^{s,p}/t_r^{s,p} & 1/t_r^{s,p} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 1/t_{-k}^{s,p} & -r_{-k}^{s,p}/t_{-k}^{s,p} \\ -r_{-k}^{s,p}/t_{-k}^{s,p} & 1/t_{-k}^{s,p} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 1/t_l^{s,p} & -r_l^{s,p}/t_l^{s,p} \\ -r_l^{s,p}/t_l^{s,p} & 1/t_l^{s,p} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

Вторая матрица определяет изменение амплитуды поля при распространении внутри неоднородного слоя, а первая и третья — изменения амплитуды поля при отражении соответственно от правой и левой границ. Коэффициенты в первой и третьей матрицах легко получаются с помощью формул Френеля:

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_l^s} &= \frac{k_l + k(0)}{2k_l}, & \frac{r_l^s}{t_l^s} &= \frac{k_l - k(0)}{k_l + k(0)}, \\ \frac{1}{t_r^s} &= \frac{k(L) + k_r}{2k(L)}, & \frac{r_r^s}{t_r^s} &= \frac{k(L) - k_r}{k(L) + k_r}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $k_l = (2\pi/\lambda)n_l \cos \alpha$ и $k_r = (2\pi/\lambda)n_r \cos \gamma$. Выражения для p -поляризации получаются аналогично. С другой стороны, матрица $M^{s,p}$ может быть выражена через коэффициенты отражения и пропускания всей структуры:

$$M^{s,p} = \frac{k_l}{k_r} \begin{pmatrix} 1/T_{-k}^{s,p} & -R_{-k}^{s,p}/T_{-k}^{s,p} \\ -R_{-k}^{s,p}/T_{-k}^{s,p} & 1/T_{-k}^{s,p} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Таким образом, вычислив матрицу (12) и приравняв ее матрице (14), мы можем получить искомые величины $T_k^{s,p}$ и $R_k^{s,p}$. Приведем здесь явные выражения для s -поляризации:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_k^s} &= \frac{(k_l - k(0)) Q_{-k}^s(L) + (k_l + k(0)) Q_k^s(L)}{2k_l} + \\ &+ \frac{k_r (k(0) - k_l) F_{-k}^s(L) + k_r (k(0) + k_l) F_k^s(L)}{2k(L) k_l}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} R_k^s &= 1 - \left[\frac{k(0) k_r F_k^s(L) - k_l k_r F_{-k}^s(L)}{k(L) k_l} + \right. \\ &\left. + \frac{k(0)}{k_l} (Q_k^s(L) - Q_{-k}^s(L)) \right] T_k^s. \end{aligned} \quad (16)$$

Схожим образом можно получить выражение для распределения поля внутри неоднородного слоя. Для этого выразим амплитуды волны в точке z внутри слоя ($0 < z < L$) через поле в точке $z = 0$:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} E_+^{s,p}(z) \\ E_-^{s,p}(z) \end{pmatrix} = \\ & = \frac{k_l}{k(z)} \begin{pmatrix} 1/t_{-k}^{s,p}(z) & -r_{-k}^{s,p}(z)/t_{-k}^{s,p}(z) \\ -r_k^{s,p}(z)/t_k^{s,p}(z) & 1/t_k^{s,p}(z) \end{pmatrix} \times \\ & \times \begin{pmatrix} 1/t_l^{s,p} & -r_l^{s,p}/t_l^{s,p} \\ -r_l^{s,p}/t_l^{s,p} & 1/t_l^{s,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R_k^{s,p} \end{pmatrix} E_i^{s,p}. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $t_k^{s,p}(z)$ и $r_k^{s,p}(z)$ — коэффициенты пропускания и отражения для части слоя толщиной z , $E_i^{s,p}$ — амплитуда поля падающей волны в точке $z = 0$, $E_+^{s,p}(z)$ и $E_-^{s,p}(z)$ — амплитуды волн, распространяющиеся внутри слоя соответственно вправо и влево. Амплитуда полного поля в точке z определяется как сумма волн, $E^{s,p}(z) = E_+^{s,p}(z) + E_-^{s,p}(z)$:

$$\begin{aligned} E^s(z) = & \frac{(k(0)+k_l) F_{-k}^s(z) + (k(0) - k_l) F_k^s(z)}{2k(z)} + \\ & + \frac{(k(0) - k_l) F_{-k}^s(z) + (k(0) + k_l) F_k^s(z)}{2k(z)} R_k^s. \end{aligned} \quad (18)$$

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В данном разделе мы применим наш модифицированный метод для двух задач рассеяния плоской волны на различных структурах. Сначала рассмотрим поглощающий фотонный кристалл (ФК) с меняющейся по длине амплитудой модуляции показателя преломления (аподизированная решетка):

$$n(z) = n_1 + n_2(z) \sin^2 \left(\frac{\pi}{\Lambda} z \right) + i\kappa, \quad (19)$$

где κ — коэффициент поглощения и

$$n_2(z) = n_{02} + \delta n \frac{z}{L}. \quad (20)$$

На рис. 2 показаны спектры пропускания $|T|^2$ и поглощения $A = 1 - |T|^2 - |R|^2$ при нормальном падении в случаях без поглощения ($\kappa = 0$) и при поглощении, равном $\kappa = 0.003$. На спектре пропускания хорошо виден характерный диапазон 650–800 нм с минимумом пропускания, известный как фотонная запрещенная зона (ФЗЗ). Добавление поглощения приводит к снижению пропускания через структуру во всем спектральном диапазоне, кроме ФЗЗ. Также за счет аподизации длинноволновый край ФЗЗ

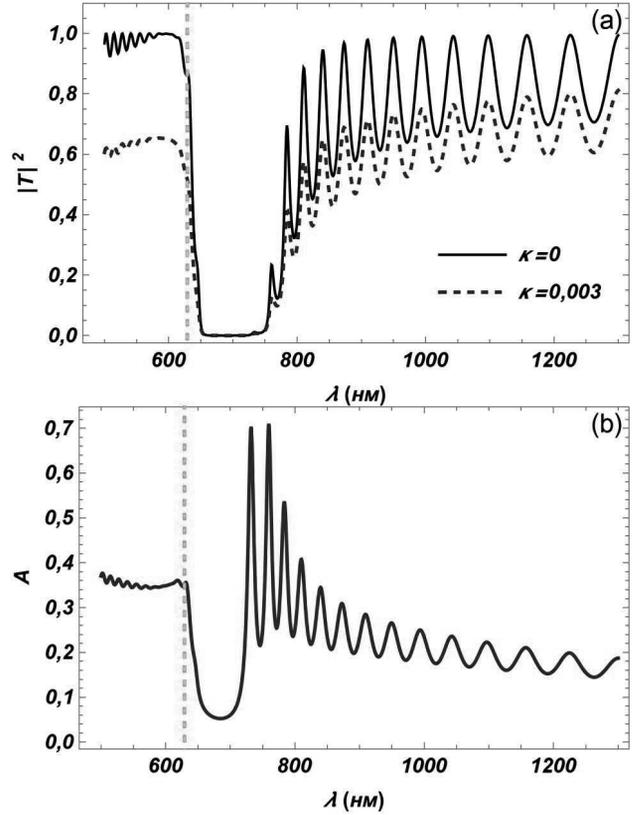


Рис. 2. (В цвете онлайн) Спектры пропускания (а) и поглощения (б) аподизированного ФК с коэффициентом поглощения $\kappa = 0.003$ (синяя линия) и без поглощения (черная линия). Параметры структуры: $n_1 = 1.5$, $n_{02} = 0.3$, $\delta n = 0.3$, $L = 6000$ нм, $\Lambda = 200$ нм, $n_l = n_r = 1$

имеет более сложную структуру по сравнению с идеальным ФК. Это связано с тем, что на этих длинах волн поле имеет повышенную локализацию внутри ФК, но слабое пропускание. Этим же объясняются и максимумы поглощения на длинноволновой границе ФЗЗ.

На рис. 3а показано распределение поля внутри активного ФК на длине волны $\lambda = 629$ нм. Видно постепенное уменьшение огибающей распределения по мере распространения в глубь ФК. На рис. 3б показан спектр поглощения в случае падения электромагнитной волны из среды справа от того же самого ФК. Спектры пропускания при падении волны слева и справа от ФК полностью совпадают, однако спектры отражения и поглощения могут проявлять значительную асимметрию. В нашем случае это проявляется в положении мод с большим поглощением: при падении справа они расположены на коротковолновой границе ФЗЗ, а при падении слева — на длинноволновой границе.

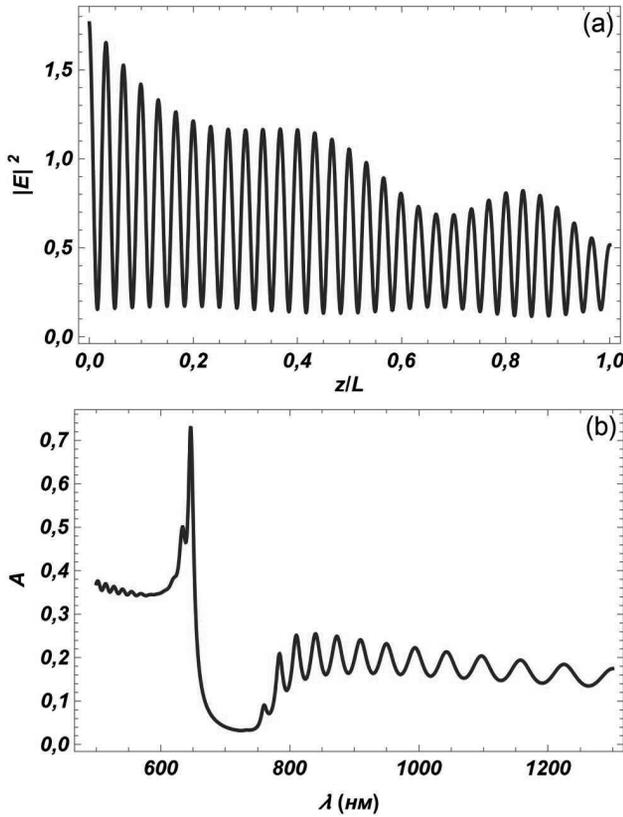


Рис. 3. (а) Распределение поля внутри аподизированного ФК с поглощением $\kappa = 0.003$ на длине волны $\lambda = 629$ нм (показано зелеными штрихами на рис. 2). (б) Спектр поглощения аподизированного ФК, как на рис. 2, но при падении излучения в обратном направлении (из среды справа от ФК)

Теперь перейдем к рассмотрению активного ФК с переменным по длине периодом модуляции показателя преломления (чирпированная решетка):

$$n(z) = n_1 + n_2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\Lambda(z)} z \right) - ig, \quad (21)$$

где g — коэффициент усиления и

$$\Lambda(z) = \Lambda_0 + \delta\Lambda \frac{z}{L}. \quad (22)$$

На рис. 4 показаны спектры пропускания $|T|^2$ и отражения $|R|^2$ в случаях без усиления ($g = 0$) и при усилении, равном $g = 0.0045$. Как видно из представленных спектров, активный ФК увеличивает амплитуды отраженной и прошедшей волн. Особенно большое усиление наблюдается для отраженной волны на нескольких длинах волн на длинноволновом краю ФЗЗ. На этих длинах волн данная структура ведет себя как отражающий оптический усилитель.

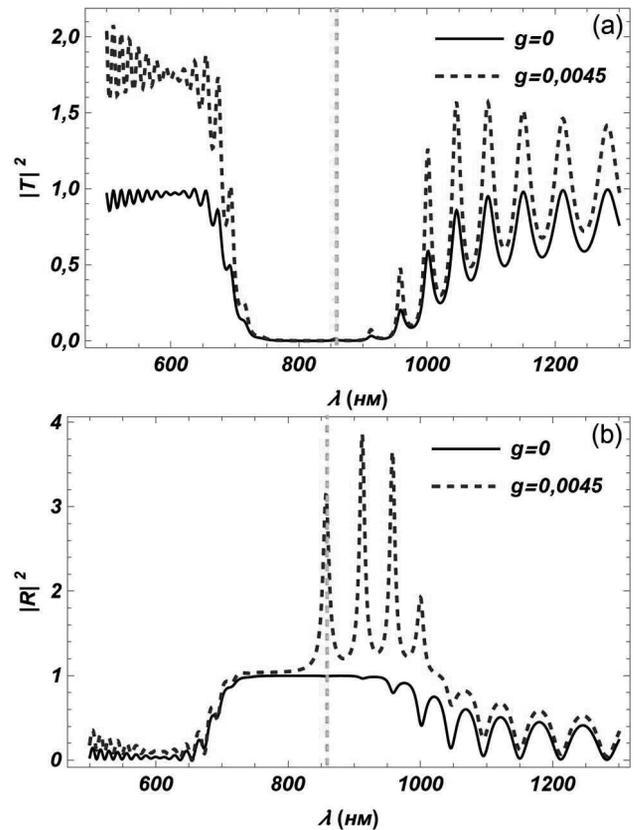


Рис. 4. (В цвете онлайн) Спектры пропускания (а) и отражения (б) чирпированного ФК при нормальном падении с коэффициентом усиления $g = 0.0045$ (синяя линия) и без усиления (черная линия). Параметры структуры: $n_1 = 1.5$, $n_2 = 0.6$, $L = 5980$ нм, $\Lambda_0 = 200$ нм, $\delta\Lambda = 30$ нм, $n_l = n_r = 1$

На рис. 5а показано распределение поля внутри активного ФК для одной из этих мод с длиной волны $\lambda = 859$ нм. На рис. 5b приведен спектр отражения в случае падения электромагнитной волны из среды справа от того же ФК. Аналогично предыдущему случаю с поглощением, мы снова имеем асимметрию спектров отражения для «левой» и «правой» задач. Стоит также отметить, что моды с большим усилением на коротковолновой границе в правой задаче сливаются в относительно широкую полосу.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе нами был модифицирован и обобщен представленный ранее метод решения задачи рассеяния плоской волны на неоднородном поглощающем (усиливающем) слое с произвольной зависимостью показателя преломления, а именно, бы-

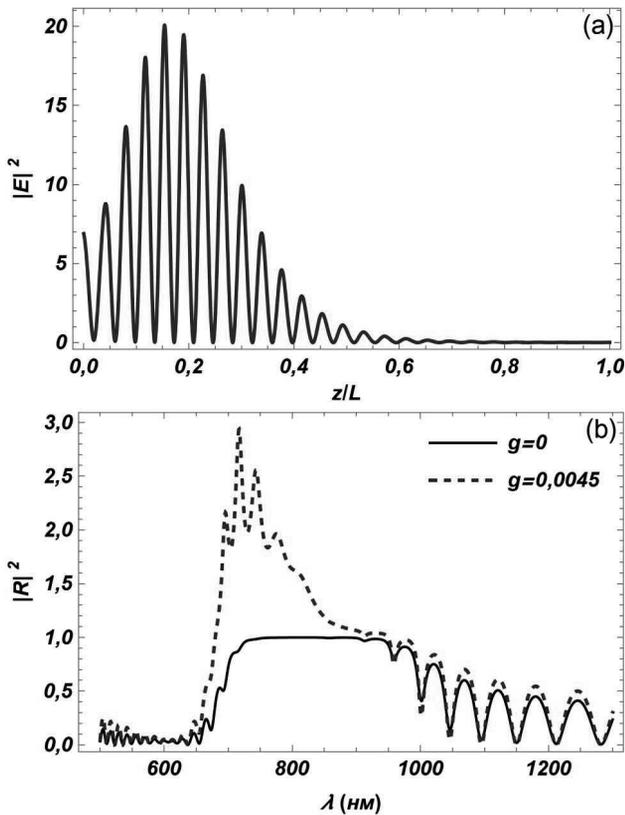


Рис. 5. (а) Распределение поля внутри chirпированного ФК с усилением $g = 0.0045$ на длине волны $\lambda = 859$ нм (показано зелеными штрихами на рис. 4). (б) Спектры отражения chirпированного ФК, как на рис. 4, но при падении излучения в обратном направлении (из среды справа от ФК)

ли получены выражения для коэффициентов пропускания и отражения излучения для неоднородного слоя, расположенного между двумя различными диэлектриками, а также выражение для распределения электрического поля внутри такого слоя. Данные коэффициенты выражаются через пару комплексных функций, которые являются решением задачи Коши для системы из двух обыкновенных дифференциальных уравнений, а также параметров слоя и внешней среды. Данный метод имеет преимущество по сравнению с прямым решением волнового уравнения с точки зрения численного решения задачи, так как решить систему из двух уравнений первого порядка легче, чем одно уравнение второго порядка. Наконец, нами было продемонстрировано использование данного метода на примере задачи рассеяния плоской волны на двух фотонных кристаллах с градиентными параметрами.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 21-1-1-6-1) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZNS-2020-0003 № 0657-2020-0003).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. M. Calvo-Velasco and R. Sánchez-Cano, *Curr. Appl. Phys.* **35**, 72 (2022).
2. F. Wu, M. Chen, D. Liu et al., *Appl. Opt.* **59**, 9621 (2020).
3. I. M. Efimov, N. A. Vanyushkin, A. H. Gevorgyan et al., arXiv:2202.01509.
4. Z. A. Zaky, A. M. Ahmed, A. S. Shalaby et al., *Sci. Rep.* **10**, 1 (2020).
5. Z. Li, Z. Ge, X. Y. Zhang et al., *Indian J. Phys.* **93**, 511 (2019).
6. L. Ju, X. Xie, W. C. Du et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* **256**, 1800382 (2019).
7. A. H. Gevorgyan, S. S. Golik, N. A. Vanyushkin et al., *Materials* **14**, 2172 (2021).
8. V. A. Belyakov, *Liq. Cryst.* **48**, 2150 (2021).
9. N. A. Vanyushkin, A. H. Gevorgyan, and S. S. Golik, *Optik* **242**, 167343 (2021).
10. H. B. Tanaue, E. Reyes-Gómez, and A. Bruno-Alfonso, *Photonics Nanostr.-Fundam. Appl.* **47**, 100958 (2021).
11. L. Ge, *Photonics Res.* **5**, B20 (2017).
12. P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*, Wiley, New York (1988).
13. A. Yariv and P. Yeh, *Optical Waves in Crystals*, Wiley, New York (1984).
14. F. R. Di Napoli and R. L. Deavenport, *J. Acoust. Soc. Amer.* **67**, 92 (1980).
15. G. Barton, *Elements of Green's Functions and Propagation*, Clarendon Press, Oxford (1989).
16. R. Bellman and G. M. Wing, *An Introduction to Invariant Imbedding*, John Wiley & Sons, Inc, New York (1975).
17. J. X. Liu, Z. K. Yang, L. Ju et al., *Plasmonics* **13**, 1699 (2018).

18. M. Sanamzadeh, L. Tsang, J. Johnson et al., *Prog. Electromagn. Res. B* **80**, 1 (2018).
19. K. V. Khmelnytskaya, V. V. Kravchenko, and S. M. Torba, *Lobachevskii J. Math.* **41**, 785 (2020).
20. G. de Nittis, M. Moscolari, S. Richard et al., arXiv: 1904.03791.
21. J. A. Lock, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **216**, 37 (2018).
22. D. M. Sedrakian, A. H. Gevorgyan, and A. Zh. Khachatryan, *Opt. Comm.* **192**, 135 (2001).
23. A. H. Gevorgyan, *Opt. Mater.* **100**, 109649 (2020).
24. N. A. Vanyushkin, A. H. Gevorgyan, and S. S. Golik, *Opt. Mater.* **127**, 112306 (2022).
25. A. Zh. Khachatryan, D. M. Sedrakian, and N. M. Ispiryan, *Astrophysics* **44**, 518 (2001).
26. A. Z. Khachatryan, A. G. Alexanyan, A. S. Avanesyan, and N. A. Alexanyan, *Optik* **126**, 1196 (2015).
27. В. А. Амбарцумян, *Изв. Акад. Наук Арм. ССР* **1–2**, 31 (1944).
28. А. А. Геворгян, К. В. Папоян, О. В. Пикичян, *Опт. и спектр.* **88**, 647 (2000) [*Opt. Spectrosc.* **88**, 586 (2000)].

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕМЕНТОВ ОТ АРГОНА ДО КСЕНОНА

*Г. В. Шпатаковская**

*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук
125047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 марта 2022 г.,
после переработки 17 апреля 2022 г.
Принята к публикации 18 апреля 2022 г.

Проанализирована зависимость потенциалов ионизации от атомного номера Z и числа электронов N_e в многозарядных ионах элементов с атомными номерами в диапазоне $18 \leq Z \leq 54$. Обнаруженные закономерности с погрешностью менее одного процента описываются простыми полиномами на основе нескольких небольших таблиц полиномиальных коэффициентов, что позволяет с хорошей точностью оценивать потенциалы ионизации всех многозарядных ионов рассмотренного диапазона.

DOI: 10.31857/S0044451022080053
EDN: EGCBJW

1. ВВЕДЕНИЕ

Свойства многозарядных ионов (положительных ионов с кратностью ионизации $q > 5$), присутствующих в высокотемпературной плазме Солнца и других космических объектов, важны для рентгеновской астрономии и астрофизики. Они необходимы в кинетических моделях плазмы, для исследования взаимодействия ионов с веществом и т. д. На практике многозарядные ионы используют, например, в литографии, в ионном термоядерном синтезе, для ионной терапии раковых опухолей.

К числу важнейших характеристик ионов относятся их потенциалы (в вольтах) или совпадающие с ними численно энергии ионизации (в электронвольтах). Лишь для очень немногих многозарядных ионов эти величины измерены экспериментально, обычно спектроскопическими, очень точными методами. В большинстве же случаев их получают в полуэмпирических или теоретических моделях. Вся совокупность как экспериментальных, так и расчетных данных по энергиям ионизации атомов и атомных ионов в электронвольтах представлена в таблицах [1] для элементов с атомными номерами $Z \leq 110$ со ссылками на источники.

Теоретические расчеты электронных уровней энергии в атомах и ионах выполняются методами разной точности, сложности и трудоемкости.

Аналитический метод [2], основанный на модели эффективного заряда (effective charge model, ЕСМ), дает возможность в нулевом приближении вычислять полную энергию электронов атома как функцию эффективного заряда с погрешностью до 5–6 %, а учет поправки второго порядка увеличивает точность до долей процента. Релятивистская версия метода ЕСМ применяется в работе [3] для расчета характеристик многоэлектронных атомов и ионов. Авторы предлагают использовать эту более точную модель, сравнимую по сложности с моделью Тома-са – Ферми – Дирака, вместо последней.

Вычисление полных электронных энергий связи во всех ионах в основном состоянии для элементов от лития до оганесона ($Z = 118$) методом самосогласованного поля Дирака – Фока (DF) [4] легло в основу расчета многих потенциалов ионизации, представленных в таблицах [1].

Более точным, но и более трудоемким является многоконфигурационный метод самосогласованного поля Дирака – Фока (MCDF) [5]. Его применение для подобных расчетов с учетом различных тонких эффектов (релятивизма, квантовой электродинамики, размера и формы ядра) обсуждается в обзоре [6], в котором сравниваются экспериментальные и теоретические результаты по рентгеновским тер-

* E-mail: shpagalya@yandex.ru

мам для внутренних оболочек нейтральных атомов от неона до фермия ($Z = 100$) включительно. Для большинства рассмотренных уровней и линий K - и L -оболочек продемонстрировано очень хорошее согласие теории и эксперимента. В работе [7] такой метод был использован для детального исследования характеристик иона стронция $SrXXX$. Однако распространение этого подхода на внешние электронные оболочки затрудняется необходимостью учета слишком большого количества возможных конфигураций.

Альтернативный методу самосогласованного поля и менее затратный метод функционала плотности использован в работе [8]. Рассчитанные этим методом орбитальные энергии в ионах Li-подобной изоэлектронной последовательности элементов от неона до фермия с учетом различных радиационных эффектов квантовой электродинамики также представлены в таблицах [1]. Однако применение метода функционала плотности в версии работы [9] к расчетам уровней энергии электронов в нейтральном атоме и первом ионе в основном состоянии для всех элементов от водорода до урана включительно [10] при сравнении [11] с результатами эксперимента демонстрирует его недостаточную точность.

В полуэмпирических моделях прослеживаются попытки выявить закономерности в зависимости потенциалов ионизации ионов от атомного номера в изоэлектронных последовательностях. Так, в работе [12] проанализирована разность между потенциалами ионизации, рассчитанными в модели MCDF и доступными в базе [1]. Построенные для этой разности аналитические зависимости от Z позволяют оценить недостающие и исправить имеющиеся данные для изоэлектронных последовательностей ионов с числом электронов от 3 до 18 в элементах от лития до олова ($Z = 50$).

В работе [13] аналитические выражения для потенциалов ионизации ионов в изоэлектронных последовательностях с числом электронов от 2 до 54, построенные как плавная интерполяция результатов для тяжелых ионов ($Z \gg 1$) и для области $Z = N_e - 1$, имеют вид полиномов по атомному номеру Z с квадратичным, линейным, нулевого и первого отрицательного порядков членами. Эти выражения также используются для обнаружения и исправления ненадежных данных из базы [1].

Совсем иной подход использовался в нашей работе [14]. Для анализа потенциалов ионизации в основном состоянии многозарядных ионов с числом электронов $N_e \leq 46$ в тяжелых элементах $55 \leq Z \leq 95$ применялся квазиклассический метод, подроб-

но описанный в работе [15]. Выявленные в результате закономерности в зависимости потенциалов ионизации I_{N_e} от атомного номера и числа электронов позволили с хорошей точностью аппроксимировать их с помощью простых полиномов на основе небольших таблиц полиномиальных коэффициентов. Это существенно упрощает практическое использование большого массива данных из [1].

В настоящей работе с аналогичной целью рассмотрены энергии ионизации многозарядных ионов элементов с атомными номерами $18 \leq Z \leq 54$ из базы данных [1]. В работе [14] мы опустили обсуждение небольшой модификации используемого нами квазиклассического метода [15]. Этот пробел будет ниже восполнен в разд. 2. В разд. 3 рассмотрены ионы с электронами в K - и L -оболочках, в разд. 4 и 5 — ионы с электронами в M - и N -оболочках. Таблицы полиномиальных коэффициентов приводятся в Приложении.

2. КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННЫХ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ

Кратко изложим основу квазиклассического метода [15] и его модификацию, используемую в работе.

Как известно, в квазиклассической модели Томаса–Ферми (TF) имеет место автомодельность по атомному номеру Z , т. е. для любого элемента все характеристики можно вычислить по решению для водорода ($Z = 1$) простым масштабным преобразованием. В частности, для энергетических величин это отвечает умножению на $Z^{4/3}$. Применение условия квантования Бора–Зоммерфельда к вычислению орбитальных энергий связи $E_{nl} = E_{n0}$ (n — главное квантовое число) s -состояний (орбитальное число $l = 0$) электронов в атоме в модели TF приводит к выделению зависимости от Z определенного вида (в атомных единицах):

$$E_{n0}^{TF} = Z^{4/3} e^{TF}(\sigma_n), \quad \sigma_n = \pi n Z^{-1/3}, \quad (1)$$

где $e^{TF}(\sigma)$ — универсальная функция, не зависящая ни от атомного номера элемента, ни от квантовых чисел, вычисляется по атомному потенциалу TF. Так как модель TF приближенно описывает многоэлектронные атомы с заполненными оболочками, возникает вопрос, насколько подобное выполняется в реальных атомах. Соответствующие функ-

ции были построены по орбитальным энергиям связи $E_{n0}^{exp}(Z)$ из таблиц [16]

$$e_n(\sigma_n) = E_{n0}^{exp}(Z)Z^{-4/3}. \quad (2)$$

Сравнение с результатами модели TF показало, что хотя не существует для всех квантовых чисел n универсальной функции, но для каждого значения n , т. е. в каждой из оболочек K, L, M, N, \dots при условии правильного порядка заполнения состояний имеется своя плавная монотонная зависимость $e_n(\sigma_n)$, которая может быть аппроксимирована по нескольким элементам простым полиномом. По этой аппроксимации возможно с погрешностью в пределах 1–2% восстановить соответствующие энергии связи для других элементов, что указывает на существование закона подобия по атомному номеру в энергиях связи электронов. Выпадение из этого закона может свидетельствовать или о нарушении в порядке заполнения состояний, или об ошибочности данных. Это позволяет, в частности, контролировать правильность экспериментальных измерений, как показано на примере оценок рентгеновских K - и L -термов в работе [17].

Таким образом, построение функций $e_n(\sigma_n)$ оказалось эффективным инструментом анализа как в целом энергий связи для всех естественных элементов периодической таблицы Менделеева [18], так и для отдельных групп атомов, в частности для исследования закономерностей в первых потенциалах ионизации лантанидов и актинидов [19]. При этом выяснилось, что если существует закономерность в зависимости $e_n(\sigma_n)$, то своя закономерность имеет место и для $e_n(\sigma_1)$, т. е. из аргумента можно убрать номер оболочки n и эффективно исследовать зависимость разных по n функций $e_n(\sigma)$ от одного аргумента, зависящего только от атомного номера. Такая модификация квазиклассического метода [15], была использована для анализа имеющихся данных по энергиям ионизации многозарядных ионов тяжелых элементов в работе [14]. Кроме того, выяснилось, что в случае правильного заполнения оболочек для потенциалов ионизации ионов нет явной зависимости от квантовых чисел n, l , а существенна лишь зависимость от числа электронов N_e . В отличие от тяжелых элементов все ионы средних атомов с зарядом $q > 5$ ($N_e < Z-5$) характеризуются правильным порядком заполнения оболочек, поэтому, как показано ниже, в этом случае оказалось возможным использовать описанный метод оценки практически для всех многозарядных ионов.

3. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ K - И L -ОБОЛОЧЕК

Будем исследовать зависимость энергий ионизации от Z в изоэлектронных последовательностях, в которых ионы сгруппированы по их подобию нейтральным атомам с тем же числом электронов N_e . Энергии ионизации ионов $I_{N_e}(Z)$ в таблицах [1] даются в электронвольтах. Поэтому в формулу (2) следует подставлять табличное значение, деленное на энергию Хартри $E_H = 27.211386$ эВ.

В этом разделе рассматриваются последовательности ионов с $N_e = 1-10$, что соответствует ионам с электронами в оболочках K и L : водородо- и гелиеподобные ионы соответственно с $N_e = 1$ и $N_e = 2$, литиеподобные с $N_e = 3, \dots$, неонподобные с $N_e = 10$.

На рис. 1а по оси абсцисс отложена величина σ , а по оси ординат десятичный логарифм соответствующего значения e_{N_e} , вычисленные для шести разных элементов выбранного диапазона (символы). Рисунок демонстрирует очень гладкие монотонные зависимости, которые хорошо аппроксимируются квадратичными полиномами (линии):

$$\lg e_{N_e}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{max}} a_i^{(N_e)} \sigma^i, \quad \sigma = \pi Z^{-1/3}, \quad i_{max} = 2. \quad (3)$$

Применение выражения (3) к оценке потенциалов ионизации ионов данного диапазона N_e для других элементов по формуле, обратной (2),

$$I_{N_e} = Z^{4/3} 10^{\lg e_{N_e}(\sigma)} E_H, \quad (4)$$

подтвердило точность интерполяции в доли процента, что позволяет во многих случаях использовать ее вместо табличных данных.

Однако на практике требуется знать потенциалы ионизации ионов элемента с фиксированным значением атомного номера Z в зависимости от числа электронов в них $N_e = Z - q$. Поэтому более удобным оказывается другое представление функции $e_{N_e}(\sigma)$. Его можно получить, аппроксимируя полиномами кусочно-монотонные зависимости коэффициентов a_i от числа электронов N_e :

$$a_i^{(N_e)} = \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k. \quad (5)$$

Эти зависимости для рассматриваемого диапазона ионов изображены на рис. 1б. На первый взгляд, здесь можно увидеть три диапазона монотонных зависимостей: $N_e = 1-2$; $N_e = 3-6$; $N_e = 7-10$ с

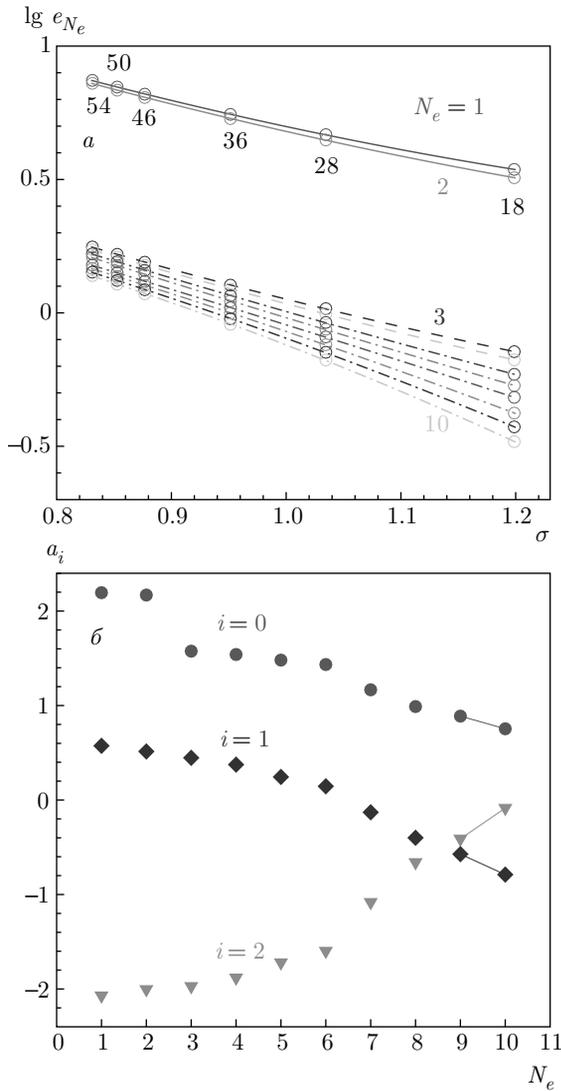


Рис. 1. (В цвете онлайн) Ионизация состояний из K - и L -оболочек. *а*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 18, 28, 36, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e , увеличивающимся последовательно сверху вниз от 1 до 10. Здесь и на рис. 2а–5а числа над и под символами отмечают атомный номер элемента; числа около линий указывают начало и конец заполнения электронами соответствующих оболочек. *б*) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из K - и L -оболочек. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

линейной зависимостью в первом и квадратичной во втором и третьем диапазонах. Однако, поскольку зависимость в (4) логарифмическая, для полиномиальной интерполяции требуется достаточная точность, которой не хватает при таком рассмотрении. Оптимальным оказалось разбиение всей области на пять частей ($N_e = 1-2, N_e = 3-4, \dots, N_e = 9-10$) и попарная линейная интерполяция (5) значений $a_i(N_e)$. Очевидно, что при этом сохраняются неизменными значения коэффициентов a_i . Выражение для $\lg e_{N_e}(\sigma)$ тогда приобретает следующий вид:

$$\lg e_{N_e}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{max}} \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k \sigma^i, \quad (6)$$

$$i_{max} = 2, \quad k_{max} = 1,$$

а соответствующие полиномиальные коэффициенты b_{ik} для этих пяти диапазонов представлены в табл. 1 (см. Приложение). Таким образом, для оценки энергии ионизации многозарядного иона в рассмотренном диапазоне следует использовать формулы (4), (6) и табл. 1.

В качестве примера вычислим энергии ионизации нескольких ионов других элементов из рассмотренного в этом разделе диапазона. Для ионов кальция ($Z = 20$) с числом электронов $N_e = 5$ и $N_e = 6$ получаем для энергий ионизации I_{N_e} [эВ] соответственно 969.86 (973.7) и 889.8 (894.0). Здесь в скобках для сравнения приводятся табличные значения энергий ионизации из [1]. В таком же формате (с указанием неопределенности табличных значений) для энергий ионизации ионов цинка ($Z = 30$) с $N_e = 7, 8$ имеем 2211.1 (2214 ± 8), 2081.2 (2085 ± 5). Для ионов кадмия ($Z = 48$) с $N_e = 9, 10$ получаем 6048.3 (6039 ± 9), 5849.8 (5839 ± 3). Как видно, погрешность не превышает долей процента. Более широкое сравнение подтверждает такую точность обнаруженных закономерностей.

4. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ M -ОБОЛОЧКИ

Аналогичный анализ проведен для потенциалов ионизации ионов нескольких элементов из оболочки M . Соответствующие результаты представлены символами на рис. 2а для подоболочек $3s$ и $3p$, на рис. 3а для $3d$ -подоболочки. Линии на этих рисунках — это кубические аппроксимации по σ согласно выражению (3) с $i_{max} = 3$. Сравнение с табличными значениями для многих других элементов показывает, что эти аппроксимации имеют точность в доли процента.

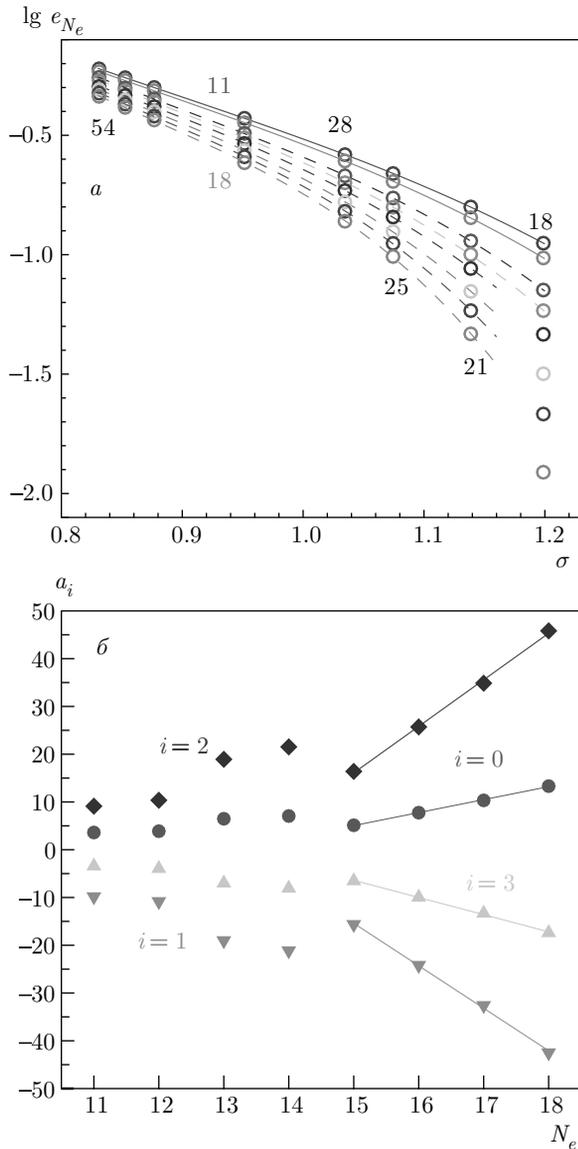


Рис. 2. (В цвете онлайн) Ионизация из s - и p -состояний M -оболочки. *а*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 18, 21, 25, 28, 36, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — кубические интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 11 до 18. *б*) Зависимости коэффициентов кубической интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из M -оболочки. Линии — квадратичные интерполяции монотонных фрагментов

Но, как уже было сказано выше, более востребованы на практике не зависимости от Z в изоэлектронных последовательностях, а потенциалы ионизации ионов с разным числом электронов N_e определенного элемента с фиксированным Z . Поэтому для

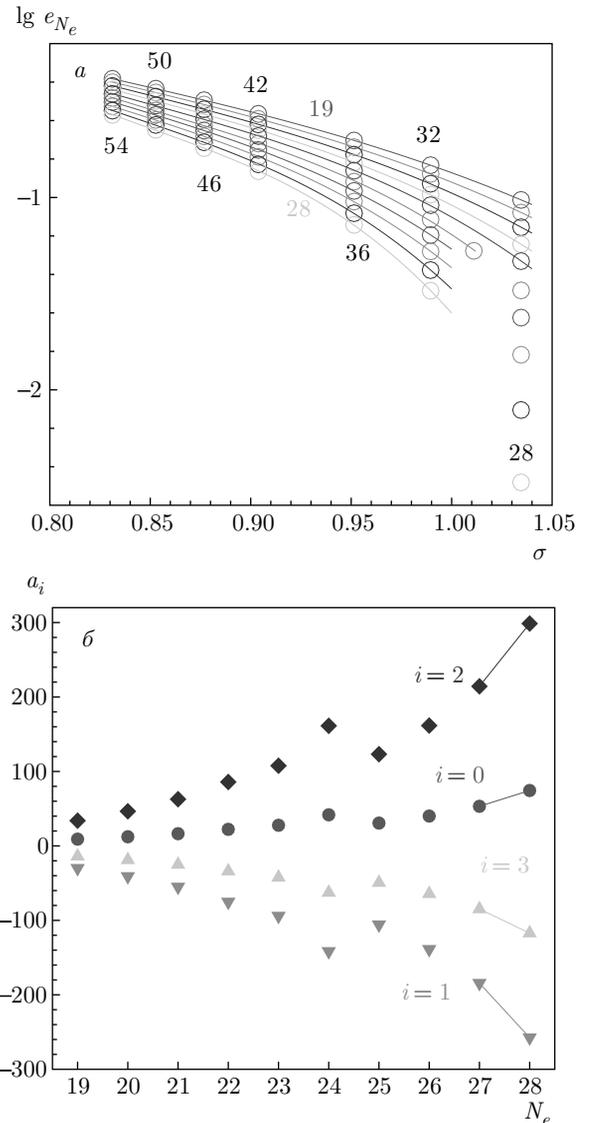


Рис. 3. (В цвете онлайн) Ионизация из d -состояний M -оболочки. *а*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 28, 32, 36, 42, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — кубические интерполяции. Разные цвета линий и символов соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 19 до 28. *б*) Зависимости коэффициентов кубической интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из M -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

M -оболочки также была исследована зависимость коэффициентов a_i ($i = 0, 1, 2, 3$) от числа электронов N_e . Результаты этого исследования представлены на рис. 2б и 3б.

На рис. 2б можно выделить три диапазона монотонного поведения $a_i(N_e)$ ($i = 0, 1, 2, 3$), причем все

с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$): $N_e = 11-12$, $N_e = 13-14$ и $N_e = 15-18$. На рис. 3б таких диапазонов оказывается четыре: $N_e = 19-21$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$), $N_e = 22-24$ с квадратичной зависимостью ($k_{max} = 2$) и $N_e = 25-26$, $N_e = 27-28$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$). Соответствующие коэффициенты b_{ik} помещены в табл. 2 и 3 в Приложении.

Вопрос о неоднозначности использованного разбиения и степени интерполяционного полинома связан с оптимизацией точности получаемых выражений и числа констант, которые его обеспечивают. Хотя разбиение на пары с линейной интерполяцией (в общей сложности 9 диапазонов, 18 констант) и в данном случае позволило бы сохранить неизменными коэффициенты a_i , наше разбиение при сохранении точности в пределах процента уменьшает число используемых констант до 15. Этот принцип оптимизации сохраняется и ниже в разд. 5.

Проиллюстрируем точность предложенной аппроксимации несколькими примерами. Вычислим энергии ионизации I_{N_e} из оболочки M для некоторых ионов, используя формулы (6), (4) с коэффициентами b_{ik} из соответствующих частей табл. 2 и 3. Ниже в скобках даны для сравнения соответствующие табличные значения из базы [1] с указанием их неопределенности.

Для энергий ионизации ионов мышьяка ($Z = 33$) с $N_e = 15-18$ приведем результаты аналитических оценок в сравнении с табличными данными:

$$728.62 (728.9 \pm 2.2), 679.61 (672.9 \pm 0.9),$$

$$633.89 (628.8 \pm 0.6), 591.24 (587.6 \pm 1.9).$$

Для ионов стронция ($Z = 38$) с $N_e = 19-21$:

$$776.82 (774 \pm 4), 720.49 (722 \pm 3), 668.24 (665 \pm 3).$$

Для ионов иода ($Z = 53$) с $N_e = 27-28$:

$$1471.4 (1472 \pm 4), 1395.3 (1397 \pm 4).$$

Оценки не выходят за пределы точности табличных данных. Это подтверждается и для других ионов рассматриваемого диапазона.

5. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ N-ОБОЛОЧКИ

Результаты подобного анализа для потенциалов ионизации ионов нескольких элементов из оболочки N представлены символами на рис. 4а для подоболочек $4s$ и $4p$, на рис. 5а — для d -подоболочки. Линии на рисунках — это квадратичные аппроксимации по

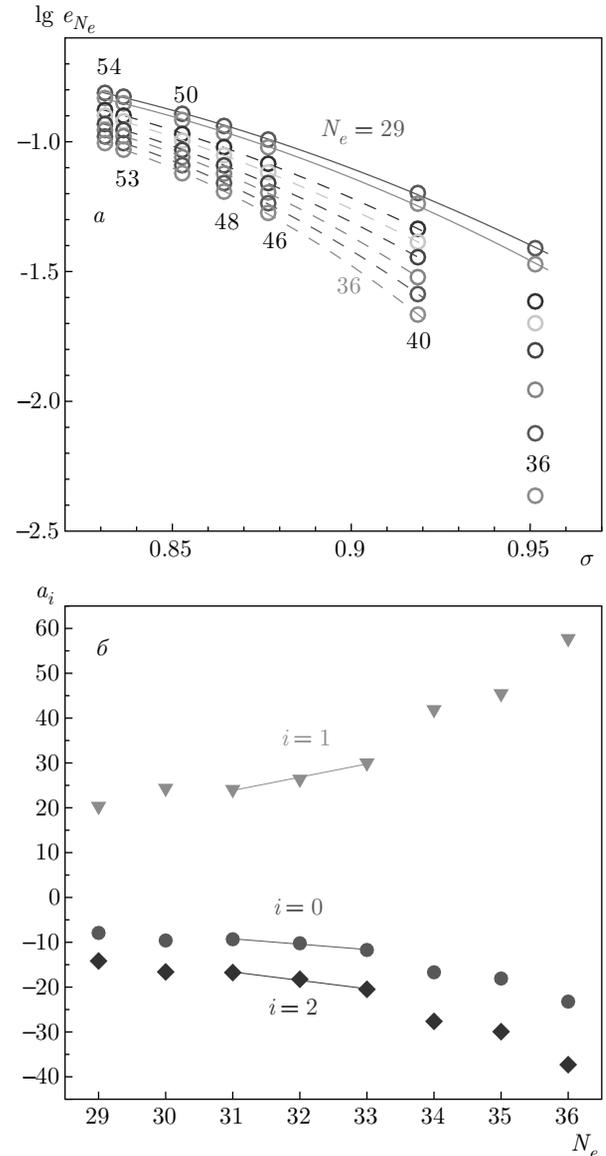


Рис. 4. (В цвете онлайн) Ионизация из s - и p -состояний N -оболочки. а) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 36, 40, 46, 48, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 29 до 36. б) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из N -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

σ согласно выражению (3). Оценки по этим аппроксимациям с точностью до процента согласуются с табличными значениями и для других элементов в рассматриваемом диапазоне зарядов ионов.

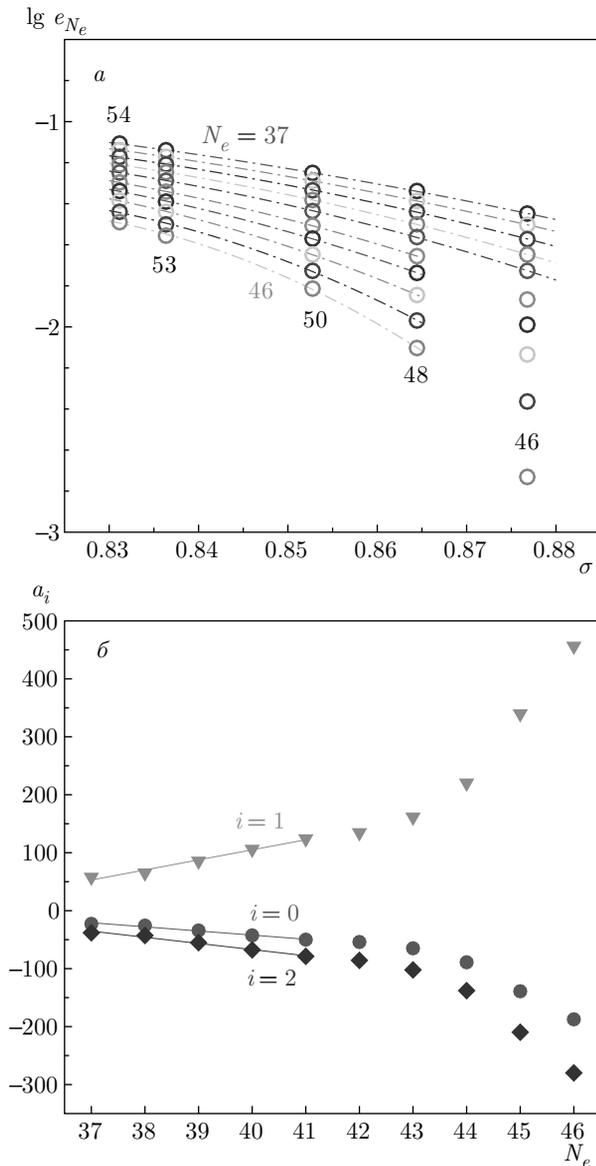


Рис. 5. (В цвете онлайн) Ионизация из d -состояний N -оболочки. *а*) Зависимости $\epsilon_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 40, 46, 48, 50, 53, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета линий и символов соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 37 до 46. Числа рядом с линиями указывают начало и конец заполнения электронами d -подоболочки. *б*) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из N -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

Применение в данном случае выражения (5) для полиномиальных коэффициентов a_i ($i = 0, 1, 2$) основано на виде кусочно-монотонных зависимостей, представленных на рис. 4б и 5б. На рис. 4б можно выделить три диапазона монотонного поведения

$a_i(N_e)$ ($i = 0, 1, 2$): $N_e = 29-30, N_e = 31-33$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$) и $N_e = 34-36$ с квадратичной ($k_{max} = 2$). На рис. 5б также три диапазона: $N_e = 37-41$ и $N_e = 42-44$ с квадратичной зависимостью ($k_{max} = 2$) и $N_e = 45-46$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$). Соответствующие коэффициенты b_{ik} помещены в табл. 3–5 в Приложении.

Ниже приводятся несколько примеров точности получаемых описанным образом оценок энергий ионизации I_{N_e} из оболочки N . Используются формулы (6), (4) с коэффициентами b_{ik} из соответствующих частей табл. 3–5.

Для энергий ионизации ионов палладия ($Z = 46$) с $N_e = 29, 30$:

$$459.16 (457.5), 429.57 (427 \pm 3).$$

Для ионов кадмия ($Z = 48$) с $N_e = 37-41$:

$$217.65 (218.0 \pm 2.5), 194.86 (195.0 \pm 2.4), \\ 172.23 (173.0 \pm 2.2), 150.28 (150.0 \pm 2.2), \\ 129.47 (130.1 \pm 2.1).$$

Для ионов олова ($Z = 50$) с $N_e = 42-44$:

$$155.93 (156.0 \pm 2.2), 134.55 (135.0 \pm 2.1), \\ 112.57 (112.9 \pm 2.0).$$

Для ионов иода ($Z = 53$) с $N_e = 45-46$:

$$173.40 (171.0 \pm 2.2), 153.24 (150.81).$$

Эти оценки и сравнение для других ионов показывают практическое совпадение с табличными данными.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в базе данных [1] энергии ионизации многозарядных положительных ионов рассмотрены для некоторых элементов в диапазоне $18 \leq Z \leq 54$ с помощью модифицированного квазиклассического метода [15] выделения зависимости от атомного номера Z . Анализ рассмотренных данных выявляет автомодельные зависимости энергий ионизации от атомного номера Z и числа электронов N_e во всем этом диапазоне.

Использование обнаруженных закономерностей позволяет на основе нескольких небольших таблиц с хорошей точностью оценивать потенциалы ионизации более тысячи ионов. Предложенные аналитические оценки могут быть полезны, например, при расчете состава плазмы в химической модели, при моделировании современных энергетических проектов лазерного и ионного термоядерного синтеза, в расчетах сечения ионизации ионами нейтральных атомов [20].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица 1. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для $N_e = 1-10$

N_e	1, 2		3, 4		5, 6	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$2.219698 \cdot 10^0$	$-2.516389 \cdot 10^{-2}$	$1.681960 \cdot 10^0$	$-3.548086 \cdot 10^{-2}$	$1.714986 \cdot 10^0$	$-4.683745 \cdot 10^{-2}$
1	$-2.137021 \cdot 10^0$	$6.685233 \cdot 10^{-2}$	$-2.242038 \cdot 10^0$	$9.035552 \cdot 10^{-2}$	$-2.330886 \cdot 10^0$	$1.221714 \cdot 10^{-1}$
2	$6.339124 \cdot 10^{-1}$	$-5.987269 \cdot 10^{-2}$	$6.631457 \cdot 10^{-1}$	$-7.211843 \cdot 10^{-2}$	$7.368896 \cdot 10^{-1}$	$-9.852621 \cdot 10^{-2}$
N_e	7, 8		9, 10			
$i \setminus k$	0	1	0	1		
0	$2.408410 \cdot 10^0$	$-1.773920 \cdot 10^{-1}$	$2.094341 \cdot 10^0$	$-1.340246 \cdot 10^{-1}$		
1	$-4.036461 \cdot 10^0$	$4.221302 \cdot 10^{-1}$	$-3.338934 \cdot 10^0$	$3.253769 \cdot 10^{-1}$		
2	$1.758030 \cdot 10^0$	$-2.697029 \cdot 10^{-1}$	$1.375225 \cdot 10^0$	$-2.164399 \cdot 10^{-1}$		

Таблица 2. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для $N_e = 11-18$

N_e	11, 12		13, 14		15-18	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$6.226699 \cdot 10^{-1}$	$2.716942 \cdot 10^{-1}$	$-9.260511 \cdot 10^{-1}$	$5.701232 \cdot 10^{-1}$	$-3.565692 \cdot 10^1$	$2.714508 \cdot 10^0$
1	$1.238404 \cdot 10^0$	$-1.006319 \cdot 10^0$	$8.525734 \cdot 10^0$	$-2.119051 \cdot 10^0$	$1.180769 \cdot 10^2$	$-8.897742 \cdot 10^{-1}$
2	$-4.496634 \cdot 10^0$	$1.237557 \cdot 10^0$	$-1.492080 \cdot 10^1$	$2.604040 \cdot 10^0$	$-1.300551 \cdot 10^2$	$9.742572 \cdot 10^0$
3	$2.369403 \cdot 10^0$	$-5.256131 \cdot 10^{-1}$	$7.030483 \cdot 10^0$	$-1.078257 \cdot 10^0$	$4.749643 \cdot 10^1$	$-3.593123 \cdot 10^0$

Таблица 3. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазонов $N_e = 19-30$

N_e	19-21		22-24			
$i \setminus k$	0	1	0	1	2	
0	$-6.039691 \cdot 10^1$	$3.649011 \cdot 10^0$	$2.067309 \cdot 10^3$	$-1.871043 \cdot 10^2$	$4.279428 \cdot 10^0$	
1	$2.087465 \cdot 10^2$	$-1.253750 \cdot 10^1$	$-6.878930 \cdot 10^3$	$6.231700 \cdot 10^2$	$-1.426867 \cdot 10^1$	
2	$-2.403794 \cdot 10^2$	$1.440452 \cdot 10^1$	$7.646937 \cdot 10^3$	$-6.933075 \cdot 10^2$	$1.589188 \cdot 10^1$	
3	$9.216474 \cdot 10^1$	$-5.568930 \cdot 10^0$	$-2.842266 \cdot 10^3$	$2.578267 \cdot 10^2$	$-5.917017 \cdot 10^0$	
N_e	25, 26		27, 28		29, 30	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$-2.052357 \cdot 10^2$	$9.435333 \cdot 10^0$	$-5.190515 \cdot 10^2$	$2.119500 \cdot 10^1$	$4.089713 \cdot 10^1$	$-1.683137 \cdot 10^0$
1	$7.183185 \cdot 10^2$	$-3.296577 \cdot 10^1$	$1.791625 \cdot 10^3$	$-7.318269 \cdot 10^1$	$-9.61996 \cdot 10^1$	$4.018158 \cdot 10^0$
2	$-8.383867 \cdot 10^0$	$3.846336 \cdot 10^1$	$-2.061403 \cdot 10^3$	$8.428752 \cdot 10^1$	$5.632294 \cdot 10^0$	$-2.431015 \cdot 10^0$
3	$3.264476 \cdot 10^2$	$-1.502941 \cdot 10^1$	$7.907471 \cdot 10^2$	$-3.242548 \cdot 10^1$	0.0	0.0

Таблица 4. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазонов $N_e = 31-36$

N_e	31-33		34-36		
$i \setminus k$	0	1	0	1	2
0	$2.774201 \cdot 10^1$	$-1.192549 \cdot 10^0$	$-2.198638 \cdot 10^3$	$1.278731 \cdot 10^2$	$-1.873475 \cdot 10^0$
1	$-6.782808 \cdot 10^1$	$2.957758 \cdot 10^0$	$5.105813 \cdot 10^3$	$-2.970817 \cdot 10^2$	$4.357147 \cdot 10^0$
2	$4.138968 \cdot 10^1$	$-1.871369 \cdot 10^0$	$-2.961334 \cdot 10^3$	$1.723388 \cdot 10^2$	$-2.530984 \cdot 10^0$

Таблица 5. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазона $N_e = 37-46$

N_e	37-41			42-44		
$i \setminus k$	0	1	2	0	1	2
0	$-7.129920 \cdot 10^2$	$4.196148 \cdot 10^1$	$-6.293558 \cdot 10^{-1}$	$-1.152739 \cdot 10^4$	$5.506973 \cdot 10^2$	$-6.607618 \cdot 10^0$
1	$1.726244 \cdot 10^3$	$-1.015340 \cdot 10^2$	$1.524121 \cdot 10^0$	$2.778065 \cdot 10^4$	$-1.327385 \cdot 10^3$	$1.593204 \cdot 10^1$
2	$-1.047455 \cdot 10^3$	$6.151746 \cdot 10^1$	$-9.246349 \cdot 10^{-1}$	$-1.674060 \cdot 10^4$	$7.999854 \cdot 10^2$	$-9.605740 \cdot 10^0$

N_e	45, 46	
$i \setminus k$	0	1
0	$2.040283 \cdot 10^3$	$-4.842836 \cdot 10^1$
1	$-4.905320 \cdot 10^3$	$1.165572 \cdot 10^2$
2	$2.949618 \cdot 10^3$	$-7.020622 \cdot 10^1$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2020), *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.8), <https://physics.nist.gov/asd> [2022, Febr. 20], National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
2. O. D. Skoromnik, I. D. Feranchuk, A. U. Leonau, and C. H. Keitel, *J. Phys. B* **50**, 245007 (2017).
3. K. D. Dzikowski, O. D. Skoromnik, I. D. Feranchuk, N. S. Oreshkina, and C. H. Keitel, *J. Phys. B* **54**, 115002 (2021).
4. G. C. Rodrigues, P. Indelicato, J. P. Santos, P. Patte, and F. Parente, *At. Data Nucl. Data Tables* **86**, 117 (2004).
5. J. P. Desclaux, *Comput. Phys. Comm.* **9**, 31 (1975).
6. R. D. Deslattes, E. G. Kessler Jr, P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth, and J. Anton, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 35 (2003).
7. A. Goyal, I. Khatri, S. Aggarwal, A. K. Singh, and ManMohan, *JQSRT* **161**, 157 (2015).
8. J. Sapirstein and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **83**, 012504 (2011).
9. S. Kotochigova, Z. H. Levine, E. L. Shirley, M. D. Stiles, and C. W. Clark, *Phys. Rev. A* **55**, 191 (1997).
10. *Atomic Reference Data for Electronic Structure Calculation, Atomic Total Energies and Eigenvalues*. URL: <http://www.nist.gov/pml/data/dftdata/index.cfm>
11. Г. В. Шпатаковская, *ЖЭТФ* **158**, 430 (2020) [*JETP* **131**, 385 (2020)].
12. E. Biémont, Y. Frémat, and P. Quinet, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **71**, 117 (1999).
13. G. Gil and A. Gonzalez, *Can. J. Phys.* **95**, 479 (2017).
14. Г. В. Шпатаковская, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 798 (2021) [*JETP Lett.* **114**, 737 (2021)].
15. Г. В. Шпатаковская, *УФН* **189**, 195 (2019) [*Phys. Usp.* **62**, 186 (2019)].

16. NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database; <https://srdata.nist.gov/xps/selectEnergyType.aspx> [2022, Febr. 20].
17. Г. В. Шпатаковская, Письма в ЖЭТФ **108**, 781 (2018) [JETP Lett. **108**, 768 (2018)].
18. G. V. Shpatakovskaya, in *Book of Abstracts XXXVI Internat. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter*, ELBRUS (2021), p. 135. http://www.ihep.ras.ru/elbrus21/abstracts/ELBRUS2021_book_of_abstracts.pdf
19. Г. В. Шпатаковская, Письма в ЖЭТФ **111**, 526 (2020) [JETP Lett. **111**, 463 (2020)].
20. I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, ЖЭТФ **146**, 5 (2014).

СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПСЕВДОТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ФОРМИРУЕМОГО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ МОДУЛЯТОРОМ СВЕТА

*Д. П. Агапов**, *И. А. Беловолов*, *П. П. Гостев*,
С. А. Магницкий, *Д. Н. Фроловцев*, *А. С. Чиркин*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 апреля 2022 г.,
после переработки 15 апреля 2022 г.
Принята к публикации 27 апреля 2022 г.

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований статистических свойств псевдотеплового излучения, формируемого при отражении от фазового пространственного модулятора света. Получены выражения для пространственной корреляционной функции и радиуса корреляции случайного псевдотеплового поля. В общем случае поле оказывается статистически неоднородным — радиус корреляции в поперечной плоскости рассеянного пучка в одном из ортогональных направлений зависит от угла падения когерентного пучка на модулятор. С помощью расчета кумулянтов функции распределения поля строго показано, что в дальней зоне случайное поле подчиняется гауссовской статистике. Приведены результаты экспериментов по преобразованию когерентного лазерного пучка в излучение с псевдотепловой статистикой с помощью жидкокристаллического фазового модулятора света. Результаты экспериментов, полученные с помощью проприетарного программного обеспечения, хорошо согласуются с теоретическими выводами.

DOI: 10.31857/S0044451022080065
EDN: EGHINP

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия источники так называемого псевдотеплового излучения вызывают значительный интерес в фантомной оптике [1–4]. Гауссовская статистика таких полей позволяет выразить корреляционные функции высокого порядка через произведение всевозможных парных корреляций [5–8]. Именно это свойство классических, а также и квантовых гауссовских световых полей находит широкое применение при регистрации фантомных изображений (ФИ). В фантомной оптике излучение, прошедшее через объект или отраженное от него, регистрируется детектором, не обладающим пространственным разрешением. Информация об объекте извлекается из взаимной пространственной корреляционной функции интенсивностей объектного канала и восстанавливающего ка-

нала, в котором распространяется случайное излучение, пространственно-коррелированное с изучаемым, освещающим объект. Такая необычная возможность получения информации об объекте была впервые предсказана в статьях [9, 10] и продемонстрирована в работах [11, 12], в которых коррелированные между собой пучки в объектном и восстанавливающем каналах формировались в процессе спонтанного параметрического рассеяния света.

В настоящее время кроме неклассического параметрически рассеянного излучения широкое распространение для получения ФИ находят так называемые псевдотепловые источники излучения с гауссовской статистикой поля. Обсуждение особенностей квантовых и классических ФИ можно найти в [1]. Недавно предложено и продемонстрировано применение неполяризованного псевдотеплового излучения для исследования поляризационных свойств объектов [13, 14] методом ФИ, что послужило началом нового направления в фантомной оптике — фантомной поляриметрии [15]. Интересным применением фантомного принципа является возможность за-

* E-mail: dimaagapov@mail.ru

щищенной связи на основе поляризационных состояний [16].

В классических ФИ используются псевдотепловые источники следующих типов: источники, основанные на пространственной модуляции когерентного излучения вращающимся матовым диском; источники, использующие случайную пространственную модуляцию света с помощью либо фазового, либо амплитудного многопиксельного пространственного модулятора света.

Первый тип источников обстоятельно исследован достаточно давно (см., например, [5, 8] и цитируемую там литературу). С многочисленными применениями псевдотепловых источников излучения в фантомной визуализации объектов можно познакомиться по ссылкам в работе [17].

Стартом для разработки источников второго типа, который инициировал разработку нового типа ФИ — вычислительных ФИ, явилась работа [18]. В схеме вычислительных ФИ [18] канал восстановления является виртуальным. Развитием этой идеи является однопиксельная визуализация (single-pixel imaging [19]).

Можно выделить две основные схемы реализации вычислительных ФИ. Одна из них основана на использовании света с детерминированным пространственным распределением, другая использует случайно модулированный свет с псевдотепловой статистикой. В первом случае для получения ФИ используются различные типы алгоритмов сжатых измерений (compressed sensing [20]). Во втором случае ФИ строятся за счет вычисления корреляционных функций используемого случайного поля. Обычно в однопиксельной визуализации для формирования излучения используются пространственные модуляторы света, которые могут генерировать как детерминированные структурированные пучки (см. [21, 22] и цитируемую там литературу), так и случайные световые пучки [18]. Оба направления в настоящее время активно развиваются [19, 26]. Каждый из них имеет свои преимущества и свои недостатки. Какой из подходов выиграет это соревнование, покажет ближайшее будущее.

В данной работе идет речь о генерации случайных световых пучков с помощью пространственных модуляторов света. Эта проблема является центральной при практической реализации вычислительных ФИ, основанных на использовании случайных световых пучков. В литературе имеется ряд работ, посвященных этой проблеме [18–22, 24, 26]. Вопрос о статистических свойствах световых полей, генерируемых пространственными модуляторами све-

та, изучался в работе [18]. В ней рассчитана корреляционная функция поля, формируемая при фазовой многопиксельной модуляции когерентного излучения, и приведена оценка радиуса корреляции такого излучения. Однако на данном этапе развития технологии с использованием пространственных модуляторов света имеющейся в литературе информации о статистических свойствах получаемых таким образом пучков недостаточно, и требуется более детальное исследование статистических характеристик самого источника псевдотеплового света. В частности, насколько нам известно, строго не показано, что формируемое рассматриваемым способом поле источника действительно подчиняется гауссовской статистике.

Цель настоящей работы — детальное теоретическое и экспериментальное исследование процесса формирования псевдотеплового излучения с помощью многопиксельных пространственных модуляторов света, осуществляющих случайную фазовую модуляцию когерентного лазерного излучения.

Структура статьи следующая. В разд. 2 изучена пространственная когерентность световых полей при многопиксельной модуляции. Раздел 3 посвящен доказательству гауссовской статистики поля, формируемого при фазовой пространственной модуляции когерентного пучка. В разд. 4 описана экспериментальная установка, условия проведения эксперимента и представлены его результаты. В Заключении подведены итоги теоретических и экспериментальных исследований.

2. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ КОГЕРЕНТНОСТЬ СВЕТОВЫХ ПОЛЕЙ ПРИ МНОГОПИКСЕЛЬНОЙ МОДУЛЯЦИИ

Рассмотрим схему (рис. 1) использования пространственного модулятора света (spatial light modulator, SLM) для формирования псевдотеплового излучения из когерентного пучка света, падающего под углом θ к нормали поверхности SLM.

После отражения от SLM распространение светового пучка в квазиоптическом приближении описывается параболическим уравнением, решение которого дается выражением [5]

$$A(\mathbf{r}, l) = \int_{-\infty}^{\infty} A^{(0)}(\boldsymbol{\rho}) H(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}, l) d^2 \rho, \quad (1)$$

где

$$A^{(0)}(\mathbf{r}) = R(\mathbf{r}) A_{(0)}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

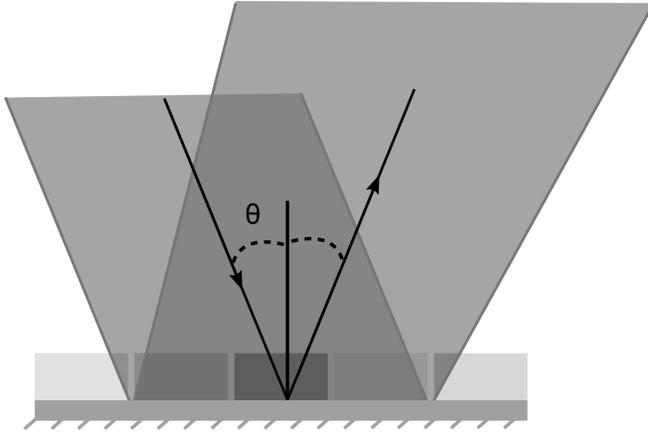


Рис. 1. Геометрия падения когерентного лазерного пучка на SLM; θ — угол падения лазерного пучка на поверхность SLM

$A_{(0)}(\mathbf{r})$ — амплитуда падающего когерентного пучка, $R(\mathbf{r})$ — коэффициент отражения от SLM,

$$H(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}, l) = \frac{ik_0}{2\pi l} \exp\left[\frac{ik_0(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho})^2}{2l}\right] \quad (3)$$

— функция Грина для свободного пространства. В дальней зоне отдельного пикселя выражение (1) принимает вид

$$A(\mathbf{r}, l) = H(\mathbf{r}, l) \int_{-\infty}^{\infty} R(\boldsymbol{\rho}) A_{(0)}(\boldsymbol{\rho}) \times \exp\left(-\frac{ik_0 \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\rho}}{l}\right) d^2 \rho. \quad (4)$$

В качестве модели SLM будем использовать модель двумерной решетки, изображенной на рис. 2. Для удобства расчетов число пикселей N^2 будем считать нечетным, а их форму будем полагать квадратной с шириной Λ и расстоянием между ними d .

Представим аналитически коэффициенты отражения от решетки пикселей в виде $R(\boldsymbol{\rho}) = R(x)R(y)$, при этом

$$R(x) = \begin{cases} R_p^{(\Lambda)}, & x_p^{(\Lambda)} - \frac{\Lambda_x}{2} \leq x \leq x_p^{(\Lambda)} + \frac{\Lambda_x}{2}, \\ 1, & x_p^{(d)} - \frac{d_x}{2} \leq x \leq x_p^{(d)} + \frac{d_x}{2}, \end{cases}$$

где $p = -N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$ и

$$x_p^{(\Lambda)} = p(\Lambda_x + d_x), \quad x_p^{(d)} = p(\Lambda_x + 1/2) + d_x/2 \quad (5)$$

— координаты центра вдоль оси x соответственно пикселя и промежутка между ними с номером p ,

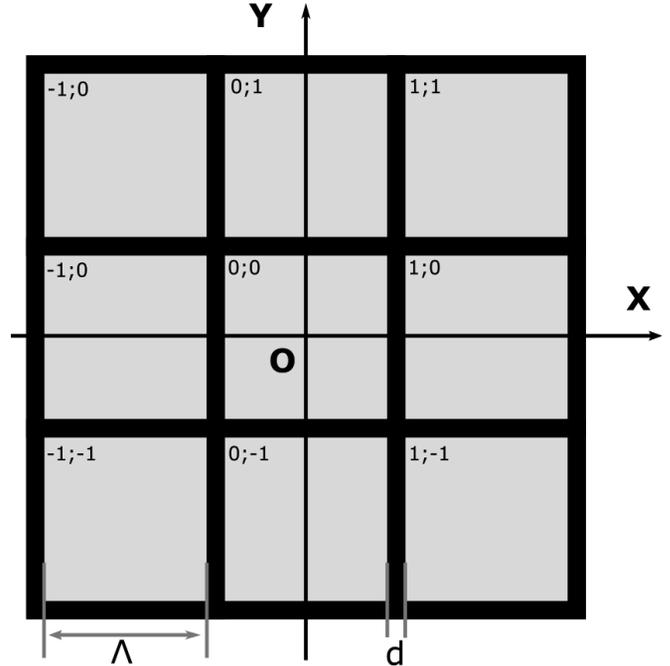


Рис. 2. Структура поверхности SLM. Начало декартовой системы координат x, y выбрано в центральном пикселе SLM, которому присвоен номер $[0; 0]$; Λ — ширина пикселя; d — расстояние между ними

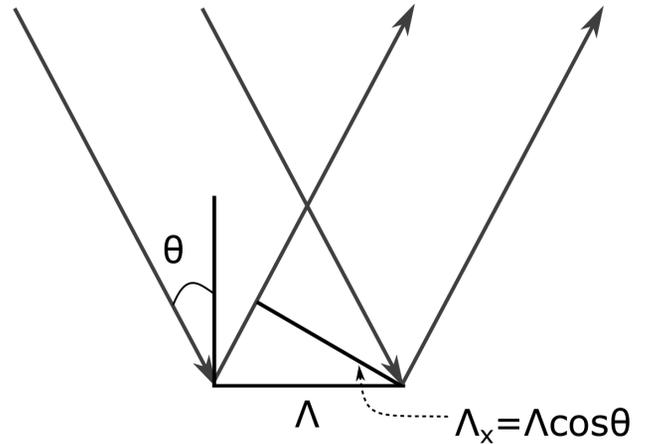


Рис. 3. К геометрии размера пучка, отраженного от SLM

$\Lambda_x = \Lambda \cos \theta$, $d_x = d \cos \theta$. Здесь θ — угол падения пучка на SLM (рис. 3).

Аналогичные выражения имеем вдоль оси y :

$$R(y) = \begin{cases} R_q^{(\Lambda)}, & y_q^{(\Lambda)} - \frac{\Lambda}{2} \leq y \leq y_q^{(\Lambda)} + \frac{\Lambda}{2}, \\ 1, & y_q^{(d)} - \frac{d}{2} \leq y \leq y_q^{(d)} + \frac{d}{2}, \end{cases}$$

где $q = -N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$ и

$$y_q^{(\Lambda)} = q(\Lambda + d), \quad y_q^{(d)} = q(\Lambda + 1/2) + d/2. \quad (6)$$

Формируемое поле представляет собой суперпозицию полей, рассеянных от отдельных пикселей, коэффициенты отражения которых можно записать как матрицу отражения пикселей $R_{pq} = R_p^{(\Lambda)} R_q^{(\Lambda)}$ (коэффициент отражения) и матрицу коэффициентов отражения от промежутков между пикселями (матрица $R_{pq}^{(d)} = 1$). Коэффициенты R_{pq} в общем случае имеют комплексные значения.

Комплексная амплитуда суммарного поля имеет, таким образом, вид

$$A(\mathbf{r}, l) = H(\mathbf{r}, l) \sum_{p,q=-M}^M \left\{ A_{p,q}^{(\Lambda)}(x, y) + A_{p,q}^{(d)}(x, y) \right\}. \quad (7)$$

Здесь $A_{p,q}^{(\Lambda)}(x, y)$ и $A_{p,q}^{(d)}(x, y)$ — амплитуды полей, рассеянных соответственно пикселем площадью Λ^2 и промежутком площадью d^2 . Эти амплитуды определяются формулами

$$A_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) = R_{pq} \int_{x_p^{(\Lambda)} - \frac{\Lambda_x}{2}}^{x_p^{(\Lambda)} + \frac{\Lambda_x}{2}} \int_{y_q^{(\Lambda)} - \frac{\Lambda_y}{2}}^{y_q^{(\Lambda)} + \frac{\Lambda_y}{2}} A_{(0)}(\boldsymbol{\rho}) \times \exp\left(\frac{-ik_0 \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\rho}}{l}\right) d^2 \rho, \quad (8)$$

$$A_{pq}^{(d)}(x, y) = \int_{x_p^{(d)} - \frac{d_x}{2}}^{x_p^{(d)} + \frac{d_x}{2}} \int_{y_q^{(d)} - \frac{d_y}{2}}^{y_q^{(d)} + \frac{d_y}{2}} A_{(0)}(\boldsymbol{\rho}) \times \exp\left(\frac{-ik_0 \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\rho}}{l}\right) d^2 \rho. \quad (9)$$

В предположении слабого изменения амплитуды падающего поля в пределах одного пикселя выражения (7), (9) можно преобразовать к виду

$$A_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) = \Lambda^2 R_{pq} A_{(0)}(x_p^{(\Lambda)}, y_q^{(\Lambda)}) \text{sinc}(\kappa_{\Lambda x} x) \times \text{sinc}(\kappa_{\Lambda y} y) \exp[-i\Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)], \quad (10)$$

$$A_{pq}^{(d)}(x, y) = d^2 A_{(0)}(x_p^{(d)}, y_q^{(d)}) \text{sinc}(\kappa_d x) \times \text{sinc}(\kappa_d y) \exp[-i\Phi_{pq}^{(d)}(x, y)]. \quad (11)$$

Здесь $\text{sinc } x = (1/x) \sin x$, $\kappa_{\Lambda} = (k_0/2l)\Lambda$, $\kappa_d = (k_0/2l)d$ и введены обозначения

$$\begin{aligned} \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) &= (k_0/l)(x_p^{(\Lambda)} x + y_q^{(\Lambda)} y), \\ \Phi_{pq}^{(d)}(x, y) &= (k_0/l)(x_p^{(d)} x + y_q^{(d)} y). \end{aligned} \quad (12)$$

Произведение функций $\text{sinc}(\kappa_{\Lambda} x) \text{sinc}(\kappa_{\Lambda} y)$ определяет ширину распределения дифрагированного пикселем поля вдоль направлений x, y в дальней зоне пикселя на расстоянии l от него. Величины этих размеров можно оценить для простоты, например, по первым нулям этих функций как

$$x_0^{(\Lambda)} = \frac{\lambda l}{\Lambda_x}, \quad y_0^{(\Lambda)} = \frac{\lambda l}{\Lambda}. \quad (13)$$

Аналогично получаем размер поля, рассеянного промежутками между пикселями:

$$x_0^{(d)} = \frac{\lambda l}{d_x}, \quad y_0^{(d)} = \frac{\lambda l}{d}. \quad (14)$$

Прежде всего отметим, что в рассматриваемом здесь случае в дальней зоне рассеянные пикселями поля не зависят от их местоположения, т. е. от индексов p, q . Для параметров $\lambda = 1$ мкм, $l = 1$ см и $\Lambda = 10$ мкм имеем $x_0^{(\Lambda)} \simeq y_0^{(\Lambda)} = 1$ мм.

Для получения наглядных аналитических результатов сделаем два упрощения.

1. Если нас интересуют поля в области размером меньше, чем 1 мм, то функции $\text{sinc}(\kappa_{\Lambda} x)$ и $\text{sinc}(\kappa_{\Lambda} y)$ можно заменить постоянным максимальным значением, равным 1.

2. Если ширина лазерного пучка больше размера SLM, то и амплитуды полей на пикселях можно считать практически одинаковыми, $A_{(0)}(x_p^{(\Lambda)}, y_q^{(\Lambda)}) = A_{(0)}(0)$.

В этих условиях выражения (10), (11) принимают простой вид:

$$A_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) = \Lambda^2 R_{pq} A_{(0)}(0) \exp[-i\Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)], \quad (15)$$

$$A_{pq}^{(d)}(x, y) = d^2 A_{(0)}(0) \exp[-i\Phi_{pq}^{(d)}(x, y)]. \quad (16)$$

Для интенсивности излучения, таким образом, получаем

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, l) &= |A(\mathbf{r}, l)|^2 = |B(\mathbf{r}, l)|^2 \times \\ &\times \left[\sum_{p,q=-M}^M d^2 \exp[i\Phi_{pq}^{(d)}(x, y)] + \right. \\ &\left. + \Lambda^2 R_{pq} \exp[i\Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)] \right] \times \\ &\times \left[\sum_{p,q=-M}^M d^2 \exp[-i\Phi_{pq}^{(d)}(x, y)] + \right. \\ &\left. + \Lambda^2 R_{pq} \exp[-i\Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)] \right], \quad (17) \end{aligned}$$

где $B(\mathbf{r}, l) = H(\mathbf{r}, l)A_{(0)}(0)$.

При перемножении выражений в правой части (17) появляются следующие слагаемые:

1) пропорциональные d^4 , дающие постоянную часть интенсивности, относительный вклад которой составляет $(d/\Lambda)^4 \ll 1$;

2) пропорциональные $d^2\Lambda^2$, дающие вклад в флуктуации интенсивности, относительный вклад которых тоже порядка $(d/\Lambda)^4 \ll 1$;

3) пропорциональные Λ^4 , которые дают флуктуационную часть интенсивности.

Пренебрегая вкладами 1 и 2, выражение для интенсивности (17) можем преобразовать к виду

$$I(\mathbf{r}, l) = \Lambda^4 |B(\mathbf{r}, l)|^2 \sum_{p,q=-M}^M \sum_{p',q'=-M}^M R_{pq} R_{p'q'} \times \exp \left[i \left(\Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) - \Phi_{p'q'}^{(\Lambda)}(x, y) \right) \right]. \quad (18)$$

Для дальнейшего анализа необходимо знание статистических характеристик коэффициентов отражения пикселей. Естественно считать «поле» пикселей статистически изотропным: среднее значение $\langle R_{pq} \rangle = \langle R \rangle$, дисперсия $\langle R_{pq} R_{pq}^* \rangle = \langle R^2 \rangle$ и модуляции в пикселях статистически независимы,

$$\langle R_{pq}^* R_{p'q'} \rangle = \langle R_{pq}^* \rangle \langle R_{p'q'} \rangle = |\bar{R}|^2, \quad p \neq p', \quad q \neq q'. \quad (19)$$

Угловыми скобками обозначено усреднение по реализациям. При времени измерения одной выборки, меньшем чем время изменения коэффициента отражения пикселей, коэффициенты отражения можно считать постоянными («замороженные» неоднородности).

Пользуясь свойством эргодичности по пространству, для средней интенсивности получим

$$\langle I(\mathbf{r}, l) \rangle = \Lambda^4 \bar{R}^2 N^2 |A_{(0)}(0)|^2. \quad (20)$$

При тех же условиях корреляционная функция полей, например, между значениями в точках $\mathbf{r}_1 = 0$

и $\mathbf{r}_2 = \mathbf{s}$, дается выражением

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{s}) &= \langle A(\mathbf{s}, l) A^*(0, l) \rangle = B(0, l) B(\mathbf{s}, l) \Lambda^4 \times \\ &\times \left\langle \left(\sum_{p',q'=-M}^M R_{p',q'} \right) \times \right. \\ &\times \left. \left(\sum_{p,q=-M}^M R_{p,q} \exp \left[i \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) \right] \right) \right\rangle = \\ &= B(0, l) B(\mathbf{s}, l) \Lambda^4 \sum_{p,q=-M}^M [\bar{R}^2 + (N^2 - 1) \bar{R}^2] \times \\ &\times \exp \left[i \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y) \right] = \\ &= B(0, l) B(\mathbf{s}, l) \Lambda^4 [\bar{R}^2 + (N^2 - 1) \bar{R}^2] \gamma(x, y; N), \quad (21) \end{aligned}$$

где нормированная корреляционная функция (степень когерентности)

$$\begin{aligned} \gamma(x, y; N) &= \\ &= \frac{\sin \left[\frac{k_0(\Lambda_x + d_x) N x}{2l} \right] \sin \left[\frac{k_0(\Lambda + d) N y}{2l} \right]}{N^2 \sin \left[\frac{k_0(\Lambda_x + d_x) x}{2l} \right] \sin \left[\frac{k_0(\Lambda + d) y}{2l} \right]}. \quad (22) \end{aligned}$$

Из анализа формулы (22) следует, что радиусы корреляции поля, рассчитанные по уровню 0.5 от $\gamma(0) = 1$, вдоль осей x, y различны:

$$r_{cor}^{(x)} = \frac{6\lambda l}{N(\Lambda + d) \cos \theta}, \quad r_{cor}^{(y)} = \frac{6\lambda l}{N(\Lambda + d)}. \quad (23)$$

Другими словами, рассеянное поле при падении когерентного пучка на SLM под углом $\theta \neq 0$ оказывается статистически неизотропным. При числе пикселей $N^2 = 10^6$ и угле $\theta = 0$ имеем $r_{cor}^{(x)} \approx r_{cor}^{(y)} \approx 1$ мкм.

Особенности фазовой модуляции сказываются на значениях параметров $\langle R \rangle$, $\langle R^2 \rangle$ и ярко проявляются при расчете функции распределения.

3. СТАТИСТИКА РАССЕЯННОГО ПОЛЯ ПРИ ФАЗОВОЙ МОДУЛЯЦИИ

Имея в виду сравнение полученных теоретических результатов с результатами экспериментальных исследований, в этом разделе мы изучим статистику рассеянного поля при фазовой модуляции. Коэффициент отражения от каждого пикселя SLM представим в виде

$$R_{pq}(t) = \exp [i\phi_{pq}(t)]. \quad (24)$$

Флуктуации фаз в пикселях полагаем статистически независимыми, многомерная функция распределения фаз в этом случае

$$w(\phi_{-M,-M}, \phi_{-M+1,-M+1}, \dots, \phi_{M-1,M-1}, \phi_{M,M}) = \prod_{p,q=-M}^M w(\phi_{pq}). \quad (25)$$

Функции распределения фаз считаем равномерно распределенными на интервале периодичности как в пространстве при изменении индексов p, q , так и по времени:

$$w(\phi_{pq}(t)) = 1/2\pi, \quad -\pi \geq \phi_{pq} \leq \pi, \quad p, q \in [-M, M]. \quad (26)$$

Естественно полагать, что скачки фазы во времени подчиняются диффузионному закону:

$$\langle (\Delta\phi_{pq}(t + \tau, t))^2 \rangle = D\tau, \quad (27)$$

где $\Delta\phi_{pq}(t + \tau, t) = \phi_{pq}(t + \tau) - \phi_{pq}(t)$, D — коэффициент диффузии.

Считаем также, что случайный процесс $\phi_{pq}(t)$ обладает эргодическим свойством. В дальней зоне случайное поле представляет собой суперпозицию полей от отдельных пикселей со случайной фазой, и, согласно центральной предельной теореме, суммарное поле подчиняется гауссовской статистике. Докажем это.

Формула для интенсивности (18) соответствует следующему выражению для действительного поля:

$$E(\mathbf{r}, l) = \sum_{pq=-M}^M a \cos(\phi_{pq}(t) - \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)), \quad (28)$$

где амплитуда a не зависит от индексов pq в силу принятых выше приближений. В дальнейшем, чтобы не загромождать формулы, не будем выписывать в явном виде переменные, от которых зависит E .

Удобный способ нахождения функции распределения $w(E)$ основан на характеристической функции

$$\begin{aligned} \theta(v) &= \langle e^{ivE} \rangle = \int e^{ivE} w(E) dE = \\ &= \left\langle \exp \left[iv \sum_{pq=-M}^M a \cos(\phi(t) - \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)) \right] \right\rangle = \\ &= \prod_{pq=-M}^M \left\langle \exp \left[iva \cos(\phi(t) - \Phi_{pq}^{(\Lambda)}(x, y)) \right] \right\rangle = \\ &= J_0^{N^2}(av), \quad (29) \end{aligned}$$

где $J_0(z)$ — функция Бесселя нулевого порядка от действительного аргумента, а v — действительный параметр. При расчете (29) использовано свойство (25).

Функция распределения $w(E)$ находится с помощью обратного преобразования Фурье:

$$w(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(v) e^{-ivE} dv. \quad (30)$$

Чтобы вычислить $w(E)$, воспользуемся следующим приемом [5]. Согласно (28), значения E лежат в интервале $-A \geq E \leq A$, $A = N^2 a$, поэтому $w(E)$ можно разложить в ряд Фурье:

$$w(E) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \exp\left(-\frac{i\pi k E}{A}\right). \quad (31)$$

Коэффициенты c_k равны

$$c_k = \frac{1}{2A} \int_{-A}^A w(E) \exp\left(-\frac{i\pi k E}{A}\right) dE \quad (32)$$

и с точностью до множителя $1/2A$ совпадают с характеристической функцией E для величины $\pi k/A$.

Для распределения $w(E)$ в результате получаем

$$w(E) = \frac{1}{2A} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_0^{N^2}\left(\frac{\pi k a}{A}\right) \cos\left(\frac{\pi k E}{A}\right) \right]. \quad (33)$$

Формула (33) справедлива для произвольного числа N . Численный анализ выражения (33) показывает, что с ростом числа N распределение $w(E)$ стремится к гауссовскому.

Убедиться в этом можно и аналитически, используя кумулянтный анализ. Введем новую случайную переменную $\xi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r}, l)/N$ и найдем закон ее распределения. Характеристическая функция случайного процесса $\xi(\mathbf{r})$ равна

$$\theta_{\xi}(v) = \langle e^{iv\xi} \rangle = J_0^{N^2}(av/N). \quad (34)$$

Найдем кумулянты распределения:

$$\kappa_m = (-i)^m \left[\frac{d^m}{dv^m} \ln \theta_{\xi}(v) \right]_{v=0}. \quad (35)$$

Удобно воспользоваться разложением функции Бесселя

$$J_0(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{z^{2n}}{2^{2n}(n!)^2}. \quad (36)$$

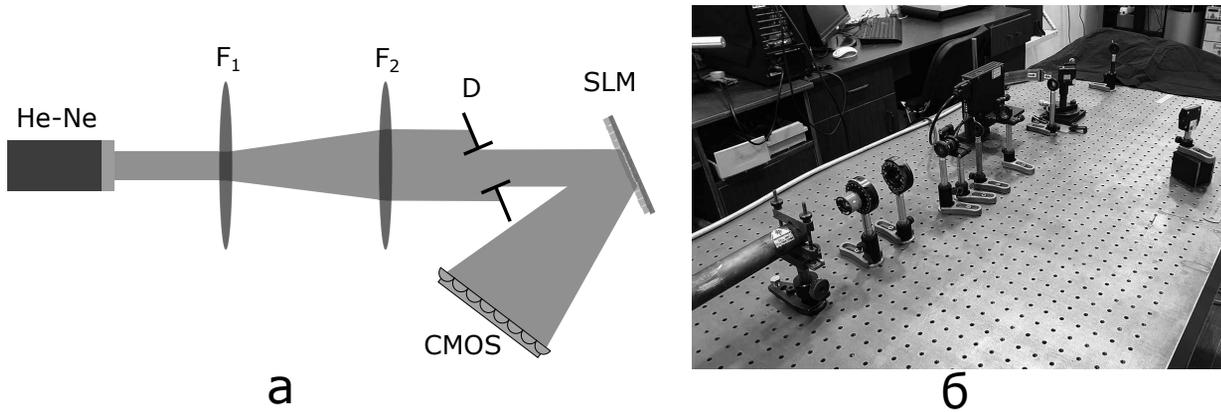


Рис. 4. Экспериментальная схема формирования излучения с псевдотепловой статистикой с помощью SLM. а) Излучение He-Ne-лазера после прохождения через расширитель пучка, состоящий из двух линз с фокусными расстояниями $F_1 = -1.5$ см и $F_2 = 20$ см, и квадратную диафрагму D падает на поверхность SLM. Отраженное излучение регистрируется CMOS-камерой. б) Фотография экспериментальной установки

Все нечетные кумулянты оказываются равными нулю. Для первых двух четных кумулянт имеем

$$\kappa_2 = -\frac{1}{2}a^2, \quad \kappa_4 = -\frac{3}{8}\left(\frac{a}{N}\right)^2 a^2. \quad (37)$$

Отсюда следует, что при $N \gg 1$ отношение $\kappa_4/\kappa_2 \ll \ll 1$ и можно ограничиться учетом только кумулянта κ_2 . Тогда для характеристической функции имеем

$$\theta_\xi(v) = \exp[-(av)^2/4]. \quad (38)$$

Выполняя преобразование Фурье (38), находим функцию распределения $w(\xi)$ и, учитывая связь между ξ и E , получаем функцию распределения гауссовского вида:

$$w(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{E^2}{2\sigma^2}\right], \quad (39)$$

где дисперсия $\sigma^2 = N^2 a^2/2$.

Таким образом, пространственная фазовая модуляция когерентного излучения при помощи SLM формирует поле в дальней зоне с гауссовской статистикой, подобной тепловому излучению. Иначе говоря, SLM является источником так называемого псевдотеплового излучения. Заметим, что гауссовская статистика упрощает расчет корреляционных функций поля высокого порядка.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

На рис. 4 изображена схема экспериментальной установки для изучения особенностей статистических свойств псевдотеплового света, генерируемого

с помощью фазового жидкокристаллического пространственного модулятора света модели SLM-100 от Santec.

В качестве источника выбран He-Ne-лазер с длиной волны излучения 632.8 нм, работающий в непрерывном режиме. Пучок излучения имеет вертикальную поляризацию в лабораторном базисе, а его диаметр на выходе лазера составляет 0.4 мм. После лазера излучение проходит через расширитель, который увеличивает диаметр лазерного пучка до 5 мм.

Расширенный пучок падает на квадратную диафрагму, установленную параллельно плоскости SLM, что обеспечивает неизменность засвеченной площади поверхности SLM при его повороте во время эксперимента. Сам SLM, как и диафрагма, установлен на вращающейся микрометрической платформе, которая позволяет задать угол падения пучка с точностью примерно $2''$. Диафрагма задает размер рабочей области SLM, т.е. определяет количество задействованных пикселей SLM. Модулированное излучение фиксируется в отраженном от SLM свете в области между первым и вторым горизонтальными дифракционными максимумами 8-битной CMOS-камерой Thorlabs с квадратными пикселями размером 5.2 мкм. Полный размер матрицы модулятора 1440×1050 пикселей. Такой выбор области наблюдения обусловлен тем, что в дифракционных максимумах присутствует остаточная компонента когерентного излучения лазера, которая искажает статистические свойства получаемого света. Расстояние до камеры меняется в зависимости от условий эксперимента.

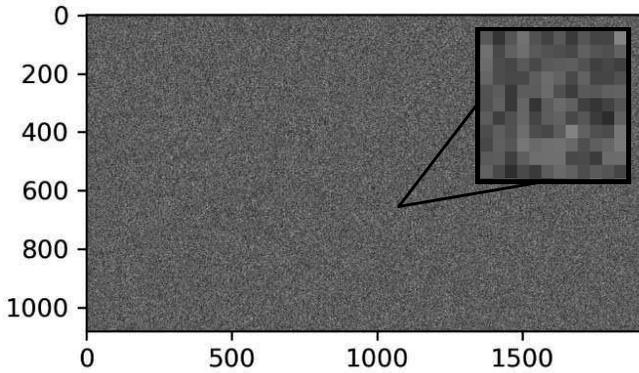


Рис. 5. Пример случайной маски, которая подается на SLM для фазовой модуляции лазерного излучения (цифры вдоль осей — номера пикселей)

Управление SLM, камерой и обработка итоговых изображений проводятся при помощи разработанного в лаборатории программного обеспечения, установленного на персональном компьютере. Программа позволяет задать фазовую маску или набор случайных фазовых масок на SLM, провести съемку промодулированного излучения для каждой маски и обработку полученных изображений. В результате обработки программа выдает информацию, в частности, значение нормированной автокорреляционной функции интенсивности $g^{(2)}$ и значения радиусов корреляций вдоль ортогональных направлений в поперечной плоскости пучка.

Для управления SLM, а также для получения и обработки изображений с CMOS-камеры используется проприетарное программное обеспечение, написанное на языке Python. Заранее сгенерированные маски выводятся на пространственный модулятор света с помощью библиотеки OpenCV. Для получения изображения с камеры используется программный интерфейс. Для создания маски на пространственном модуляторе света для каждого его пикселя генерируется случайное число в диапазоне от 0 до 1023 (соответствует 10-битной разрядности модулятора). Полученная таким образом маска подается на матрицу модулятора, а также сохраняется в памяти компьютера для дальнейшего анализа изображений, полученных на CMOS-камере. Типичный вид случайной маски представлен на рис. 5.

Методика измерений заключается в следующем. Сначала устанавливаются угол падения излучения на рабочую плоскость SLM, расстояние от SLM до камеры и размер квадратной диафрагмы. Затем с помощью программного обеспечения генерируется случайная маска, значения чисел в которой соот-

ветствуют фазовой задержке в диапазоне от 0 до 2π . Затем маска подается на SLM, а в памяти компьютера сохраняется распределение интенсивности в отраженном от SLM свете. Последняя процедура повторяется 1000 раз. Таким образом, после завершения работы первой программы в памяти компьютера оказывается сохраненным набор распределений интенсивности, полученных для случайно сгенерированных масок, поданных на SLM. В результате обработки сохраненных снимков вычисляются значения нормированной корреляционной функции интенсивности $g^{(2)}$ (см. ниже) и значения радиусов корреляций вдоль ортогональных направлений в поперечной плоскости пучка.

Типичный профиль распределения интенсивности света при его отражении от случайного фазового экрана представлен на рис. 6а. Распределение интенсивности представляет собой спекл-структуру. Корреляционная функция $g^{(2)}$ вычисляется из измеренных профилей интенсивности следующим образом. На всех кадрах в центральной области пучка выбирались пиксель с координатами (x_0, y_0) и пиксель с координатами (x_l, y_l) . Расстояние между пикселями по горизонтальной (x) и вертикальной (y) осям: $\Delta x = x_l - x_0$, $\Delta y = y_l - y_0$. Усреднение проводилось по реализациям (по 1000 кадрам) по следующей формуле:

$$g^{(2)}(\Delta x, \Delta y) = \frac{\sum_{n=1}^N J_n(x_0, y_0) J_n(x_l, y_l)}{\sum_{n=1}^N J_n(x_0, y_0) \sum_{n=1}^N J_n(x_l, y_l)}, \quad (40)$$

где n — номер кадра, N — общее количество кадров, $J_n(x_0, y_0)$ и $J_n(x_l, y_l)$ — измеренные интенсивности в пикселях (x_0, y_0) и (x_l, y_l) в n -м кадре. Описанная выше процедура повторялась для заданного пикселя (x_0, y_0) и всех возможных (x_l, y_l) . Типичный вид $g^{(2)}(\Delta x, \Delta y)$ представлен на рис. 6б. Видно, что величина функции $g^{(2)}(\Delta x, \Delta y)$ близка к 2 только в ограниченной области пространства. Размер этой области определяется радиусом корреляции излучения вдоль осей x и y .

Радиусы корреляции вдоль осей x и y вычислялись как полуширины функций $g^{(2)}(\Delta x, 0)$ и $g^{(2)}(0, \Delta y)$. Для увеличения точности выбирались различные 30 пикселей и строились 30 корреляционных функций. При этом радиусы корреляции вычислялись как средние по 30 измерениям. Время задержки при съемке кадров выбиралось таким образом, чтобы был задействован весь динамический диапазон камеры.

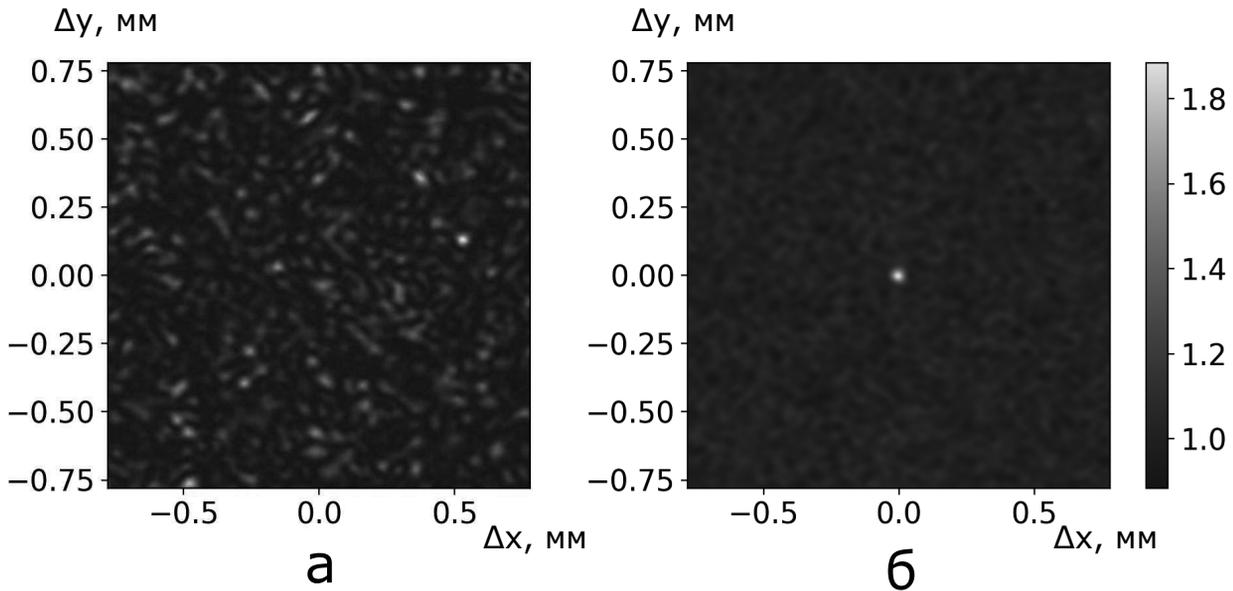


Рис. 6. (В цвете онлайн) Пространственная структура излучения, сформированного SLM: а) распределение интенсивности в спекл-структуре пучка; по осям x и y отложены величины Δx и Δy , цветом обозначена величина интенсивности в пикселях; б) автокорреляционная функция $g^{(2)}(\Delta x, \Delta y)$ для центрального пикселя на расстоянии 20 см от SLM при угле падения пучка 15°

Была исследована зависимость радиуса корреляции от экспериментально изменяемых параметров: угла падения лазерного пучка на SLM, количества задействованных пикселей SLM, расстояния от SLM до плоскости наблюдения. Экспериментально обнаружен теоретически предсказанный эффект анизотропии радиуса корреляции при наклонном падении когерентного света на SLM (рис. 7а). При увеличении угла падения наблюдается увеличение радиуса корреляции по одной из осей, при этом наблюдается лишь незначительное уменьшение параметра $g^{(2)}$. При этом величина $g^{(2)}$ (рис. 7б), остается близкой к 2, что свидетельствует о том, что статистика поля остается близкой к тепловой при изменении угла падения от 0 до 45° . Эксперименты также показали, что радиус корреляции, как и следовало ожидать, уменьшается при увеличении количества задействованных пикселей (рис. 7в), а при увеличении расстояния до плоскости наблюдения радиус корреляции растет (рис. 7г).

Таким образом, все представленные выше теоретические предсказания были подтверждены экспериментально. В частности, впервые было показано, что радиус корреляции рассеянного поля в одном из направлений зависит от угла падения когерентного излучения на SLM, т. е. площадь пространственной когерентности представляет собой эллипс. При этом

статистика поля остается тепловой и не зависит от угла падения.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые детально теоретически и экспериментально исследованы статистические свойства псевдотеплового источника света, формируемого при модуляции когерентного лазерного излучения многопиксельным пространственным модулятором света. С помощью аппарата теории случайных процессов и кумулянтного анализа аналитически показано, что распределение случайного поля, формируемого при случайной многопиксельной фазовой модуляции когерентного излучения, является гауссовским. Обнаружено, что при наклонном падении модулируемого пучка случайное поле статистически анизотропно, т. е. площадь пространственной когерентности представляет собой эллипс. Это свойство псевдотеплового источника излучения следует иметь в виду при анализе его распространения в свободном пространстве и в оптических волноводных устройствах, а также при определении разрешающей способности фантомного изображения. Одним из факторов, влияющих на качество последнего, является соотношение характерных размеров изображения и радиуса пространственной корреляции.

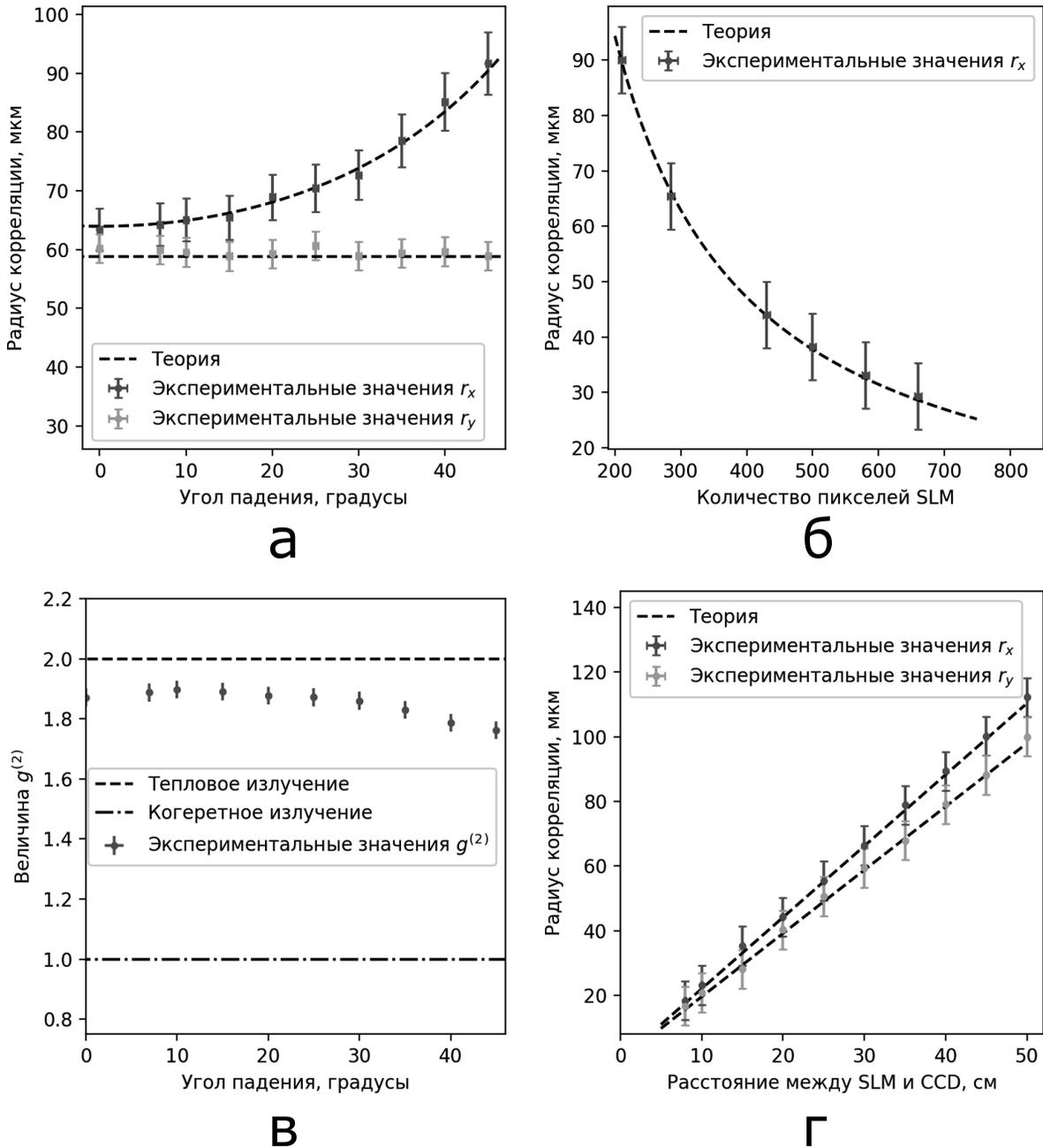


Рис. 7. (В цвете онлайн) Зависимости величины автокорреляционной функции $g^{(2)}$ и радиуса корреляции вдоль осей x и y от экспериментально изменяемых параметров: а) радиус корреляции как функция угла падения лазерного пучка на SLM при расстоянии до SLM 30 см и размере диафрагмы 4 мм; б) радиус корреляции в зависимости от количества задействованных пикселей SLM при угле падения 15° и расстоянии до SLM 30 см; в) значение функции $g^{(2)}$ в зависимости от угла падения на SLM при расстоянии до SLM 30 см и размере диафрагмы 4 мм; г) радиус корреляции как функция расстояния от SLM до плоскости наблюдения при угле падения 15° и размере диафрагмы 4 мм

Обнаружение эффекта анизотропии радиуса корреляции кроме очевидного научного интереса имеет и важное прикладное значение в свете практической реализации метода вычислительных фантомных изображений, в частности, развиваемой нами в настоящее время волоконной фантомной оптики.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00155).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Gatti, E. Brambilla, M. Bache, and L. A. Lugiato, in *Quantum Imaging*, ed. by M. I. Kolobov, Springer (2007), Ch. 5.
2. B. I. Erkmen and R. W. Boyd, *Adv. Opt. Photon.* **2**, 405 (2010).
3. K. W. C. Chan, M. N. O'Sullivan, and R. W. Boyd, *Opt. Express* **18**, 5562 (2010).
4. J. H. Shapiro and R. W. Boyd, *Quant. Inf. Process.* **11**, 949 (2012).
5. С. А. Ахманов, Ю.Е. Дьяков, А.С. Чиркин *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981).
6. L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge Univ. Press (1995).
7. H. Cummins, *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy* (Vol. 3), Springer Science and Business Media (2013).
8. B. Crosignani, P. di Porto, and M. Bertolotti, *Statistical Properties of Scattered Light*, Acad. Press (1975).
9. Д. Н. Клышко, *ЖЭТФ* **105**, 1574 (1994).
10. А. В. Белинский, Д. Н. Клышко, *ЖЭТФ* **105**, 487 (1994).
11. D. V. Strekalov, A. V. Sergienko, D. N. Klyshko et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3600 (1995).
12. T. B. Pittman, Y. Shih, D. V. Strekalov et al., *Phys. Rev. A* **52**, R3429 (1995).
13. A. S. Chirkin, P. P. Gostev, D. P. Agapov et al., *Laser Phys. Lett.* **15**, 115404 (2018).
14. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, *Opt. Lett.* **192**, 3641 (2020).
15. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, *Opt. Lett.* **47**(4), 754 (2022).
16. M. Roskopf, T. Mohr, and W. Elsässer, *Phys. Rev. Appl.* **13**, 034062 (2020).
17. T. Jiang, W. Tan, X. Huang et al., *J. Opt.* **23**, 075201 (2021).
18. J. H. Shapiro, *Phys. Rev. A* **78**, 061802(R) (2008).
19. G. M. Gibson, S. D. Johnson, and M. J. Padgett, *Opt. Express* **28**, 28190 (2020).
20. V. Katkovnik and J. Astola, *JOSA A* **29**(8), 1556 (2012).
21. J. Pinnell, I. Nape, B. Sephton et al., *JOSA A* **37**, C146 (2020).
22. A. A. Pushkina, J. I. Costa-Filho, G. Maltese et al., *Meas. Sci. Technol.* **31** 125202 (2020).
23. Ch. Wang, R.-J. Lan, Ch. Ren et al., *Phys. Rev. A* **101**, 033819 (2020).
24. H. C. Liu, B. Yang, Q. Guo et al., *Sci. Adv.* **3**, e1701477 (2017).

КВАНТОВОЕ ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ ОСЦИЛЛЯЦИЙ НЕЙТРИНО В МАГНИТНОМ ПОЛЕ И ПРОБЛЕМА СОЛНЕЧНЫХ НЕЙТРИНО

*В. О. Егоров, И. П. Волобуев**

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 марта 2022 г.,
после переработки 27 марта 2022 г.
Принята к публикации 29 марта 2022 г.

В рамках нового квантового теоретико-полевого подхода описываются процессы осцилляций нейтрино во внешнем постоянном почти однородном магнитном поле. Подход основан на диаграммной технике Фейнмана с модифицированным зависящим от расстояния пропагатором, который учитывает геометрию экспериментов по осцилляциям нейтрино. В геометрии экспериментов с солнечными нейтрино, источником которых является протяженное солнечное ядро, учитывается конечный размер источника и рассматриваются конкретные примеры, когда нейтрино регистрируются только через взаимодействие с заряженным током или через взаимодействия как с заряженным, так и с нейтральным токами.

DOI: 10.31857/S0044451022080077
EDN: EGKYBM

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время процессы рассеяния элементарных частиц с большой точностью описываются Стандартной моделью в рамках формализма S-матрицы и техники диаграмм Фейнмана. Этот подход предполагает, что процессы рассеяния происходят во всем пространстве-времени, а входящие и выходящие частицы описываются плоскими волнами. Это приближение оказывается очень хорошим для процессов рассеяния. Однако оно не годится для описания явлений осцилляций частиц, поскольку процессы осцилляций происходят на конечных пространственных и временных интервалах. По этой причине осцилляции нейтрино обычно описываются в рамках квантово-механических подходов в терминах либо плоских волн, либо волновых пакетов [1–5]. Тем не менее оба этих подхода не последовательны, поскольку они используют так называемые флейворные состояния нейтрино, которые определяются как суперпозиции массовых состояний нейтрино, но не могут рассматриваться как истинные кванто-

вые состояния¹⁾. Таким образом, требуется построение последовательного квантового теоретико-полевого описания нейтринных осцилляций.

Для описания нейтринных осцилляций в рамках квантовой теории поля и S-матричного подхода необходимо каким-то образом учесть конечность расстояний и временных интервалов. Первый шаг в этом направлении был сделан еще в 1982 г. в статье [6]. В ней использовался стандартный пертурбативный S-матричный формализм, где массовые состояния нейтрино, распространяющиеся от источника к детектору, считались виртуальными частицами, а осцилляции возникали в результате интерференции амплитуд, соответствующих разным массовым состояниям нейтрино. Предполагалось, что нейтрино рождаются и детектируются ядрами, и состояния ядер описывались дельта-функциями их координат, в то время как остальные частицы описывались плоскими волнами. Эта идея получила дальнейшее развитие в работах [7–12], где для описания всех взаимодействующих частиц использовались ло-

¹⁾ Напомним, что согласно принципу суперпозиции состояний допустимы только линейные комбинации состояний одной и той же квантовой системы, т. е. комбинации состояний, эволюция которых во времени описывается одним и тем же гамильтонианом. Очевидно, что это не так для массовых состояний нейтрино.

* E-mail: volobuev@theory.sinp.msu.ru

кализованные волновые пакеты. Однако расчеты в рамках подхода с волновыми пакетами оказываются очень сложными. Причина в том, что стандартный формализм матрицы рассеяния плохо приспособлен для описания процессов, происходящих на конечных пространственно-временных интервалах.

В работах [13–18] был развит модифицированный пертурбативный подход к описанию нейтринных осцилляций. Он основан на диаграммной технике Фейнмана в координатном представлении, дополненной модифицированными правилами перехода к импульсному представлению. Последние отражают геометрию экспериментов по осцилляциям нейтрино и приводят к модификации фейнмановского пропагатора виртуальных массовых состояний нейтрино в импульсном представлении. А именно, возникает зависящий от расстояния пропагатор массовых состояний нейтрино в импульсном представлении, в то время как остальные правила Фейнмана в этом представлении остаются прежними. Описание в терминах плоских волн позволяет избежать громоздких вычислений, но при этом уловить суть явления.

Известно, что внешние поля и материя влияют на осцилляции нейтрино [3]. Вопрос о том, как магнитное поле влияет на нейтринные осцилляции, и его следствия для проблемы солнечных нейтрино изучались в рамках стандартного квантово-механического описания в статьях [19–25]. Однако эта проблема никогда не изучалась в рамках квантового теоретико-полевого описания осцилляций нейтрино в терминах волновых пакетов, поскольку соответствующие вычисления были бы слишком сложными. В настоящей работе мы изучаем осцилляции нейтрино в постоянном магнитном поле в модифицированном формализме. Мы будем рассматривать нейтрино малых энергий, порядка 1 МэВ и меньше, для которых влияние вещества на осцилляции считается незначительным и им можно пренебречь. Мы анализируем только возможные эффекты, связанные с магнитным полем. Подход позволяет разобраться с проблемой солнечных нейтрино и учесть структуру Солнца.

В дальнейшем предполагается, что нейтрино рождаются и регистрируются за счет взаимодействия заряженных и нейтральных токов с ядрами и электронами в отсутствие поля, но считается, что распространение частиц происходит в области магнитного поля. Мы рассматриваем случай протяженного источника, размер которого все же много меньше расстояния между источником и детектором. Мы будем рассматривать солнечное ядро как источник нейтрино именно таким образом. В разд. 2 мы из-

лагаем теорию осцилляций нейтрино в модифицированном подходе. В разд. 3 применяем результаты к конкретным примерам с солнечными нейтрино, а именно: к рождению нейтрино в распадах ^{15}O и ^{13}N или электронном захвате ^7Be и регистрации при помощи Ga–Ge или черенковского детектора.

2. ОСЦИЛЛЯЦИИ НЕЙТРИНО В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Хотя мы будем рассматривать протяженный источник, его размер, как и размер детектора, все равно должен быть намного меньше расстояния между источником и детектором. Таким образом, можно использовать одномерное приближение, когда импульсы нейтрино направлены вдоль линии, соединяющей центры источника и детектора.

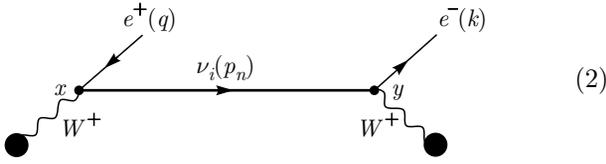
Мы начнем с приближения точечного источника и детектора, а затем проведем интегрирование по объему источника, чтобы учесть его размер.

Мы работаем в рамках минимального расширения Стандартной модели правыми синглетами нейтрино. Лагранжиан слабого взаимодействия лептонов имеет вид

$$L_{int}^{lep} = -\frac{g}{2\sqrt{2}} \left(\sum_{i,k=1}^3 \bar{l}_i \gamma^\mu (1-\gamma^5) U_{ik} \nu_k W_\mu^- + \text{H.c.} \right) + \frac{g \sin^2 \theta_w}{\cos \theta_w} \sum_{i=1}^3 \bar{l}_i \gamma^\mu l_i Z_\mu - \frac{g}{4 \cos \theta_w} \sum_{i=1}^3 \bar{l}_i \gamma^\mu (1-\gamma^5) l_i Z_\mu + \frac{g}{4 \cos \theta_w} \sum_{k=1}^3 \bar{\nu}_k \gamma^\mu (1-\gamma^5) \nu_k Z_\mu, \quad (1)$$

где l_i — поле заряженного лептона i -го поколения, U_{ik} — матрица Понтекорво–Маки–Накагавы–Сакаты (ПМНС), ν_k обозначает поле нейтрино с определенной массой m_k , матрица γ^5 определяется как $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$.

Сначала рассмотрим процесс в вакууме, когда нейтрино рождается и регистрируется за счет взаимодействия заряженного тока с ядрами. Диаграмма процесса в низшем порядке теории возмущений представлена в формуле (2). Предполагается, что точки рождения и детектирования x и y разделены фиксированным макроскопическим расстоянием L вдоль единичного вектора \mathbf{n} , направленного из центра источника нейтрино в центр нейтринного детектора. Промежуточное массовое состояние нейтрино является виртуальной частицей, описываемой



$$S_i^c(p, \mathbf{n}, L) = i \frac{\hat{p} + \gamma \cdot \mathbf{n} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n} - \sqrt{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n})^2 + p^2 - m_i^2} \right) + m_i}{2\sqrt{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n})^2 + p^2 - m_i^2 + i\epsilon}} \times \exp \left\{ -i \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n} - \sqrt{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n})^2 + p^2 - m_i^2} \right) L \right\}, \quad (2)$$

пропагатором Фейнмана в координатном представлении. Закрашенные кружки представляют матричные элементы слабого заряженного адронного тока. Амплитуда должна быть просуммирована по индексу $i = 1, 2, 3$ массового состояния нейтрино.

Амплитуда процесса в координатном представлении может быть построена по правилам Фейнмана, сформулированным, например, в учебнике [26]. Для перехода к импульсному представлению необходимо проинтегрировать ее по x и y по пространству Минковского. Однако такое прямое интегрирование привело бы к потере информации о пространственно-временном интервале между событиями рождения и детектирования. Таким образом, для описания процессов, протекающих на конечных пространственных и временных интервалах, необходимо зафиксировать расстояние между точками рождения и регистрации нейтрино. В работе [6] это было достигнуто путем того, что матричные элементы адронных токов в координатном представлении были взяты пропорциональными дельта-функциям $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)$, $\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}_2)$ с фиксированным $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 = L\mathbf{n}$. В нашем подходе мы фиксируем не положения начального и конечного ядер, а расстояние L между точками взаимодействия вдоль единичного вектора \mathbf{n} , направленного от источника к детектору, вводя под интеграл дельта-функцию $\delta(\mathbf{n} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}) - L)$, что позволяет обобщить стандартный пертурбативный формализм для случая процессов, проходящих на конечных расстояниях.

Введение дельта-функции формально эквивалентно замене стандартного фейнмановского пропагатора $S_i^c(y - x)$ массового состояния нейтрино ν_i в координатном представлении на

$$S_i^c(y - x) \delta(\mathbf{n} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}) - L).$$

Фурье-образ этого выражения мы называем зависящим от расстояния пропагатором массового состояния нейтрино ν_i в импульсном представлении [13]:

$$S_i^c(p, \mathbf{n}, L) \equiv \int d^4z e^{ipz} S_i^c(z) \delta(\mathbf{n} \cdot \mathbf{z} - L). \quad (3)$$

Интеграл можно вычислить точно методом контурного интегрирования:

где $\hat{p} = \gamma^\mu p_\mu$.

Как было показано в статье [9], виртуальные частицы, распространяющиеся на макроскопические расстояния, находятся почти на массовой поверхности, и для импульсов \mathbf{p} , удовлетворяющих условию $|p^2 - m_i^2| / (\mathbf{p} \cdot \mathbf{n})^2 \ll 1$, зависящий от расстояния пропагатор можно привести к простому виду:

$$S_i^c(p, \mathbf{n}, L) = i \frac{\hat{p} + m_i}{2\mathbf{p} \cdot \mathbf{n}} \exp \left\{ i \frac{p^2 - m_i^2}{2\mathbf{p} \cdot \mathbf{n}} L \right\}. \quad (5)$$

Это приближение всегда справедливо для импульсов нейтрино \mathbf{p} , направленных вдоль вектора \mathbf{n} , $\mathbf{p} \cdot \mathbf{n} = |\mathbf{p}|$, которые являются единственно необходимыми для вычисления амплитуд.

Этот зависящий от расстояния пропагатор отличается от найденного в статье [6] тем, что последний представляет собой оператор $\hat{p} + m_i$, умноженный на сферическую волну, тогда как в формуле (5) этот оператор умножается на экспоненту, аналогичную той, которая появляется в стандартном плосковолновом приближении. Отметим также, что зависящий от расстояния пропагатор, очень похожий на наш, был найден в работе [27].

Использование выражения (5) вместо обычного фейнмановского пропагатора для построения амплитуды в импульсном представлении позволяет последовательно описать осцилляции нейтрино в вакууме [14–17]. Чтобы применить этот подход к описанию осцилляции нейтрино в магнитном поле, нам нужно сначала найти соответствующий пропагатор нейтрино в поле. Для этого рассмотрим уравнение движения массового состояния нейтрино во внешнем электромагнитном поле:

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - m_i - \frac{1}{2} \mu_0 m_i F_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu} \right) \nu_i(x) = 0, \quad (6)$$

где магнитный момент i -го массового состояния нейтрино, пропорциональный его массе, равен $\mu_i = \mu_0 m_i$, и $\sigma^{\mu\nu} = (i/2) [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$, и мы пренебрегли переходными магнитными моментами, которые предполагаются много меньшими, чем дипольные магнитные моменты μ_i . В Стандартной модели параметр $\mu_0 = 3eG_F/8\sqrt{2}\pi^2$. Таким образом, магнитные моменты нейтрино оказываются по крайней мере на 10 порядков меньше, чем магнетон Бора для

экспериментально разрешенных масс нейтрино, но они могут быть значительно больше в расширениях Стандартной модели.

В однородном электромагнитном поле функция Грина уравнения (6) в импульсном представлении имеет вид

$$S_i^c(p) = i \left\{ (p^2 - m_i^2) (p^2 - m_i^2 + i\varepsilon) - \mu_0^2 m_i^2 [(p^2 + m_i^2) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - 4F_{\mu\nu} p^\nu F^{\mu\sigma} p_\sigma] + \frac{1}{4} \mu_0^4 m_i^4 \left[(F_{\mu\nu} F^{\mu\nu})^2 + (F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu})^2 \right] \right\}^{-1} \times \left\{ (p^2 - m_i^2) (\hat{p} + m_i) - \frac{1}{2} \mu_0^2 m_i^2 F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} (\hat{p} - m_i) - 2\mu_0^2 m_i^2 F_{\mu\nu} F^{\nu\sigma} p_\sigma \gamma^\mu + 2\mu_0 m_i^2 \tilde{F}_{\mu\nu} p^\nu \gamma^\mu \gamma^5 + \mu_0 m_i \left[\frac{1}{2} (p^2 + m_i^2) F_{\mu\nu} - \frac{1}{4} \mu_0^2 m_i^2 F^{\rho\sigma} \times (F_{\rho\sigma} F_{\mu\nu} + \tilde{F}_{\rho\sigma} \tilde{F}_{\mu\nu}) - 2F_{\mu\rho} p^\rho p_\nu \right] \sigma^{\mu\nu} - \frac{i}{2} \mu_0^2 m_i^3 F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} \gamma^5 \right\}, \quad (7)$$

где $\tilde{F}^{\mu\nu} = -(1/2)\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}$, а стандартный полностью антисимметричный тензор определяется формулой $\varepsilon^{0123} = -1$.

Для однородного магнитного поля \mathbf{H} имеем $F_{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu\nu k0} H^k$, $k = 1, 2, 3$. Тогда знаменатель функции Грина (7) дает следующее дисперсионное соотношение для нейтрино:

$$(p^0)^2 = \mathbf{p}^2 + m_i^2 + \mu_0^2 m_i^2 \mathbf{H}^2 \pm \pm 2\mu_0 m_i \sqrt{\mathbf{p}^2 \mathbf{H}_\perp^2 + m_i^2 \mathbf{H}^2}, \quad (8)$$

где \mathbf{H}_\perp обозначает компоненту магнитного поля \mathbf{H} , поперечную по отношению к направлению распространения нейтрино $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$. Это дисперсионное соотношение совпадает с таковым для нейтрона в магнитном поле, которое было впервые получено в работе [28] и недавно воспроизведено для нейтрино в рамках стандартного подхода в работе [24].

Как мы уже отмечали, магнитный момент нейтрино чрезвычайно мал, так что справедливо соотношение $\mu_0^2 m_i^2 \mathbf{H}^2 \ll \mathbf{p}^2$. Мы пренебрегаем членами порядка 2 и выше по μ_0 в (7) и переходим в координатное представление. Затем, подставляя функцию Грина в координатном представлении в определение (3) зависящего от расстояния пропагатора, считая импульс нейтрино параллельным \mathbf{n} , а также пренебрегая массами нейтрино всюду, кроме экспоненты, получаем зависящий от расстояния пропагатор мас-

сового состояния нейтрино в однородном магнитном поле в импульсном представлении:

$$S_i^c(p, L, \mathbf{H}) = i \frac{\hat{p}(1 - i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma})}{4|\mathbf{p}|} \exp \left\{ i \frac{p^2 - m_i^2 + 2\mu_0 m_i |\mathbf{p}| H_\perp}{2|\mathbf{p}|} L \right\} + i \frac{\hat{p}(1 + i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma})}{4|\mathbf{p}|} \exp \left\{ i \frac{p^2 - m_i^2 - 2\mu_0 m_i |\mathbf{p}| H_\perp}{2|\mathbf{p}|} L \right\}. \quad (9)$$

Здесь $H_\perp = |\mathbf{H}_\perp|$, мы полагаем $m_i^2 \mathbf{H}^2 \ll \mathbf{p}^2 \mathbf{H}_\perp^2$, и

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{h}}{\sqrt{1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{h})^2}}, \quad \mathbf{h} \equiv \frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|}, \quad \mathbf{j}^2 = 1. \quad (10)$$

Формулы (5) и (9) означают, что в магнитном поле каждое массовое состояние нейтрино расщепляется на два состояния, соответствующие двум возможным ориентациям спина и энергиям. Числители в экспонентах, $p^2 - m_i^2 \mp 2\mu_0 m_i |\mathbf{p}| H_\perp$, определяют сход виртуальных нейтрино с массовой поверхностью, что согласуется с дисперсионным соотношением (8) в нашем приближении.

Мы видим, что зависящий от расстояния пропагатор по существу зависит только от поперечной составляющей магнитного поля. В дальнейшем мы пренебрегаем продольной составляющей поля, считаем магнитное поле поперечным и обозначаем $H = |\mathbf{H}|$. Хотя пропагатор (9) был выведен для случая постоянного однородного магнитного поля, его можно использовать и для поперечного магнитного поля, величина которого меняется на пути нейтрино адиабатически, т. е. если выполняется условие

$$|\mu_0 m_{max} (\mathbf{n} \cdot \nabla) H| \ll \frac{|\mathbf{p}|}{d}, \quad (11)$$

где d — характерный размер области поля, m_{max} — наибольшая из масс нейтрино. Это условие уточняет условие адиабатичности для магнитного поля, найденное ранее в работе [22]. В отличие от условия в этой статье, формула (11) учитывает магнитные моменты нейтрино, размер области поля и гарантирует, что член $(p^2 - m_i^2)/2|\mathbf{p}|$ в экспоненте можно считать постоянным вдоль пути нейтрино. Однако поле H_\perp в формуле (9) следует заменить на среднее поле

$$\bar{H} = \frac{1}{L} \int_0^L H(l) dl, \quad (12)$$

так учитывается изменение магнитного поля вдоль пути нейтрино.

Используя зависящий от расстояния пропагатор (9), в приближении взаимодействия Ферми мы

можем записать амплитуду процесса, отвечающего диаграмме (2), в импульсном представлении следующим образом:

$$M = -i \frac{G_F^2}{8 |\mathbf{p}_n|} j_\rho^{(2)} (\mathbf{P}^{(2)}, \mathbf{P}^{(2')}) \bar{u}(\mathbf{k}) \gamma^\rho (1 - \gamma^5) \hat{p}_n \times \\ \times \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^2 \left[(1 - \mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \times \right. \\ \left. \times \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_i^2 + 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_i \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} + \right. \\ \left. + (1 + \mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_i^2 - 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_i \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} \right] \times \\ \times \gamma^\mu (1 - \gamma^5) v(\mathbf{q}) j_\mu^{(1)} (\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(1')}). \quad (13)$$

Здесь мы для краткости опускаем индексы поляризации фермионов, а массы нейтрино не учитываем нигде, кроме показателя экспоненты. 4-импульсы частиц обозначаются так, как показано на диаграмме (2): q , p_n и k — 4-импульсы соответственно позитрона, промежуточного виртуального нейтрино и электрона. Матричные элементы слабого адронного тока, соответствующие закрашенным кружкам, равны

$$j_\mu^{(1)} (\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(1')}) = \\ = \left\langle \frac{A_1}{Z_1 - 1} X (\mathbf{P}^{(1')}) \left| j_\mu^{(h)} \right| \frac{A_1}{Z_1} X (\mathbf{P}^{(1)}) \right\rangle, \quad (14) \\ j_\rho^{(2)} (\mathbf{P}^{(2)}, \mathbf{P}^{(2')}) = \\ = \left\langle \frac{A_2}{Z_2 + 1} X (\mathbf{P}^{(2')}) \left| j_\rho^{(h)} \right| \frac{A_2}{Z_2} X (\mathbf{P}^{(2)}) \right\rangle,$$

где импульсы ядер 1 $\left(\frac{A_1}{Z_1} X \right)$, 1' $\left(\frac{A_1}{Z_1 - 1} X \right)$, 2 $\left(\frac{A_2}{Z_2} X \right)$, 2' $\left(\frac{A_2}{Z_2 + 1} X \right)$ обозначены как $\mathbf{P}^{(l)}$, $l = 1, 1', 2, 2'$.

В приближении нулевых масс нейтрино всюду, кроме экспоненты, квадрат модуля амплитуды (13), усредненный по поляризациям начальных ядер и просуммированный по поляризациям конечных частиц и ядер (операция усреднения и суммирования обозначается угловыми скобками), факторизуется. При этом мы также пренебрегаем членами, пропорциональными p_n^2 , которые в силу теоремы Гримуса–Штокенгера [9] имеют порядок квадрата масс нейтрино. При квадрировании амплитуды (13) члены, содержащие вектор \mathbf{j} , взаимно уничтожаются, и мы получаем следующий результат:

$$\langle |M|^2 \rangle = \langle |M_P|^2 \rangle \langle |M_D|^2 \rangle \times \\ \times \frac{1}{4 \mathbf{p}_n^2} P_{ee} (|\mathbf{p}_n|, L, \bar{H}). \quad (15)$$

Здесь

$$\langle |M_P|^2 \rangle = 4G_F^2 \left[-g^{\mu\nu} (qp_n) + q^\mu p_n^\nu + p_n^\mu q^\nu - \right. \\ \left. - i\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} q_\rho (p_n)_\sigma \right] W_{\mu\nu}^{(1)} \quad (16)$$

— квадрат модуля амплитуды процесса рождения;

$$\langle |M_D|^2 \rangle = 4G_F^2 \left[-g^{\mu\nu} (p_n k) + p_n^\mu k^\nu + \right. \\ \left. + k^\mu p_n^\nu - i\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} (p_n)_\rho k_\sigma \right] W_{\mu\nu}^{(2)} \quad (17)$$

— квадрат модуля амплитуды процесса детектирования;

$$W_{\mu\nu}^{(l)} = W_{\mu\nu}^{(l,S)} + iW_{\mu\nu}^{(l,A)} = \left\langle j_\mu^{(l)} (j_\nu^{(l)})^+ \right\rangle, \quad (18) \\ l = 1, 2,$$

— ядерные тензоры, характеризующие взаимодействие ядер 1, 1' и 2, 2' с лептонами, их симметричные части $W_{\mu\nu}^{(l,S)}$ вещественные, а антисимметричные $iW_{\mu\nu}^{(l,A)}$ — мнимые;

$$P_{ee} (|\mathbf{p}_n|, L, \bar{H}) = 1 - \sum_{\substack{i,k=1 \\ k < i}}^3 |U_{1i}|^2 |U_{1k}|^2 \times \\ \times \left\{ \sin^2 \left[\left(\frac{\Delta m_{ik}^2}{4 |\mathbf{p}_n|} - \frac{\mu_0 \Delta m_{ik} \bar{H}}{2} \right) L \right] + \right. \\ + \sin^2 \left[\left(\frac{\Delta m_{ik}^2}{4 |\mathbf{p}_n|} - \frac{\mu_0 \Sigma m_{ik} \bar{H}}{2} \right) L \right] + \\ + \sin^2 \left[\left(\frac{\Delta m_{ik}^2}{4 |\mathbf{p}_n|} + \frac{\mu_0 \Sigma m_{ik} \bar{H}}{2} \right) L \right] + \\ \left. + \sin^2 \left[\left(\frac{\Delta m_{ik}^2}{4 |\mathbf{p}_n|} + \frac{\mu_0 \Delta m_{ik} \bar{H}}{2} \right) L \right] \right\} - \\ - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 \sin^2 (\mu_0 m_i \bar{H} L) \quad (19)$$

— вероятность осцилляций нейтрино, зависящая от модуля $|\mathbf{p}_n|$ импульса нейтрино, L — расстояние между источником и детектором, \bar{H} — среднее значение поперечного магнитного поля; мы также вводим обозначения, аналогичные обычным:

$$\Delta m_{ik}^2 \equiv m_i^2 - m_k^2, \quad \Delta m_{ik} \equiv m_i - m_k, \quad (20) \\ \Sigma m_{ik} \equiv m_i + m_k.$$

В случае двух ароматов нейтрино формула (19) согласуется с формулами, полученными в работах [24, 25] для однородного магнитного поля, хотя и выглядит иначе.

Заметим, что в рассматриваемом процессе сохраняются энергия и импульс, так как нейтрино рождаются и детектируются в отсутствие магнитного поля, и поле поперечно траектории нейтрино. Для нахождения вероятности процесса мы должны следовать рецепту, сформулированному в работах [14–16], и перед интегрированием по фазовому объему конечных частиц умножить выражение (15) не только на дельта-функцию сохранения энергии-импульса, но и на дельта-функцию, которая будет гарантировать, что импульс \mathbf{p}_n промежуточных нейтрино направлен вдоль вектора \mathbf{n} . Естественно выбрать $p_n^2 = 0$, т. е. вычислить вероятность в том же приближении безмассовых нейтрино, в каком мы вычислили квадрат модуля амплитуды. Конкретное значение p_n , удовлетворяющее этому условию, обозначим через p , где \mathbf{p} направлен от источника к детектору, а $p^2 = 0$.

Таким образом, мы умножаем квадрат модуля амплитуды на дельта-функцию сохранения энергии-импульса

$$(2\pi)^4 \delta(P^{(1)} + P^{(2)} - P^{(1')} - q - P^{(2')} - k)$$

и на дельта-функцию

$$2\pi \delta(P^{(1)} - P^{(1')} - q - p),$$

а также подставляем p вместо p_n везде в (15) [14]. Поступая таким образом, мы фиксируем импульс промежуточных нейтрино, направление которого определяется взаимным расположением источника и детектора, и после интегрирования по фазовому объему находим дифференциальную вероятность d^3W/d^3p процесса с определенным импульсом нейтрино. Поскольку экспериментальная ситуация определяет только направление импульса нейтрино, но не его абсолютную величину, мы должны также проинтегрировать d^3W/d^3p по $|\mathbf{p}|$ по всем допустимым значениям. Выполняя эту процедуру расчета, приходим к вероятности процесса с точечными источником и детектором:

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} \frac{d^3W_P}{d^3p} W_D P_{ee}(|\mathbf{p}|, L, \bar{H}) |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}|. \quad (21)$$

Здесь d^3W_P/d^3p — дифференциальная вероятность распада ядра 1 на ядро 1', позитрон и безмассовый фермион с импульсом \mathbf{p} , W_D — вероятность процесса рассеяния безмассового фермиона с импульсом \mathbf{p} и ядра 2 с образованием ядра 2' и электрона.

В (21) нижний предел интегрирования $|\mathbf{p}|_{min}$ определяется порогом процесса регистрации, а верхний $|\mathbf{p}|_{max}$ — законом сохранения энергии-импульса в вершине рождения. В дальнейшем начальные ядра 1 и 2 будем считать покоящимися и положим их импульсы $\mathbf{P}^{(1)}$, $\mathbf{P}^{(2)}$ равными нулю. Тогда пределы интегрирования даются выражениями [29]

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}|_{min} &= \frac{(M_{2'} + m_e)^2 - M_2^2}{2M_2}, \\ |\mathbf{p}|_{max} &= \frac{M_1^2 - (M_{1'} + m_e)^2}{2M_1}, \end{aligned} \quad (22)$$

где M_l , $l = 1, 1', 2, 2'$, — массы ядер, а m_e — масса электрона.

Приведенный выше результат относится к случаю точечных источника и детектора, что означает, что их размеры пренебрежимо малы по сравнению с расстоянием между ними, а также по сравнению с длинами осцилляций и когерентности. Кроме того, предполагалось наличие магнитного поля на всем пути нейтрино. Наш следующий шаг — рассмотреть Солнце как источник, принимая во внимание его структуру. На самом деле нейтрино рождаются в солнечном ядре как протяженной области, и считается, что магнитное поле присутствует в основном внутри конвективной зоны Солнца [30], хотя гораздо более сильные магнитные поля могут существовать в зоне лучистого переноса [31].

Мы исходим из следующих предположений. Ядро Солнца имеет радиус $R_{core} = 173\,000$ км, конвективная зона занимает оболочку от $R_{conv} = 496\,000$ км почти до поверхности Солнца, $R_{Sun} = 696\,000$ км, так что толщина конвективной зоны равна $L_{conv} \equiv R_{Sun} - R_{conv} = 200\,000$ км. Радиус солнечного ядра R_{core} составляет всего около 0.12% от расстояния между Солнцем и Землей даже в перигелии, 147 млн км, поэтому можно пренебречь разницей углов, под которыми нейтрино, которые будут зарегистрированы, испускаются из разных точек источника. Одномерное приближение, необходимое при выводе зависящего от расстояния пропагатора (9), остается в силе.

В этом приближении можно найти максимальную относительную разность пробега через конвективную зону для нейтрино, вылетевшего из центра солнечного ядра и из его границы в направлении Земли:

$$\begin{aligned} \Delta_L &= \frac{\sqrt{R_{Sun}^2 - R_{core}^2} - \sqrt{R_{conv}^2 - R_{core}^2}}{R_{Sun} - R_{conv}} - 1 = \\ &= 0.047, \end{aligned} \quad (23)$$

т. е. менее 5%.

Предположим для простоты, что магнитное поле, удовлетворяющее соотношению адиабатичности (11), занимает только конвективную зону, касательно к любой сферической оболочке и аксиально-симметрично относительно оси вращения Солнца. Предполагается, что силовые линии магнитного поля лежат в плоскостях, перпендикулярных оси вращения Солнца. Нейтрино, которые проходят более длинный путь сквозь конвективную зону, подвержены влиянию более слабого поперечного поля H_{\perp} . Ослабление поперечного поля для граничных нейтрино по сравнению с центральными определяется отличием косинуса угла проекции от единицы и может достигать

$$\Delta_H = 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{R_{core}}{R_{conv}}\right)^2} = 0.063, \quad (24)$$

т. е. чуть больше 6 %.

Два эффекта, поправки из-за которых даются выражениями (23) и (24), работают друг против друга: нейтрино с более длинным пробегом в магнитном поле, как правило, испытывают влияние более слабого поперечного поля. Таким образом, осцилляционные фазы, набранные нейтрино, испущенными из разных точек источника, при движении через поле одинаковы в пределах погрешности $\Delta_L = 4.7\%$ как максимум. В принципе, эти геометрические эффекты можно учесть точно, однако это сделало бы приведенные ниже выражения гораздо более громоздкими. Это имеет смысл для конкретного эксперимента, но здесь мы пренебрегаем данной ошибкой среди других неточностей и предполагаем, что нейтрино, испускаемые из всех точек солнечного ядра, «чувствуют» одно и то же среднее поле \bar{H} на пути одной и той же длины L_{conv} .

Скорость реакции рождения в данной точке солнечного ядра предполагается пропорциональной плотности вещества в этой точке, $\rho(R)$, где R — расстояние от центра Солнца.

Для того чтобы получить нормированную вероятность регистрации электрона в процессе, в котором источником нейтрино является солнечное ядро, необходимо усреднить вероятность (21) по объему солнечного ядра с учетом распределения плотности и различной длины пути для нейтрино, испускаемых из разных точек источника. Делая это, разобьем ядро на сечения, для каждого из которых расстояние между точкой рождения и точкой детектирования нейтрино будет одинаковым. Эти сечения ортогональны \mathbf{n} , их положение определяется сдвигом r вдоль \mathbf{n} от центра ядра, $-R_{core} \leq r \leq R_{core}$

(отрицательное значение r соответствует сдвигу в противоположном направлении относительно \mathbf{n}). В свою очередь, сечения разбиваются на окружности, на которых плотность вещества ядра Солнца одинакова, и x — радиус такой окружности в текущем сечении, $0 \leq x \leq \sqrt{R_{core}^2 - r^2}$. Нормировка выбрана таким образом, чтобы вероятность в точке $L = 0$ в пределе равнялась единице для источника нулевого размера. Расстояние между центрами Солнца и детектора обозначается через L . Наконец, получаем вероятность осцилляций нейтрино от протяженного солнечного ядра в виде

$$\begin{aligned} \tilde{W}(L) &= \\ &= \frac{1}{N} \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho(\sqrt{r^2 + x^2}) \times \\ &\times \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_D W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H}). \quad (25) \end{aligned}$$

Здесь нормировочная постоянная есть

$$\begin{aligned} N &= M_{core} \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_D P_{ee}(|\mathbf{p}|, 0, \bar{H}) = \\ &= M_{core} \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_D, \quad (26) \end{aligned}$$

масса солнечного ядра —

$$M_{core} = \int_{core} \rho(R) dV = 4\pi \rho_c R_M^3, \quad (27)$$

и мы учитываем тот факт, что «магнитная» фаза набирается только внутри конвективной зоны, где присутствует внешнее поле, вследствие следующей модификации вероятности (19):

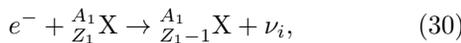
$$\begin{aligned}
 W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H}) = & 1 - \sum_{\substack{i,k=1 \\ k < i}}^3 |U_{1i}|^2 |U_{1k}|^2 \times \\
 & \times \left\{ \sin^2 \left[\frac{\Delta m_{ik}^2}{4|\mathbf{p}|} (L-r) - \frac{\mu_0 \Delta m_{ik} \bar{H}}{2} L_{magn} \right] + \right. \\
 & + \sin^2 \left[\frac{\Delta m_{ik}^2}{4|\mathbf{p}|} (L-r) - \frac{\mu_0 \Sigma m_{ik} \bar{H}}{2} L_{magn} \right] + \\
 & + \sin^2 \left[\frac{\Delta m_{ik}^2}{4|\mathbf{p}|} (L-r) + \frac{\mu_0 \Sigma m_{ik} \bar{H}}{2} L_{magn} \right] + \\
 & \left. + \sin^2 \left[\frac{\Delta m_{ik}^2}{4|\mathbf{p}|} (L-r) + \frac{\mu_0 \Delta m_{ik} \bar{H}}{2} L_{magn} \right] \right\} - \\
 & - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 \sin^2(\mu_0 m_i \bar{H} L_{magn}), \quad (28)
 \end{aligned}$$

где

$$L_{magn} = \begin{cases} 0, & L < R_{conv}, \\ L - R_{conv}, & R_{conv} \leq L < R_{Sun}, \\ L_{conv}, & L \geq R_{Sun}. \end{cases} \quad (29)$$

Само собой разумеется, что формула (25) имеет смысл только при $L > R_{core}$.

В случае, если нейтрино образуются в результате реакции электронного захвата,



дифференциальная вероятность распада d^3W_P/d^3p в (21) должна быть заменена дифференциальной вероятностью реакции (30). Это единственное изменение в формуле (21), однако реакция (30) имеет двухчастичное конечное состояние, следовательно, дифференциальная вероятность рождения d^3W_P/d^3p в этом случае сингулярна. Таким образом, интегрирование в (21) дает

$$\frac{dW}{d\Omega} = \frac{dW_P}{d\Omega} W_D P_{ee}(|\mathbf{p}|, L, \bar{H}). \quad (31)$$

Здесь модуль импульса нейтрино $|\mathbf{p}|$ не переменная, а величина, определяемая законом сохранения энергии-импульса, и $dW_P/d\Omega$ — дифференциальная вероятность рождения безмассового фермиона с импульсом, направленным от источника к детектору.

Если импульсы начальных частиц в реакции (30) фиксированы, то в ней рождаются моноэнергетические нейтрино. Однако в этом случае мы должны учитывать разброс импульсов начальных частиц. В солнечном ядре электроны и атомные ядра находятся в плазме, поэтому именно электроны вносят основной вклад в разброс энергии нейтрино, так как масса электрона как минимум на 3 порядка меньше

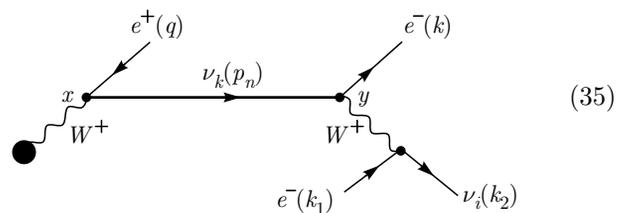
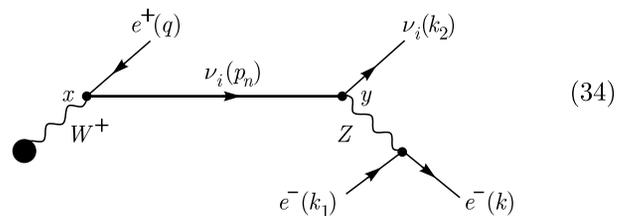
массы ядра. Тогда, пренебрегая движением ядер, в нерелятивистском случае необходимо усреднить выражение (31) по импульсу начального электрона с распределением Максвелла–Больцмана. Далее требуется усреднить результат по объему ядра Солнца аналогично предыдущему случаю, но с учетом распределения температуры $T(R)$. Это дает

$$\begin{aligned}
 \tilde{W}(L) = & \frac{1}{M_{core}} \times \\
 & \times \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho(\sqrt{r^2 + x^2}) \times \\
 & \times \frac{1}{N(\sqrt{r^2 + x^2})} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|, T(\sqrt{r^2 + x^2})) \times \\
 & \times \frac{dW_P}{d\Omega} W_D W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H}), \quad (32)
 \end{aligned}$$

где $f(|\mathbf{q}|, T)$ — распределение Максвелла–Больцмана по модулю $|\mathbf{q}|$ импульса начального электрона, характеризуемое температурой T , а

$$N(R) = \int_0^\infty d|\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|, T(R)) \frac{dW_P}{d\Omega} W_D. \quad (33)$$

Таким же образом можно рассмотреть процесс осцилляций нейтрино, когда нейтрино детектируются через взаимодействие как с заряженным, так и с нейтральным токами, как это показано на следующих диаграммах:



Обозначения для импульсов частиц те же, что и на диаграмме (2), но мы также вводим дополнительные

обозначения k_1 и k_2 для 4-импульсов налетающего электрона и улетающего нейтрино ν_i соответственно.

В приближении взаимодействия Ферми амплитуда в импульсном представлении, соответствующая диаграмме (34), имеет вид

$$\begin{aligned}
 M_i^{nc} = & i \frac{G_F^2}{8 |\mathbf{p}_n|} U_{1i}^* j_\mu^{(1)} \left(\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(1')} \right) \bar{\nu}_i (\mathbf{k}_2) (1 + \gamma^5) \gamma^\rho \hat{p}_n \times \\
 & \times \left[(1 - i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_i^2 + 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_i \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} + \right. \\
 & \left. + (1 + i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_i^2 - 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_i \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} \right] \times \\
 & \times \gamma^\mu (1 - \gamma^5) v(\mathbf{q}) \times \\
 & \times \left[\left(-\frac{1}{2} + \sin^2 \theta_w \right) \bar{u}(\mathbf{k}) \gamma_\rho (1 - \gamma^5) u(\mathbf{k}_1) + \right. \\
 & \left. + \sin^2 \theta_w \bar{u}(\mathbf{k}) \gamma_\rho (1 + \gamma^5) u(\mathbf{k}_1) \right]. \quad (36)
 \end{aligned}$$

Амплитуда, соответствующая диаграмме (35), просуммированная по индексу k , равна

$$\begin{aligned}
 M_i^{cc} = & -i \frac{G_F^2}{8 |\mathbf{p}_n|} U_{1i}^* j_\mu^{(1)} \left(\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(1')} \right) \times \\
 & \times \bar{u}(\mathbf{k}) (1 + \gamma^5) \gamma^\rho \hat{p}_n \sum_{k=1}^3 |U_{1k}|^2 \times \\
 & \times \left[(1 - i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_k^2 + 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_k \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} + \right. \\
 & \left. + (1 + i\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \exp \left\{ i \frac{p_n^2 - m_k^2 - 2 |\mathbf{p}_n| \mu_0 m_k \bar{H}}{2 |\mathbf{p}_n|} L \right\} \right] \times \\
 & \times \gamma^\mu (1 - \gamma^5) v(\mathbf{q}) \bar{\nu}_i (\mathbf{k}_2) \gamma_\rho (1 - \gamma^5) u(\mathbf{k}_1). \quad (37)
 \end{aligned}$$

Вероятность процесса необходимо просуммировать по индексу i .

Дифференциальная вероятность этого процесса может быть рассчитана по тем же правилам, которые сформулированы выше, и для случая точечного источника имеет вид [18]

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_D(L, \bar{H}) |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}|, \quad (38)$$

где дифференциальная вероятность $d^3 W_P/d^3 p$ рождения нейтрино та же самая, что и в формуле (21), полученной для того же процесса рождения и регистрации через взаимодействие с заряженным током, а вероятность детектирования определяется выражением

$$\begin{aligned}
 W_D(L, \bar{H}) = & \frac{G_F^2 m_e}{2\pi} \times \\
 & \times \left\{ \left[(1 - 4 \sin^2 \theta_w + 8 \sin^4 \theta_w) \Delta T - \right. \right. \\
 & \left. \left. - 4 \sin^2 \theta_w \left(\frac{\sin^2 \theta_w}{T_{max}} - \frac{m_e}{4\mathbf{p}^2} \right) \Delta T^2 + \frac{4}{3} \frac{\sin^4 \theta_w}{\mathbf{p}^2} \Delta T^3 \right] \times \right. \\
 & \times \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^2 \cos^2(\mu_0 m_i \bar{H} L) + \\
 & \left. + 8 \sin^2 \theta_w \left[\Delta T - \frac{m_e}{4\mathbf{p}^2} \Delta T^2 \right] P_{ee}(|\mathbf{p}|, L, \bar{H}) \right\}. \quad (39)
 \end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 \Delta T \equiv & T_{max} - T_{min}, \quad \Delta T^2 \equiv T_{max}^2 - T_{min}^2, \\
 \Delta T^3 \equiv & T_{max}^3 - T_{min}^3, \quad (40)
 \end{aligned}$$

T_{max} — максимальная кинетическая энергия конечного электрона в процессе детектирования, определяемая законом сохранения 4-импульса,

$$T_{max} = \frac{2\mathbf{p}^2}{2|\mathbf{p}| + m_e}, \quad (41)$$

T_{min} — минимальная кинетическая энергия этого электрона, доступная для регистрации данным детектором. Нижний предел $|\mathbf{p}|_{min}$ интегрирования в (38) связан с T_{min} соотношением, аналогичным (41), что дает

$$|\mathbf{p}|_{min} = \frac{1}{2} \left(T_{min} + \sqrt{T_{min}(T_{min} + 2m_e)} \right). \quad (42)$$

Учет размера источника, которым предполагается солнечное ядро, выполняется описанным выше образом, что дает аналогичное (25) выражение, а именно

$$\begin{aligned}
 \tilde{W}(L) = & \frac{1}{N} \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho \left(\sqrt{r^2 + x^2} \right) \times \\
 & \times \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \frac{d^3 W_P}{d^3 p} \hat{W}_D(L, r, \bar{H}) \quad (43)
 \end{aligned}$$

с нормировочной константой

$$N = M_{core} \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_D(0, \bar{H}), \quad (44)$$

где модифицированная вероятность детектирования $\hat{W}_D(L, r, \bar{H})$ получается из $W_D(L, \bar{H})$, определенной в (39), заменой $L \rightarrow L_{magn}$ в первом члене и $P_{ee}(|\mathbf{p}|, L, \bar{H}) \rightarrow W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H})$ во втором.

Если процессом рождения является реакция электронного захвата (30), то можно получить вероятность процесса осцилляций нейтрино, усредненную по разбросу импульса начального электрона и объему солнечного ядра, в виде

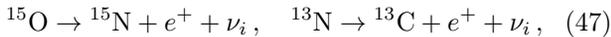
$$\begin{aligned} \tilde{W}(L) = & \frac{1}{M_{core}} \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \times \\ & \times \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho(\sqrt{r^2 + x^2}) \frac{1}{N(\sqrt{r^2 + x^2})} \times \\ & \times \int_0^\infty d|\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|, T(\sqrt{r^2 + x^2})) \times \\ & \times \frac{dW_P}{d\Omega} \hat{W}_D(L, r, \bar{H}), \end{aligned} \quad (45)$$

где

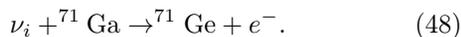
$$N(R) = \int_0^\infty d|\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|, T(R)) \frac{dW_P}{d\Omega} W_D(0, \bar{H}). \quad (46)$$

3. КОНКРЕТНЫЕ ПРИМЕРЫ

Рассмотрим несколько примеров. Сначала предположим, что нейтрино рождаются в реакциях CNO-цикла, распадах ^{15}O и ^{13}N ,



и регистрируются галлий-германиевым детектором,



В ядерной физике реакции (47), (48) называются разрешенными переходами [32]. Для таких реакций можно пренебречь положением и импульсом нуклона и предполагать, что он взаимодействует так, как если бы он находился в покое. Таким образом, зависимостью ядерных формфакторов от переданного импульса можно пренебречь [32]. Пренебрегая также возможным вкладом возбужденных состояний конечных ядер, мы можем аппроксимировать дифференциальную вероятность рождения нейтрино выражением

$$\begin{aligned} \frac{d^3W_P}{d^3p} = & C_P \sqrt{(|\mathbf{p}|_{max} - |\mathbf{p}|)(|\mathbf{p}|_{max} - |\mathbf{p}| + 2m_e)} \times \\ & \times (|\mathbf{p}|_{max} - |\mathbf{p}| + m_e) \end{aligned} \quad (49)$$

и вероятность детектирования нейтрино выражением

$$\begin{aligned} W_D = & C_D \sqrt{(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min})(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + 2m_e)} \times \\ & \times (|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + m_e), \end{aligned} \quad (50)$$

где $C_{P,D}$ — некоторые константы, а $|\mathbf{p}|_{max, min}$ определяются выражениями (22). Для выбранных процессов рождения и регистрации имеем

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}|_{min}^{\text{Ga-Ge}} = & 232 \text{ кэВ}, \quad |\mathbf{p}|_{max}^{\text{O}} = 1732 \text{ кэВ}, \\ |\mathbf{p}|_{max}^{\text{N}} = & 1199 \text{ кэВ}. \end{aligned} \quad (51)$$

Мы будем использовать следующие значения углов смешивания [33]:

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta_{12} = & 0.307, \quad \sin^2 \theta_{23} = 0.545, \\ \sin^2 \theta_{13} = & 2.18 \cdot 10^{-2}. \end{aligned} \quad (52)$$

Магнитные моменты нейтрино предполагаются пропорциональными их массам, $\mu_i = \mu_0 m_i$. Рассматривая нормальное упорядочение масс нейтрино, с учетом экспериментальных ограничений [33]

$$\begin{aligned} \Delta m_{21}^2 = & 7.53 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}^2, \\ \Delta m_{32}^2 = & 2.45 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}^2 \end{aligned} \quad (53)$$

и космологического предела [34, 35]

$$m_1 + m_2 + m_3 < 0.120 \text{ эВ} \quad (54)$$

будем исследовать набор масс

$$\begin{aligned} m_1 = & 0.0114 \text{ эВ}, \quad m_2 = 0.0143 \text{ эВ}, \\ m_3 = & 0.0515 \text{ эВ}. \end{aligned} \quad (55)$$

Эксперименты *Wogexino* [36] и *GEMMA* [37] устанавливают ограничение сверху на магнитный момент нейтрино величиной около $2.8 \cdot 10^{-11} \mu_B = 8.3 \cdot 10^{-18} \text{ эВ}^{-1}$, где $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ — магнетон Бора. Примем магнитный момент легчайшего нейтрино равным $\mu_1 = 3.5 \cdot 10^{-19} \text{ эВ}^{-1}$, что примерно в 25 раз меньше экспериментального предела. Это значение также определяет магнитные моменты двух других нейтрино.

Среднее поле \bar{H} в конвективной зоне принимается равным 10^4 Гс, как это было оценено в работе [22]. Эта оценка близка к оценкам в более поздней статье [30]. Для выполнения условия адиабатичности (11) при выбранном значении магнитного момента нейтрино градиент магнитного поля должен быть много меньше 10^{19} Гс/км, что, очевидно, выполняется. Ниже мы приводим расчеты для этого значения среднего поля и значений вокруг него.

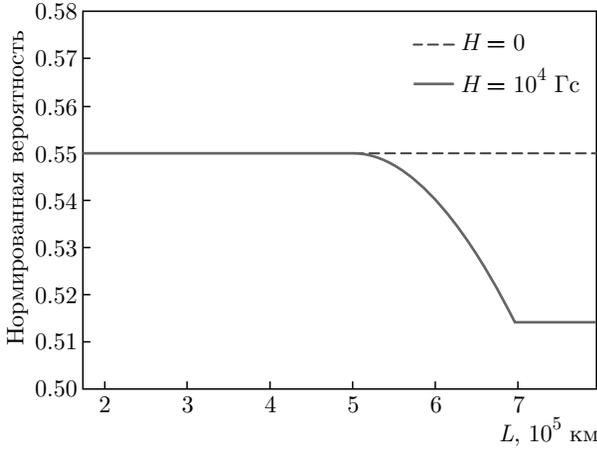


Рис. 1. Нормированная вероятность (25) процесса осцилляций нейтрино в магнитном поле в условиях Солнца; рождение в распаде ^{15}O или ^{13}N , регистрация Ga-Ge-детектором

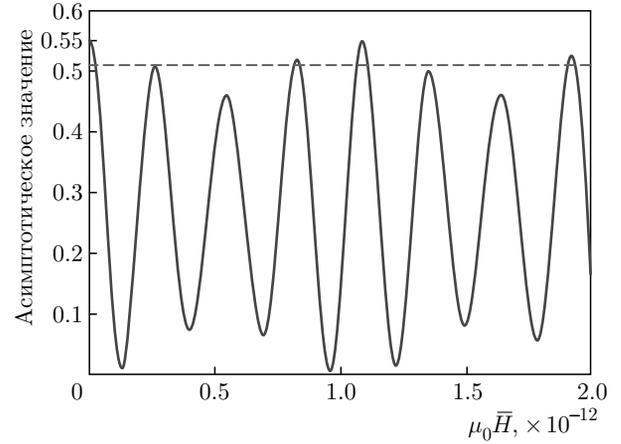


Рис. 2. Асимптотическое значение W_{asym} , даваемое формулой (57), как функция $\mu_0 \bar{H}$

Распределение плотности в солнечном ядре в зависимости от радиуса R может быть аппроксимировано экспоненциальной функцией: [31]

$$\rho(R) = \rho_c e^{-R/R_M}, \quad (56)$$

где $\rho_c = 150 \text{ г/см}^3$ — плотность в центре Солнца, а параметр $R_M = 9.754 \cdot 10^4 \text{ км}$ [38].

Выполняя численное интегрирование в (25) в рамках описанных приближений и допущений, мы приходим к результату, представленному на рис. 1. Крайняя левая точка соответствует границе ядра, $L = R_{core}$. Как было показано в статье [17], на этом расстоянии зависящие от энергии колебания исчезают, и графики одинаковы для источников с ядрами ^{15}O и ^{13}N . На графике виден переход от горизонтальной линии

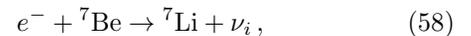
$$\sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 = 0.550,$$

которая является асимптотой осцилляций в отсутствие поля [17], через осцилляции в конвективной зоне к другой горизонтальной асимптоте, значение которой определяется суммарной фазой, накопленной нейтрино на пути в поле. Эта асимптота задается выражением (28) (или (19)) с усредненными зависящими от энергии осцилляциями и для обсуждаемой модели имеет вид

$$W_{asym} = \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 \sin^2(\mu_0 m_i \bar{H} L_{conv}), \quad (57)$$

что дает значение 0.513 в рамках наших предположений. Поскольку толщина конвективной зоны L_{conv} практически фиксирована, в то время как значения μ_0 и \bar{H} могут изменяться в зависимости от модели, полезно построить график асимптотического значения W_{asym} нейтринных осцилляций как функции произведения $\mu_0 \bar{H}$. Этот график показан на рис. 2, где штриховая линия изображает нижний предел, даваемый экспериментами GALLEX + GNO (согласно их измерениям, соответствующая величина составляет 0.58 ± 0.07 , в то время как эксперимент SAGE дает близкий результат 0.59 ± 0.07 [38]). Мы видим, что существует много значений произведения $\mu_0 \bar{H}$, совместных с экспериментальными ограничениями.

Рассмотрим теперь образование нейтрино при захвате электрона ядром бериллия,



с регистрацией тем же Ga-Ge-детектором (реакция (48)). Реакция (58) также является разрешенным переходом, поэтому мы пренебрегаем ядерными факторами. В нерелятивистском приближении, пренебрегая возбужденными состояниями ${}^7\text{Li}$, переходя от интегрирования по модулю импульса начального электрона $|\mathbf{q}|$ к интегрированию по модулю импульса промежуточного нейтрино $|\mathbf{p}|$, ве-

роятность (32) можно переписать следующим образом [18]:

$$\begin{aligned} \tilde{W}(L) &= \frac{1}{M_{core}} \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \times \\ &\times \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho(\sqrt{r^2 + x^2}) \frac{1}{N(\sqrt{r^2 + x^2})} \times \\ &\times \int_{\Delta}^{\infty} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \exp\left\{-\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(\sqrt{r^2 + x^2})}\right\} \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} \times \\ &\times \sqrt{(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min})(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + 2m_e)} \times \\ &\times (|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + m_e) W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H}), \quad (59) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} N(R) &= \int_{\Delta}^{\infty} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \exp\left\{-\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(R)}\right\} \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} \times \\ &\times \sqrt{(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min})(|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + 2m_e)} \times \\ &\times (|\mathbf{p}| - |\mathbf{p}|_{min} + m_e), \quad (60) \end{aligned}$$

$\Delta = M_{Be} + m_e - M_{Li} = 862$ кэВ есть энергетический выход реакции (58) (массой нейтрино пренебрегаем) и $|\mathbf{p}|_{min}$ дается в (51).

Будем аппроксимировать распределение температуры в солнечном ядре также экспоненциальной функцией,

$$T(R) = T_c e^{-R/R_T}, \quad (61)$$

где $T_c = 1.5 \cdot 10^7$ К — температура в центре Солнца, а параметр $R_T = 3.433 \cdot 10^5$ км [38].

Численное интегрирование (59) дает тот же результат, который изображен на рис. 1. Это связано с факторизацией осциллирующего множителя $W_{ee}(|\mathbf{p}|, L, r, \bar{H})$, а также с тем, что длины осцилляций намного меньше размера солнечного ядра даже для почти моноэнергетических нейтрино от реакции электронного захвата (58). Фактически осцилляционная картина в рассматриваемой постановке эксперимента описывается формулой (57), где сделана замена $L_{conv} \rightarrow L_{magn}$.

Ситуация с процессами нейтринных осцилляций, где нейтрино детектируются через взаимодействие как со слабым заряженным, так и с нейтральным током, иная, поскольку осциллирующий множитель

не факторизуется. Асимптотика осцилляций теперь зависит от характеристик процессов рождения и детектирования и имеющегося диапазона энергий. Рассмотрим рождение нейтрино в тех же распадах ^{15}O и ^{13}N и регистрацию черенковским детектором на водной основе. Для последнего имеем $|\mathbf{p}|_{min}^{Cher} = 421$ кэВ. Результаты численного интегрирования в (43) для обеих реакций рождения выглядят аналогично представленным на рис. 1, где левая и правая горизонтальны равны 0.645 и 0.431 для ^{15}O -источника, а для ^{13}N -источника эти горизонтальны равны 0.652 и 0.435.

В этом случае асимптотика осцилляций определяется выражением [18]

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{asym} &= \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 \sin^2(\mu_0 m_i \bar{H} L_{conv}) + \\ &+ C_{nc} \left(1 - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^2 \sin^2(\mu_0 m_i \bar{H} L_{conv}) - \right. \\ &\left. - \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 + \sum_{i=1}^3 |U_{1i}|^4 \sin^2(\mu_0 m_i \bar{H} L_{conv})\right), \quad (62) \end{aligned}$$

где коэффициент C_{nc} , учитывающий вклад нейтрального тока, имеет вид

$$\begin{aligned} C_{nc} &= \int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_{\nu_e e} |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}| \times \\ &\times \left(\int_{|\mathbf{p}|_{min}}^{|\mathbf{p}|_{max}} \frac{d^3 W_P}{d^3 p} W_{\nu_e e} |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}| \right)^{-1}, \quad (63) \end{aligned}$$

$W_{\nu_e e}$ — вероятность рассеяния безмассового флейворного состояния нейтрино ν_e на электроны, рассчитанная в рамках Стандартной модели. Численная оценка в нашем приближении дает $C_{nc} = 0.210$ для рождения нейтрино в распаде ^{15}O и $C_{nc} = 0.226$ для распада ^{13}N . Используя явный вид $W_{\nu_e e}$, в интервале энергий $420 \text{ кэВ} \leq |\mathbf{p}|_{min} < |\mathbf{p}|_{max} \leq 14 \text{ МэВ}$ можно ограничить коэффициент C_{nc} как $0.177 < C_{nc} < 0.321$. Стоит отметить, что C_{nc} уменьшается с ростом $|\mathbf{p}|$, т. е. вклад нейтрального тока в асимптотическое значение (62) уменьшается с увеличением энергии.

Наконец, рассмотрим рождение нейтрино в реакции электронного захвата ^7Be и регистрацию водным черенковским детектором. Вероятность (45) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \tilde{W}(L) &= \frac{1}{M_{core}} \int_{-R_{core}}^{R_{core}} dr \times \\ &\times \int_0^{\sqrt{R_{core}^2 - r^2}} dx 2\pi x \rho(\sqrt{r^2 + x^2}) \frac{1}{N(\sqrt{r^2 + x^2})} \times \\ &\times \int_{\Delta}^{\infty} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(\sqrt{r^2 + x^2})} \right\} \times \\ &\times \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} \hat{W}_D(L, r, \bar{H}), \end{aligned} \quad (64)$$

где

$$\begin{aligned} N(R) &= \int_{\Delta}^{\infty} d|\mathbf{p}| |\mathbf{p}|^2 \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(R)} \right\} \times \\ &\times \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} W_D(0, \bar{H}). \end{aligned} \quad (65)$$

Результаты численного интегрирования снова выглядят аналогично рис. 1, где левая горизонтальная асимптота равна 0.651, а правая — 0.435. Поскольку мы учитываем распределение температуры, асимптотическое значение в рассматриваемом случае дается той же формулой (62), но с переопределением

$$C_{nc} = \frac{4\pi}{M_{core}} \int_0^{R_{core}} \tilde{C}_{nc}(R) \rho(R) R^2 dR, \quad (66)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{nc}(R) &= \int_{\Delta}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(R)} \right\} \times \\ &\times \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} W_{\nu_{\mu e}} |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}| \times \\ &\times \left(\int_{\Delta}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{p}| - \Delta}{kT(R)} \right\} \times \right. \\ &\left. \times \sqrt{|\mathbf{p}| - \Delta} W_{\nu_{e e}} |\mathbf{p}|^2 d|\mathbf{p}| \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (67)$$

Однако ограничения на C_{nc} остаются такими же, как обсуждалось после формулы (63). Численная оценка с выбранными профилями плотности и температуры (56) и (61) дает $C_{nc} = 0.224$.

Отношение потока нейтрино от ${}^7\text{Be}$ к предсказанному стандартной солнечной моделью было измерено коллаборацией Vogehino и составило 0.62 ± 0.05 [39]. Это значение совместно с полученным асимптотическим значением 0.651 в вакууме и допускает вклад от солнечного магнитного поля. Однако значение 0.435, найденное для выбранных значений магнитных моментов нейтрино и магнитного

поля в конвективной зоне Солнца, несколько мало. Тем не менее для некоторых значений произведения $\mu_0 \bar{H}$, представленных на рис. 2, могут быть получены большие значения этого отношения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрены осцилляции нейтрино, рождающихся в протяженном солнечном ядре как источнике, с учетом солнечного магнитного поля в рамках Стандартной модели, минимально расширенной правыми синглетами нейтрино. Описание выполнено в терминах плоских волн и основано на диаграммной технике Фейнмана в координатном представлении, дополненной модифицированными правилами перехода к импульсному представлению, отражающими постановку эксперимента.

Модифицированный пертурбативный формализм, обобщающий стандартный S-матричный подход на случай квантовых процессов, протекающих на конечных пространственно-временных интервалах, позволяет учитывать конечный размер источника и распределения плотности и температуры внутри него. Это было проделано для солнечного ядра, а также была учтена структура Солнца. Исследованы четыре типа процессов нейтринных осцилляций: с рождением нейтрино в трехчастичном ядерном распаде или в реакции захвата электрона ядром и с детектированием через взаимодействие только с заряженным или с заряженным и нейтральным слабыми токами.

Рассмотрены конкретные примеры: рождение нейтрино в распадах ядер ${}^{15}\text{O}$ или ${}^{13}\text{N}$ или электронный захват ядром ${}^7\text{Be}$, детектирование нейтрино галлий-германиевым или водным черенковским детектором. Проанализированы асимптотические значения вероятности этих процессов, совпадающие с отношением экспериментально измеренного потока к предсказываемому стандартной солнечной моделью, и получено достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными.

Преимуществом формализма является техническая простота и физическая прозрачность. В нем не используются волновые пакеты, что значительно упрощает расчеты. По сути, они очень похожи на таковые в рамках стандартной техники диаграмм Фейнмана с плоскими волнами, главное отличие состоит в использовании зависящего от расстояния пропагатора вместо пропагатора Фейнмана. Флейворные состояния нейтрино в этом подходе излишни.

Благодарности. Авторы благодарны Э. Боосу, А. Лобанову, А. Пухову, Л. Сладю, М. Смолякову и Ю. Чувильскому за интересные и полезные обсуждения. Аналитические расчеты амплитуд выполнены с помощью пакетов ComrNEP и REDUCE.

Финансирование. Работа В. Егорова была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. М. Понтекорво, ЖЭТФ **33**, 549 (1957).
2. V. N. Gribov and B. Pontecorvo, Phys. Lett. B **28**, 493 (1969).
3. C. Giunti and C. W. Kim, *Fundamentals of Neutrino Physics and Astrophysics*, Oxford Univ. Press, Oxford (2007).
4. S. Bilenky, Lect. Notes Phys. **817**, 1 (2010).
5. B. Kayser, Phys. Rev. D **24**, 110 (1981).
6. И. Ю. Кобзарев, Л. Б. Окунь, Б. В. Мартемьянов и др., ЯФ **35**, 1210 (1982).
7. C. Giunti, C. W. Kim, J. A. Lee et al., Phys. Rev. D **48**, 4310 (1993).
8. A. D. Dolgov, L. B. Okun, M. V. Rotaev et al., arXiv: hep-ph/0407189 [hep-ph].
9. W. Grimus and P. Stockinger, Phys. Rev. D **54**, 3414 (1996).
10. M. Beuthe, Phys. Rep. **375**, 105 (2003).
11. A. G. Cohen, S. L. Glashow, and Z. Ligeti, Phys. Lett. B **678**, 191 (2009).
12. W. Grimus, J. Phys. G **47**, 085004 (2020), doi: 10.1088/1361-6471/ab716f [arXiv:1910.13776 [hep-ph]].
13. I. P. Volobuev, Int. J. Mod. Phys. A **33**, 1850075 (2018).
14. V. O. Egorov and I. P. Volobuev, Phys. Rev. D **97**, 093002 (2018).
15. И. П. Волобуев, В. О. Егоров, ЖЭТФ **155**, 839 (2019).
16. И. П. Волобуев, В. О. Егоров, ТМФ **199**, 104 (2019).
17. V. O. Egorov and I. P. Volobuev, Phys. Rev. D **100**, 033004 (2019).
18. V. Egorov and I. Volobuev, arXiv:2107.11570 [hep-ph].
19. A. Cisneros, Astrophys. Space Sci. **10**, 87 (1971).
20. K. Fujikawa and R. Shrock, Phys. Rev. Lett. **45**, 963 (1980).
21. J. Schechter and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D **24**, 1883 (1981) [erratum: Phys. Rev. D **25**, 283 (1982)].
22. М. Б. Волошин, М. И. Высоцкий, Л. Б. Окунь, ЖЭТФ **91**, 754 (1986).
23. E. K. Akhmedov and J. Pulido, Phys. Lett. B **553**, 7 (2003).
24. A. Popov and A. Studenikin, Eur. Phys. J. C **79**, 144 (2019).
25. A. V. Chukhnova and A. E. Lobanov, Phys. Rev. D **101**, 013003 (2020).
26. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантованных полей*, Наука, Москва (1984).
27. K. Fujikawa, arXiv:2009.08082 [hep-ph].
28. И. М. Тернов, В. Г. Багров, А. М. Хапаев, ЖЭТФ **48**, 921 (1965).
29. Е. Бюклинг, К. Каянти, *Кинематика элементарных частиц*, Мир, Москва (1975).
30. Y. Fan, Rev. Sol. Phys. **6**, 4 (2009).
31. T. I. Rashba, V. B. Semikoz, and J. W. F. Valle, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **370**, 845 (2006).
32. О. Бор, Б. Мотгелсон, *Структура атомного ядра*, т. 1, *Одночастичное движение*, Мир, Москва (1971).
33. P. A. Zyla et al. (Particle Data Group), Progr. Theor. Exp. Phys. **2020**, 083C01 (2020).
34. S. Vagnozzi, E. Giusarma, O. Mena et al., Phys. Rev. D **96**, 123503 (2017).
35. N. Aghanim et al. (Planck Collaboration), Astron. Astrophys. **641**, A6 (2020).
36. M. Agostini et al. (Borexino Collaboration), Phys. Rev. D **96**, 091103 (2017).
37. A. G. Beda, V. B. Brudanin, V. G. Egorov et al., Adv. High Energy Phys. **2012**, 350150 (2012).
38. J. N. Bahcall, M. H. Pinsonneault, and S. Basu, Astrophys. J. **555**, 990 (2001).
39. G. Bellini, J. Benziger, D. Bick et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 141302 (2011).

ОТНОШЕНИЕ ВЫХОДОВ АНТИЯДЕР И ЯДЕР В СТОЛКНОВЕНИЯХ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЯДЕР В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ БЫСТРОТ

А. И. Малахов*, А. А. Зайцев**

Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 17 марта 2022 г.,
после переработки 6 апреля 2022 г.
Принята к публикации 8 апреля 2022 г.

Представлены результаты расчетов отношения выхода античастиц к выходу частиц (\bar{p}/p , \bar{d}/d , $\overline{{}^3\text{He}}/{}^3\text{He}$) в протон-протонных и ядро-ядерных взаимодействиях с использованием параметра самоподобия в центральной области быстрых. Используемый подход основан на изучении взаимодействий релятивистских ядер в пространстве 4-скоростей. Результаты расчетов сравниваются с существующими экспериментальными данными в широкой области энергий (SPS, RHIC, LHC). В рамках этого подхода ранее были описаны инклюзивные спектры пионов и каонов и отношения их выходов в pp -столкновениях.

DOI: 10.31857/S0044451022080089
EDN: EGNUXP

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1998 году А. М. Балдин и А. И. Малахов опубликовали статью, в которой с помощью автомодельного подхода получили явное аналитическое выражение для инклюзивных сечений частиц, ядерных фрагментов и антиядер в столкновениях релятивистских ядер в центральной области быстрых [1]. В настоящее время появились соответствующие экспериментальные данные вплоть до энергии LHC. В настоящей работе мы приводим сравнение наших расчетов отношения выхода антиядер и ядер в релятивистских pp -столкновениях и в центральных АА-столкновениях в центральной области быстрых с имеющимися экспериментальными данными.

2. ПАРАМЕТР САМОПОДОБИЯ В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ БЫСТРОТ

Экспериментально наблюдаемые величины, характеризующие многокварковые процессы, представляют собой сечения множественного рождения частиц в релятивистских ядерных столкновениях

$$I + II \rightarrow 1 + \dots \quad (1)$$

В реакции (1) сталкивающиеся ядра обозначены номерами I и II, а вторичная зарегистрированная частица обозначена цифрой 1. Процесс (1) схематически представлен на рис. 1.

Для процесса (1), если мы наблюдаем только одну вторичную частицу, можно написать закон сохранения 4-импульса в следующем виде:

$$(N_I P_I + N_{II} P_{II} - P_1)^2 = (N_I m_0 + N_{II} m_0 + M)^2, \quad (2)$$

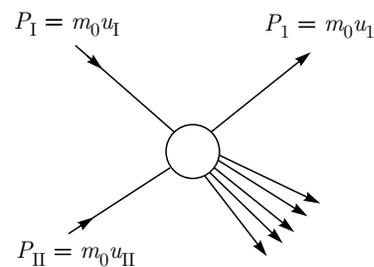


Рис. 1. Взаимодействие двух ядер: P_I — 4-импульс на нуклон ядра I; P_{II} — 4-импульс на нуклон ядра II и P_1 — 4-импульс вторичной частицы 1; u_I , u_{II} , u_1 — 4-скорости ядер I, II и частицы 1; m_0 — масса нуклона, m_1 — масса регистрируемой частицы

* E-mail: malakhov@jinr.ru

** E-mail: zaicev@jinr.ru

где N_I и N_{II} — кумулятивные числа (точнее, доли переданного 4-импульса) для ядер I и II, P_I и P_{II} — 4-импульсы на нуклон ядер I и II, соответственно, P_1 — 4-импульс частицы 1, m_0 — масса нуклона, M — масса частицы, обеспечивающей сохранение барионного числа, странности и других квантовых чисел. Для антиядер $M = m_1$, а для ядер $M = -m_1$, где m_1 — масса регистрируемой частицы. Для описания взаимодействий релятивистских ядер в пространстве 4-скоростей в работе [2] введен параметр самоподобия

$$\Pi = \min \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{(u_I N_I + u_{II} N_{II})^2} \right\}, \quad (3)$$

здесь u_I и u_{II} — 4-скорости ядер I и II.

В этом случае инвариантные сечения выхода инклюзивных частиц разных типов при ядерных взаимодействиях с атомными номерами A_I и A_{II} описываются универсальной зависимостью в широком диапазоне энергий и различных атомных номеров сталкивающихся ядер [3, 4]:

$$E \frac{d^3 \sigma}{dp^3} = C_1 A_I^{\alpha(N_I)} A_{II}^{\alpha(N_{II})} \exp \left(-\frac{\Pi}{C_2} \right), \quad (4)$$

где $\alpha(N_I) = 1/3 + N_I/3$, $\alpha(N_{II}) = 1/3 + N_{II}/3$, $C_1 = 1.9 \cdot 10^4$ мб · ГэВ⁻² · с³ · ср⁻¹ и $C_2 = 0.125 \pm 0.002$.

Поскольку $E d^3 \sigma / dp^3 = d^3 \sigma / (d\phi dy p_T dp_T)$, интегрируя выражение (4) по азимутальному углу ϕ , получаем (p_T — поперечный импульс регистрируемой частицы)

$$\frac{d^2 \sigma}{m_T dm_T dy} = 2\pi C_1 A_I^{\alpha(N_I)} \times \\ \times A_{II}^{\alpha(N_{II})} \exp \left(-\frac{\Pi}{C_2} \right). \quad (5)$$

Тогда мы можем написать

$$\frac{d^2 \sigma}{dm_T dy} = 2\pi m_T C_1 A_I^{\alpha(N_I)} \times \\ \times A_{II}^{\alpha(N_{II})} \exp \left(-\frac{\Pi}{C_2} \right). \quad (6)$$

В центральной области быстрот можно найти аналитическое выражение для Π [1, 4]. В этом случае N_I и N_{II} равны друг другу, $N_I = N_{II} = N$,

$$N = \left[1 + \sqrt{1 + \frac{\Phi_M}{\Phi^2}} \right] \Phi, \quad (7)$$

где

$$\Phi = \frac{1}{2m_0} \frac{m_{1T} \operatorname{ch} Y + M}{\operatorname{sh}^2 Y} \quad (8)$$

и

$$\Phi_M = \frac{M^2 - m_1^2}{4m_0^2 \operatorname{sh}^2 Y}. \quad (9)$$

Здесь m_{1T} — поперечная масса регистрируемой частицы, $m_{1T} = \sqrt{m_1^2 + p_T^2}$, Y — быстрота взаимодействующих ядер. Тогда получаем уравнение Балдина – Малахова:

$$\Pi = N \operatorname{ch} Y. \quad (10)$$

3. ОТНОШЕНИЕ ВЫХОДА АНТИЧАСТИЦ К ЧАСТИЦАМ

Для барионов из соотношений (7)–(9) получаем

$$\Pi_b = \frac{(m_{1T} \operatorname{ch} Y - m_1) \operatorname{ch} Y}{m_0 \operatorname{sh}^2 Y}, \quad (11)$$

а для антибарионов —

$$\Pi_a = \frac{(m_{1T} \operatorname{ch} Y + m_1) \operatorname{ch} Y}{m_0 \operatorname{sh}^2 Y}. \quad (12)$$

Для отношения выхода антибарионов к барионам мы получаем следующее выражение:

$$\text{Ratio} \left(\frac{\text{antibaryon}}{\text{baryon}} \right) = \frac{2\pi \int_0^\infty m_{1T} C_1 A_I^{\alpha(N_I)} A_{II}^{\alpha(N_{II})} \exp \left(-\frac{\Pi_a}{C_2} \right) dm_{1T}}{2\pi \int_0^\infty m_{1T} C_1 A_I^{\alpha(N_I)} A_{II}^{\alpha(N_{II})} \exp \left(-\frac{\Pi_b}{C_2} \right) dm_{1T}}. \quad (13)$$

В случае симметричных ядер ($A_I = A_{II} = A$) указанное выше выражение принимает следующий вид:

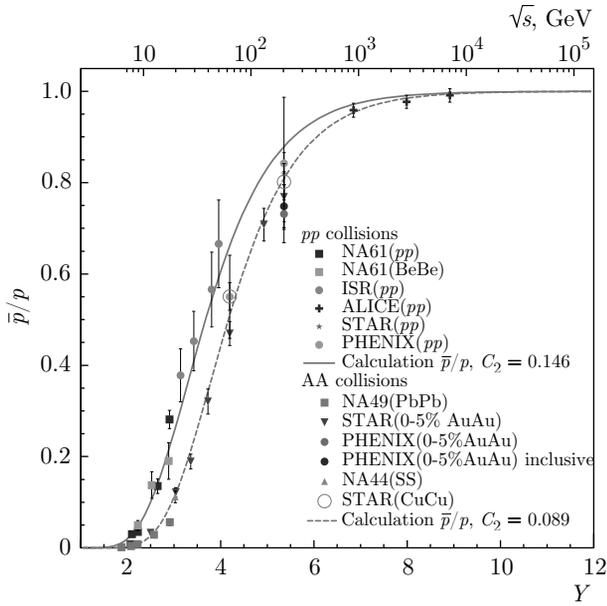


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости отношения выходов антипротонов к протонам в центральной области быстрой от быстроты Y и энергии \sqrt{s} сталкивающихся ядер в pp -столкновениях [5–16] и в наиболее центральных AA -столкновениях [11–17]. Расчеты представлены соответственно штриховой и сплошной линиями

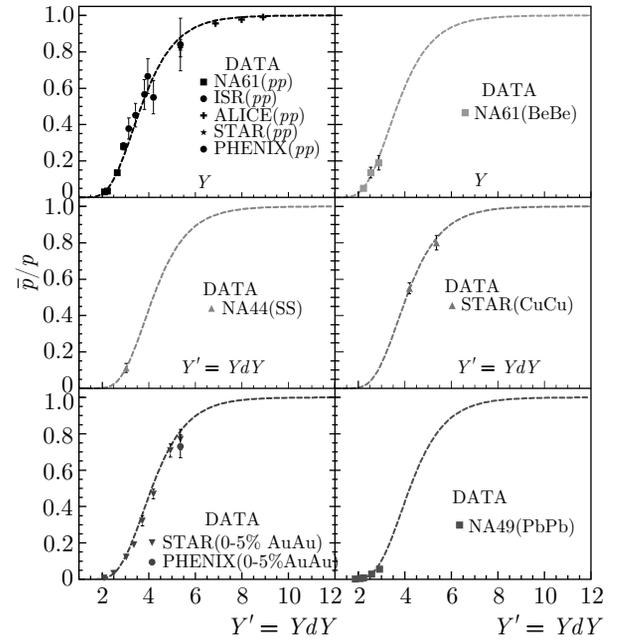


Рис. 3. Зависимости отношения выходов антипротонов к протонам в центральной области быстрой от быстроты взаимодействующих протонов Y для pp - и BeBe-столкновений и от $Y' = Y - dY$ ($dY \approx 0.5$) для SS-, CuCu-, AuAu- и PbPb-столкновений. Расчеты представлены штриховыми линиями

$$\begin{aligned} \text{Ratio} \left(\frac{\text{antibaryon}}{\text{baryon}} \right) &= A^{\frac{4}{3}} \frac{m_1}{m_0} \frac{1}{\text{sh}^2 Y} \times \\ &\times \frac{\int_0^\infty m_{1T} C_1 A^{\frac{2}{3}} \frac{m_{1T}}{m_0} \text{ch} Y \exp \left(-\frac{\Pi_a}{C_2} \right) dm_{1T}}{\int_0^\infty m_{1T} C_1 A^{\frac{2}{3}} \frac{m_{1T}}{m_0} \text{ch} Y \exp \left(-\frac{\Pi_b}{C_2} \right) dm_{1T}} = \\ &= A^{\frac{4}{3}} \frac{m_1}{m_0} \frac{1}{\text{sh}^2 Y} \exp \left(-\frac{2}{C_2} \frac{m_1}{m_0} \frac{\text{ch} Y}{\text{sh}^2 Y} \right). \quad (14) \end{aligned}$$

Если $A_I = A$, $A_{II} = B$, то

$$\begin{aligned} \text{Ratio} \left(\frac{\text{antibaryon}}{\text{baryon}} \right) &= \\ &= (AB)^{\frac{2}{3}} \frac{m_1}{m_0} \frac{1}{\text{sh}^2 Y} \exp \left(-\frac{2}{C_2} \frac{m_1}{m_0} \frac{\text{ch} Y}{\text{sh}^2 Y} \right). \quad (15) \end{aligned}$$

Результаты расчетов отношения выходов антипротонов к протонам с использованием выражений (13) и (11), (12) представлены на рис. 2 вместе с экспериментальными данными, включая последние данные, полученные на SPS, RHIC, LHC [5–18].

Зависимости отношения выхода антипротонов к выходу протонов во взаимодействиях pp и легких ядер (BeBe) хорошо описываются в нашем подходе с константой $C_2 = 0.146 \pm 0.003$ (рис. 2, сплош-

ная красная линия). Полученное значение константы совпадает с константой из работы, описывающей инклюзивные спектры пионов и каонов, образующихся в pp -столкновениях в области центральных быстрой [3]. Для случая ядерных взаимодействий, начинающихся с серы (SS), было получено удовлетворительное описание с $C_2 = 0.088 \pm 0.001$.

Видно, что экспериментальные данные для ядер от SS до PbPb описываются с другой константой по сравнению с константой для протон-протонных и BeBe-взаимодействий. Однако если учесть наличие барионного торможения, то необходимо ввести потерю быстрой Y [19, 20]. После введения потери быстрой на величину $dY \approx 0.5$ все зависимости для этих ядер прекрасно описываются с помощью одной константы $C_2 = 0.146$ (рис. 3).

В принципе dY зависит от Y , поэтому мы построили зависимости для ядер от SS до PbPb для каждого значения Y и получили зависимости, представленные на рис. 4. Затем точки аппроксимировались линейной зависимостью вида $dY = p_0 + p_1 Y$. Получены следующие коэффициенты p_0 и p_1 фитирующей линейной функции:

$$p_0 = 0.11 \pm 0.01, \quad p_1 = 0.18 \pm 0.01 \quad \text{для AuAu}(\bar{d}/d);$$

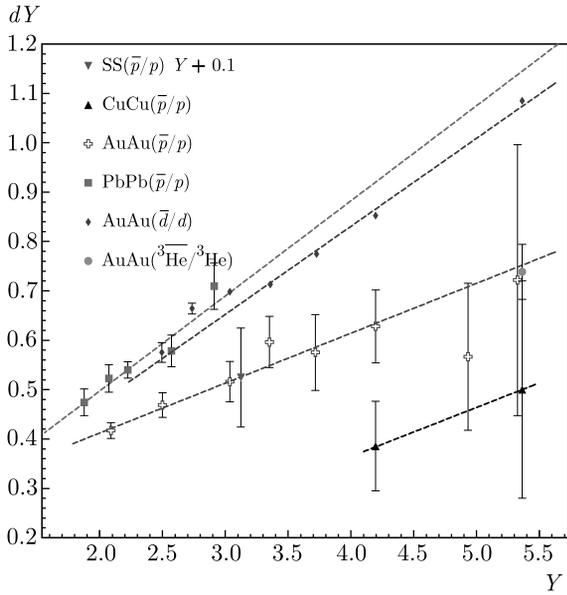


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости потери быстроты dY от быстроты Y . Штриховые линии — линейная аппроксимация $dY(Y) = p_0 + p_1 Y$

$$p_0 = 0.21 \pm 0.05, \quad p_1 = 0.10 \pm 0.02 \quad \text{для AuAu}(\bar{p}/p);$$

$$p_0 = 0.11 \pm 0.08, \quad p_1 = 0.19 \pm 0.04 \quad \text{для PbPb}(\bar{p}/p);$$

$$p_0 = 0.03 \pm 0.80, \quad p_1 = 0.09 \pm 0.20 \quad \text{для CuCu}(\bar{p}/p).$$

Рисунок 5 иллюстрирует экспериментальные данные по отношениям выхода антиядер к ядрам при той же константе $C_2 = 0.146$ с учетом зависимостей $dY(Y)$. Видно, что учет введения дополнительной зависимости по быстройте ($dY(Y)$) приводит к улучшению описания экспериментальных данных для тяжелых ядер (AuAu) при малых быстройтах.

Расчеты зависимости отношения выходов антидейтронов к дейтронам в центральной области быстройт от быстроты взаимодействующих ядер AuAu [18, 21] с $C_2 = 0.146$ и постоянным сдвигом по быстройте показаны на рис. 6a. Наилучшее описание экспериментальных данных было получено при использовании зависимости по быстройте $dY(Y)$, см. рис. 6b. На этом же рисунке представлен расчет отношения выхода антидейтронов к дейтронам в pp -столкновениях в сравнении с данными ALICE [22].

На рис. 7 показаны расчеты зависимости отношения выходов ${}^3\text{He}$ к ${}^3\text{He}$ в центральной области быстройт от быстроты сталкивающихся ядер в наиболее центральных столкновениях CuCu [23] и AuAu [24].

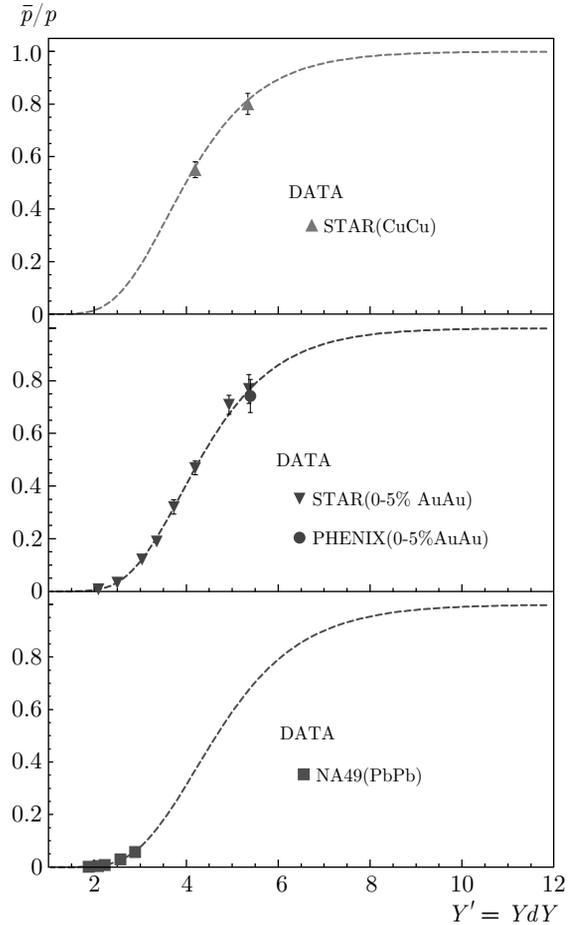


Рис. 5. Описание коэффициентов выхода антипротонов к протонам при одном значении константы $C_2 = 0.146$ с учетом зависимостей $dY(Y)$. Расчеты представлены штриховыми линиями

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Интерес к исследованию выхода легких ядер и антиядер связан с возможностью изучения механизма образования нуклонных кластеров внутри горячей адронной материи, а также внутренней динамики файерболла, образуемого при столкновении релятивистских ядер.

Расчеты в рамках микроскопических моделей ядро-ядерных столкновений [25] показывают, что вследствие значительного эффекта аннигиляции в плотной барионной материи формы спектров для ядер и антиядер должны различаться, при этом наибольшая разница предсказывается при малых значениях p_T вблизи центральных быстройт [26].

В нашем подходе при интегрировании по m_T предполагается отсутствие различия спектров по p_T для частиц и античастиц.

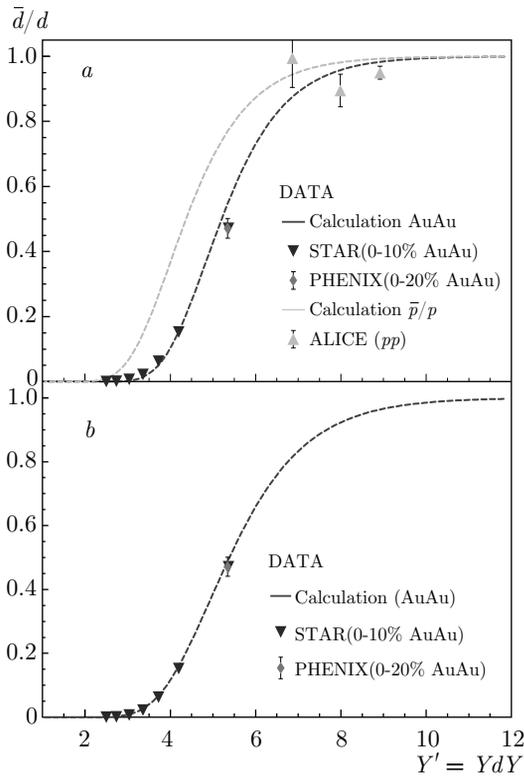


Рис. 6. Расчеты зависимостей отношений выхода антинейтронов к дейтронам в центральной области быстрой от быстроты взаимодействующих ядер для pp - и $AuAu$ -столкновений. Расчеты (штриховые синие линии) для столкновений $AuAu$ представлены следующим образом: a — простой сдвиг быстроты (сдвиг на константу); b — с использованием зависимости $dY(Y)$ на рис. 4. Расчет (штриховая зеленая линия) \bar{d}/d в pp -столкновениях представлен без учета сдвига по скорости

Отсутствие явной p_T -зависимости для отношения выходов античастиц к выходам частиц может означать незначительное влияние процесса аннигиляции в файерболе на характеристики рожденных античастиц, что является ожидаемым в случае образования легких антиядер в конце процесса эволюции источника частиц (freeze-out).

Легкие ядра в кинематической области, далекой от областей фрагментации мишени и пучка, могут или рождаться в столкновениях нуклонов (в комбинации с несколькими антибарионами при сохранении барионного числа), или образовываться в результате реакции слияния нескольких вторичных нуклонов, расположенных близко друг к другу в конфигурационном пространстве и имеющих малый относительный импульс. Прямое рождение ядер возможно, в принципе, при больших энергиях.

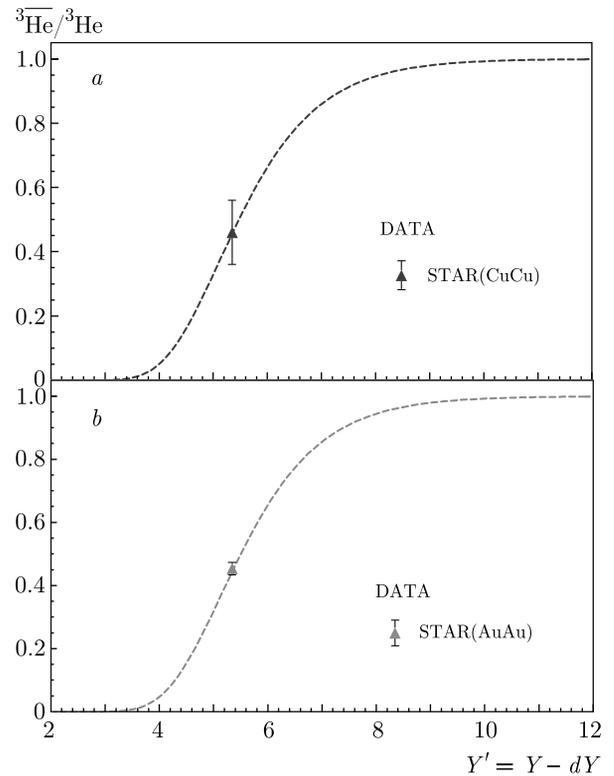


Рис. 7. Зависимости отношения выходов антигелия-3 к гелию-3 в центральной области быстрой для столкновений $CuCu$ (a) и $AuAu$ (b). Использовался простой сдвиг по скорости. Расчеты представлены штриховыми линиями

Принимая во внимание большое сечение взаимодействия адронов с ядрами и, особенно, чрезвычайно малую энергию связи (в среднем несколько мегаэлектронвольт на нуклон) по сравнению с температурой, можно с уверенностью утверждать, что большинство таких кластеров в процессе эволюции файербола разваливается на составляющие их нуклоны. Более вероятным представляется подход в рамках коалесцентной модели [27–29], в которой выход ядер определяется произведением инвариантных распределений нуклонов и эмпирическим параметром — коэффициентом коалесценции, обратно пропорциональным эффективному объему источника.

Наш подход оригинален тем, что он основан на первых принципах, т. е. на законах сохранения четырехмерного импульса и квантовых чисел, и при этом распределения отношений выходов античастиц к выходам частиц описываются только с помощью одного параметра. Такой подход также указывает на то, что образование легких ядер и антиядер происходит в конце процесса эволюции источника частиц.

Вследствие значительных коллективных эффектов в источнике процесс образования нуклонных кластеров чувствителен не только к плотности нуклонов в фазовом пространстве, но и к пространственно-импульсным корреляциям в полях коллективных скоростей [30]. Конечно, для того чтобы получить детальную информацию о структуре источника частиц (о распределении плотности нуклонов и профиле коллективных скоростей), необходимы подробные измерения распределений по поперечному импульсу и быстрой для кластеров различной массы при нескольких энергиях и центральных столкновениях.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы впервые показали успешное применение подхода с использованием параметра самоподобия для расчета отношения выхода антиядер к ядрам в области центральных быстрой в широком диапазоне энергий и взаимодействующих ядер. Стоит отметить, что в нашем подходе параметр обратного наклона T инклюзивных спектров зависит от энергии столкновения [31]. Этот факт является преимуществом данного подхода для описания данных при низких энергиях сталкивающихся ядер $\sqrt{s} < 6$ ГэВ.

Очень плодотворным оказался подход для описания отношений выходов антипротонов к протонам в pp -столкновениях в области энергий от SPS до ЛНС. Установлено, что в случае ядро-ядерных взаимодействий при расчетах необходимо учитывать потери быстрой. Таким образом, наш подход позволил удовлетворительно описать экспериментальные данные по отношениям выхода антипротонов к протонам, антидейтронов к дейтронам и антигелия-3 к гелию-3 в центральной области быстрой в широком диапазоне сталкивающихся ядер от SS до PbPb. Следует также подчеркнуть, что этот подход уже успешно применялся для описания инклюзивных спектров пионов и каонов, образующихся в pp -столкновениях [3] и в центральных AA-столкновениях [4], в зависимости от их поперечного импульса p_T в области средних быстрой.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. M. Baldin and A. I. Malakhov, JINR Rapid Comm. No. 1(87)-98, 5 (1998).
2. A. M. Baldin and A. A. Baldin, Phys. Particles and Nuclei **29**, 232 (1988).
3. G. I. Lykasov, A. I. Malakhov, and A. A. Zaitsev, Eur. Phys. J. A **57**, 78 (2021).
4. G. I. Lykasov and A. I. Malakhov, Eur. Phys. J. A **54**, 187 (2018).
5. R. Klingenberg et al., Nucl. Phys. A **610**, 306 (1996).
6. A. Tawfik, Nucl. Phys. A **859**, 63 (2011).
7. <http://hepdata.cedar.ac.uk/view/p7907>.
8. A. Aduszkiewicz et al. (NA61/SHINE Collab.), Eur. Phys. J. C **77**, 671 (2017).
9. A. M. Rossi et al., Nucl. Phys. B **84**, 269 (1975).
10. K. Aamodt et al. (ALICE Collaboration), Phys. Rev. Lett. **105**, 072002 (2010).
11. B. I. Abelev et al. (STAR Collaboration), Phys. Rev. C **79**, 034909 (2009).
12. S. S. Adler et al. (PHENIX Collaboration), Phys. Rev. C **69**, 034909 (2004).
13. A. Acharya et al. (NA61/SHINE Collab.), Eur. Phys. J. C **81**, 73 (2021).
14. E. Kornasa for the NA49 Collab. Eur. Phys. J. C **49**, 293 (2007).
15. A. Adare et al. (PHENIX Collab.), Phys. Rev. C **83**, 064903 (2011).
16. I. G. Bearden et al. (The NA44 Collab.), Phys. Rev. C **57**, 837 (1998).
17. M. M. Aggarwal et al. (STAR Collab.), Phys. Rev. C **83**, 034910 (2011).
18. J. Adam et al. (STAR Collab.), Phys. Rev. C **99**, 064905 (2019).
19. H. Weber, E. L. Bratkovskaya, and H. Stöcker, Phys. Rev. C **66**, 054903 (2002).
20. Zhou Feng-Chu et al., Chinese Phys. Lett. **27**, 052503 (2010).
21. S. Adler et al. (PHENIX Collab.), Phys. Rev. Lett. **94**, 122302 (2005).
22. S. Acharya et al. (ALICE Collab.), Phys. Rev. C **97**, 024615 (2018).
23. Feng-Xian Liu et al., Phys. Rev. C **99**, 034904 (2019).

- 24.** STAR Collaboration, *Science* **328**, 58 (2010).
- 25.** M. Bleicher et al., *J. Phys. G* **25**, 1859 (1999).
- 26.** F. Wang, *J. Phys. G* **27**, 283 (2001).
- 27.** S. T. Butler and C. A. Pearson, *Phys. Rev.* **129**, 836 (1963).
- 28.** A. Schwarzschild and C. Zupancic, *Phys. Rev.* **129**, 854 (1963).
- 29.** S. Mrowczynski, *Phys. Lett. B* **277**, 43 (1992).
- 30.** R. Scheibl and U. Heinz, *Phys. Rev. C* **59**, 1585 (1999).
- 31.** D. A. Artemenkov, G. I. Lykasov, and A. I. Malakhov, *Int. J. Mod. Phys. A* **30**, 1550127 (2015).

КИНЕТИКА РЕКОМБИНАЦИИ ЭКСИТОНОВ И ТРИОНОВ В СВОБОДНОСТОЯЩИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ CdS, СИНТЕЗИРОВАННЫХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ЛЕНГМЮРА – БЛОДЖЕТТ

К. А. Свит^{*}, А. А. Зарубанов, К. С. Журавлев

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 4 марта 2022 г., апреля 2022 г.

Принята к публикации 25 апреля 2022 г.*

Квантовые точки CdS, полученные методом Ленгмюра – Блоджетт, исследованы методами ультрафиолетовой спектроскопии и фотолюминесценции с временным разрешением. В спектрах фотолюминесценции в диапазоне температур от 5 до 300 К доминирует интенсивная высокоэнергетическая полоса и имеется широкое низкоэнергетическое плечо. Высокоэнергетический пик на спектрах фотолюминесценции обусловлен переходами между состояниями валентной зоны и зоны проводимости, а широкое плечо — дефектами в квантовых точках. Кинетика краевой фотолюминесценции имеет биэкспоненциальный характер, что интерпретируется как одновременная рекомбинация отрицательных трионов и экситонов. Установлено, что основной вклад в интенсивность фотолюминесценции вносит рекомбинация трионов. Скорости рекомбинации как экситона, так и триона уменьшаются с температурой. Замедление рекомбинации экситонов обусловлено тепловым заполнением высоколежащих оптически пассивных состояний и хорошо объясняется существующими теоретическими моделями тонкой структуры экситонных состояний. Радиационное время жизни трионов увеличивается с ростом температуры сначала за счет заселения оптически пассивных состояний, а затем за счет делокализации одного электрона из квантовой точки в надбарьерный континуум состояний, что уменьшает интеграл перекрытия.

DOI: 10.31857/S0044451022080090
EDN: EHCPOO

1. ВВЕДЕНИЕ

Вот уже около тридцати лет полупроводниковые квантовые точки (КТ) являются одним из наиболее интересных и перспективных материалов для изучения новых физических явлений и создания на их основе полупроводниковых приборов. Это связано с тем, что энергетическим спектром КТ можно управлять, изменяя их размер, форму, состояние поверхности и материал окружения [1–3]. Современная технология позволяет получать КТ из материалов $A^{II}B^{VI}$ с квантовым выходом люминесценции η , превышающим 80 % [4]. Это позволило использовать КТ в дисплеях в качестве люминофоров излучения, преобразующих синее излучение подсветки в красный и зеленый цвета отдельных пикселей [5]. В

настоящее время ведется активная работа по повышению эффективности светодиодов на основе КТ, рекордный квантовый выход которых в настоящий момент превышает 20 % [6]. Одной из главных задач в данном направлении является получение высокоэффективных синих светодиодов, в качестве основы для которых возможно использовать КТ CdS. Высокое значение η имеют КТ с высокой вероятностью излучательных процессов и низкой вероятностью безызлучательных процессов. Вероятность излучательной рекомбинации в КТ определяется тонкой структурой экситона, а вероятность безызлучательной рекомбинации зависит от количества и типа дефектов. Тонкая структура экситона в КТ задается величиной обменного взаимодействия электрона и дырки, асимметрией формы КТ, а также кристаллическим полем (для гексагональной решетки) [7,8].

Обычно считается, что основное состояние экситона в КТ является оптически пассивным (запрещенным по спине), что объясняет наличие сток-

* E-mail: svit@nanotech.nsk.ru

сова сдвига и большую величину времени жизни экситона при низких температурах [9]. Такая тонкая структура экситонов характерна для активно исследуемых КТ CdSe. В этих КТ величина спин-орбитального расщепления велика (450 мэВ), что облегчает расчет спектра экситонов и интерпретацию экспериментальных данных. В КТ CdS, однако, величина спин-орбитального расщепления мала (70 мэВ), поэтому приходится учитывать смешивание подзон легких, тяжелых и спин-орбитально отщепленных дырок [10]. Проблемой является то, что структура валентной зоны в CdS до сих пор остается предметом дискуссий, и это усложняет расчет тонкой структуры экситона в КТ из данного материала. В результате природа основного состояния экситона (оптически пассивное или активное) и взаимное расположение уровней экситона в КТ CdS до сих пор служат предметами дискуссий.

В ряде работ на основе расчетов методом $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, учитывающих спин-орбитальное взаимодействие [11, 12], для КТ CdS радиусом меньше 6.9 нм (критический радиус) было показано, что основное состояние экситона является запрещенным по симметрии волновой функции, так как волновые функции электронов и дырок имеют симметрию соответственно S и P . В пользу того, что основным состоянием экситона в КТ CdS является оптически пассивное, запрещенное по симметрии, говорят экспериментальные данные кинетики фотолюминесценции для КТ CdS со средним радиусом от 1 до 2.3 нм, в которых при 10 К наблюдается большое (более 100 нс) время жизни экситонов и большой стоксов сдвиг (более 100 мэВ) [12]. Янг и др. [13] провели эксперимент, подтверждающий, что в КТ CdS с изменением размера происходит изменение порядка следования уровней дырок с S - и P -типами симметрии волновой функции. Авторы установили, что размер критического радиуса составляет 1.8 нм, что, однако, меньше теоретических предсказаний. В то же время согласно расчетам Демченко и Ванг [14], выполненным методом псевдопотенциала в базисе плоских волн с приближением локальной плотности, основное состояние экситона в КТ CdS радиусом менее 3 нм является запрещенным по спину. Их расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными по размерной зависимости величины стоксова сдвига в КТ CdS, полученными ранее другими коллективами [11, 15]. Ходорская и др. [16] провели ряд расчетов шестизонным методом $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ с учетом обменного взаимодействия и кулоновских эффектов, из которых основное состояние экситона получалось запрещенным по

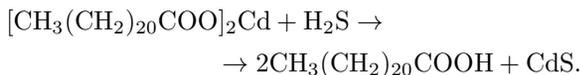
симметрии, что согласовывалось с их экспериментально полученной зависимостью скорости спиновой релаксации электронов от размера КТ. Ким и др. [17] наблюдали медленную кинетику фотолюминесценции (ФЛ) и возрастание времени жизни экситона с температурой. Авторы предложили, что основное состояние экситона является связанным, а рост времени жизни с температурой обусловлен заполнением вышележащего оптически запрещенного по симметрии состояния экситона.

Исходя из множества упомянутых теоретических и экспериментальных работ, очевидно, что требуется дополнительный вклад в активно ведущиеся дискуссии об энергетической структуре и эмиссионных свойствах КТ CdS. Для получения необходимой информации мы исследовали оптические свойства, динамику ФЛ и тонкую структуру экситонов в КТ CdS. В настоящей работе исследовались КТ, полученные методом Ленгмюра – Блуджетт, которые во многом отличаются от КТ, полученных методами коллоидной химии. На поверхности КТ CdS имеются центры безызлучательной рекомбинации [18]. Пассивация поверхности КТ молекулами аммиака кардинально понижает их плотность и повышает эффективность люминесценции, однако остаются ловушки, эффективно захватывающие электроны и влияющие на зарядовое состояние КТ и тип экситонов, генерируемых светом [19, 20].

Настоящая статья построена следующим образом. В разд. 2 описаны детали эксперимента и методика подготовки образцов. В разд. 3 представлены экспериментальные результаты, а именно, оптические свойства и кинетика затухания ФЛ, а также частично анализируется температурная зависимость затухания ФЛ. Обсуждение результатов представлено в разд. 4. В результате обсуждения мы предполагаем, что большое и малое времена затухания интенсивности ФЛ связаны с рекомбинацией соответственно трионов и экситонов. Анализируются температурные зависимости времени жизни соответствующей квазичастицы и проводится сравнение с экспериментальными результатами других авторов и существующими теоретическими моделями. Обсуждаются зависимости времен жизни экситонов и трионов от размера КТ для низких и высоких температур. Приведены рассуждения о доминирующих при высоких температурах нерекombинационных процессах для экситонов и трионов.

2. ДЕТАЛИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Квантовые точки CdS были синтезированы с помощью технологии Ленгмюра–Блоджетт. В качестве субфазы был использован раствор хлорида CdCl_2 с концентрацией $3 \cdot 10^{-4}$ моль и $\text{pH} = 6.0$. Пленки бегената кадмия Y-типа получали путем осаждения на подложку 80 монослоев с помощью опускания подложки в раствор и последующего вынимания из него. Монослои переносились при поверхностном давлении 30 мН/м и комнатной температуре. Толщина одного монослоя составляла около 2.7 нм. В качестве подложек для нанесения слоев бегеновой кислоты использовались кремний и двусторонне полированный сапфир. Пленки бегената кадмия сульфидировались в атмосфере H_2S при давлении 100 Торр и температуре 22 °С в течение 2 ч. В результате взаимодействия бегената кадмия и сероводорода в матрице бегеновой кислоты формировались КТ CdS:



Формирование молекул сульфида кадмия и полное восстановление бегеновой кислоты из бегената кадмия контролировалось с помощью ИК-спектроскопии. Более детально процедура подготовки образцов и кинетика сульфидирования пленок бегената кадмия описаны в работе [21]. Матрица бегеновой кислоты удалялась путем испарения в процессе отжига образцов при температуре 200 °С в атмосфере аммиака, время отжига составляло 2 ч. После удаления матрицы на кремниевой подложке оставались свободностоящие КТ CdS, что контролировалось ранее методами атомно-силовой и сканирующей туннельной микроскопии [22].

Оптические свойства КТ CdS изучались методами УФ-поглощения, стационарной ФЛ и кинетики ФЛ. Спектры поглощения измерялись с помощью спектрометра Acton SP2500 (Princeton Instruments), сигнал регистрировался CCD-камерой с азотным охлаждением. В качестве источника света служила дейтериевая лампа Ocean Optics D1000. Стационарная ФЛ возбуждалась He–Cd-лазером с длиной волны 325 нм и средней плотностью возбуждения около 0.5 Вт/см². Для возбуждения ФЛ и измерения ее интенсивности с временным разрешением использовался импульсный N_2 -лазер с длиной волны 337.1 нм, частотой повторения 1 кГц и плотностью энергии импульса $2 \cdot 10^4$ Вт/см². Лазерный луч на образце имел диаметр около 3 мм. Спектры ФЛ реги-

стрировались спектрометром на основе двойного монохроматора с фокусным расстоянием 500 мм, снабженного натрий-калий-сурьмяно-цезиевым фотокатодом, работающим в режиме счета одиночных фотонов. Для измерения ФЛ в интервале температур 5–300 К использовался криостат Utrex A-255.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

На рис. 1 изображены спектры поглощения и ФЛ исследуемых КТ CdS. На спектре поглощения виден пик на длине волны примерно 433 нм, который обусловлен поглощением остатками органической матрицы [23]. На спектре ФЛ доминирует пик на длине волны 457 нм с шириной на полувысоте около 20 нм. Ширина запрещенной зоны объемного сульфида кадмия составляет примерно 2.42 эВ при 300 К. Так как энергия обсуждаемого пика (2.7 эВ) больше ширины запрещенной зоны, мы связываем его с краевой ФЛ в КТ. На спектре ФЛ также имеется длинноволновый широкий пик, который соответствует энергии 2.2 эВ. Низкоэнергетичный пик типичен для КТ CdS и связан с рекомбинацией через уровни вакансий серы на поверхности КТ [24]. В изучаемых КТ краевая ФЛ доминирует над дефектной. Значение квантового выхода ФЛ η было оценено ранее по методике сравнения с эталоном (Родмин 6G в растворе этанола) и составляет около 4 % при 300 К [25].

На рис. 1 также виден ярко выраженный стоксов сдвиг между спектрами ФЛ и поглощения, который

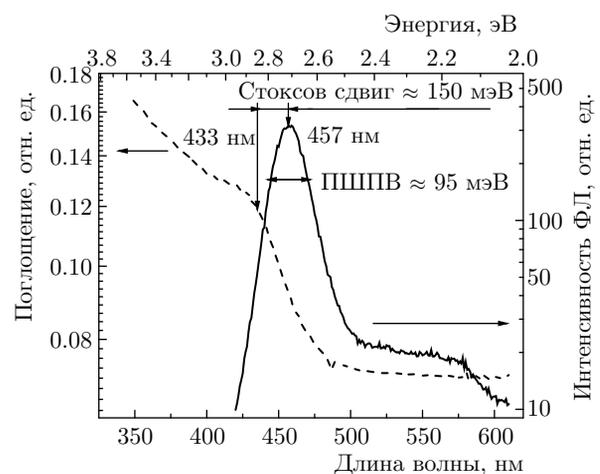


Рис. 1. Спектры поглощения (штриховая кривая) и ФЛ (сплошная кривая), измеренные при 300 К. Приведена величина полуширины на полувысоте (ПШПВ) для высокоэнергетического пика ФЛ, а также отмечен стоксов сдвиг

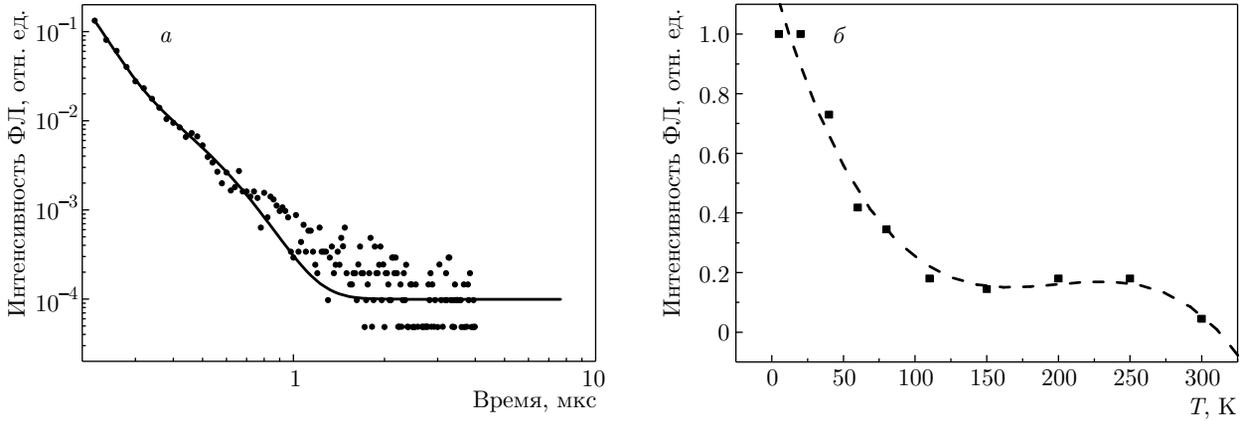


Рис. 2. а) Кривая затухания кинетики ФЛ, измеренная в максимуме ФЛ при 5 К: точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация биэкспоненциальной функцией. б) Температурная зависимость интенсивности ФЛ: квадраты — экспериментальные данные, линия служит ориентиром для глаз

составляет около 150 мэВ. Радиус КТ оценивался по формуле Брюса [26], подразумевающей бесконечно высокие стенки барьера для носителей заряда в КТ:

$$E = E_{g0} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* R^2} - \frac{1.8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R}, \quad (1)$$

где E — энергия пика ФЛ, E_{g0} — ширина запрещенной зоны объемного CdS при $T = 5$ К, n — номер уровня размерного квантования, $m^* = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная эффективная масса пары электрон-дырка, где m_e и m_h — эффективные массы соответственно электрона и дырки, e — заряд электрона, ϵ — диэлектрическая проницаемость материала КТ, ϵ_0 — электрическая постоянная, R — радиус КТ. Для расчета мы взяли данные из литературы $E_{g0} = 2.58$ эВ, $m_e = 0.19m_0$, $m_h = 0.8m_0$ и $\epsilon = 5.7$ и получили, что средний радиус КТ равен 2.4 нм [26].

На рис. 2а показана кинетика ФЛ КТ CdS, измеренная при 5 К в точке максимальной интенсивности ФЛ. Измеренная зависимость может быть аппроксимирована суммой двух экспонент:

$$I(t) = I_0 + W_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_f}\right) + W_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_s}\right), \quad (2)$$

где I_0 — минимальная интенсивность ФЛ на уровне шума, $W_1 = 20 \pm 1$, $\tau_f = 41 \pm 3$ нс и $W_2 = 0.15 \pm 0.5$, $\tau_s = 153 \pm 12$ нс — весовые коэффициенты и характерные времена быстрой и медленной составляющих кинетики. Формула (2) аппроксимирует кривые кинетики ФЛ в диапазоне температур от 5 до 300 К. Во всем диапазоне температур интеграл интенсивности ФЛ быстрой составляющей составляет более 90 % от

полного интеграла интенсивности ФЛ. Измеренные времена жизни (десятки наносекунд для τ_f и сотни наносекунд для τ_s) схожи с наблюдавшимися ранее другими научными группами [27, 28].

Зависимость интенсивности ФЛ от температуры изображена на рис. 2б. Видно, что до 20 К интенсивность ФЛ остается постоянной и затем резко убывает вплоть до 100 К. В температурном интервале от 100 до 250 К интенсивность меняется слабо и только после 250 К опять начинает снижаться и достигает своего минимального значения в исследуемом диапазоне температур.

Из аппроксимации кинетики ФЛ, измеренной в температурном диапазоне от 5 до 300 К в максимуме ФЛ, с помощью формулы (2) были получены температурные зависимости характерных времен жизни τ_f и τ_s (рис. 3). Ниже 20 К обе компоненты кинетики практически не зависят от температуры. При дальнейшем повышении температуры обе компоненты начинают расти, время жизни τ_f увеличивается вплоть до 300 К, однако до 150 К оно растет сравнительно быстро и затем меняется незначительно. В свою очередь, τ_s резко возрастает на интервале температур от 20 до 150 К, но потом также резко начинает уменьшаться. Исходя из значения η при 300 К, мы можем сделать вывод, что на интервале температур от 5 до 20 К оно близко к единице, что говорит о практически полном подавлении безызлучательных процессов в данном интервале температур.

Из зависимости интенсивности ФЛ видно, что при $T > 20$ К безызлучательные процессы начинают доминировать (см. рис. 2б). Замедление кинетики при одновременной активации безызлучатель-

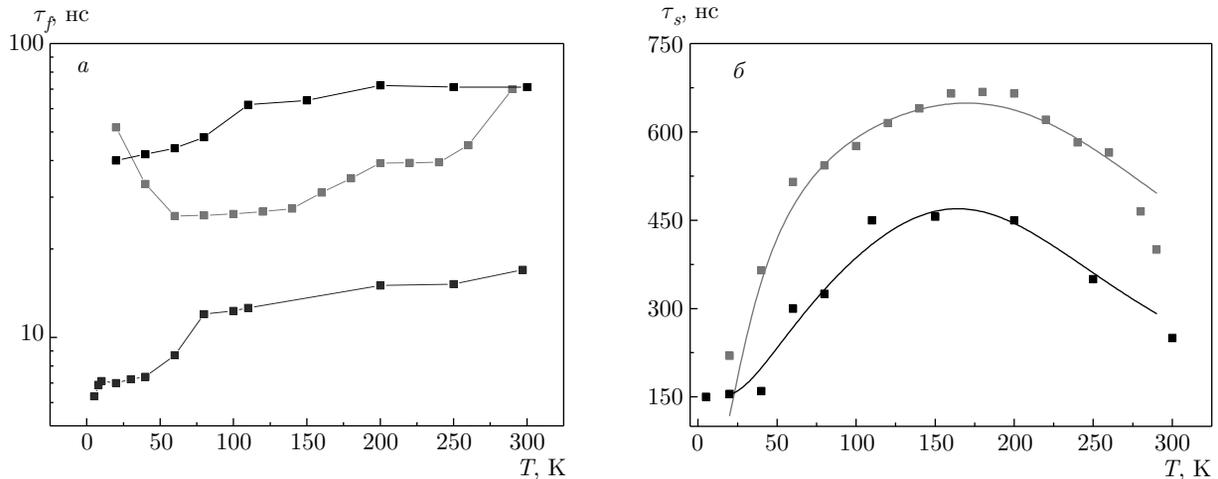


Рис. 3. (В цвете онлайн) Температурные зависимости быстрой (а) и медленной (б) компонент кинетики ФЛ: наш эксперимент (черные квадраты и линии), данные из работ [17] (красные квадраты и линии) и [13] (синие квадраты и линии). Для τ_f линии служат ориентиром для глаз. Для τ_s линии соответствуют аппроксимационным кривым, полученным с помощью уравнений (6) и (7)

ных процессов крайне необычно. Для объяснения данного явления следует рассмотреть отдельно температурные зависимости безызлучательного τ_{NR} и излучательного τ_R времен жизни быстрой компоненты, которая является доминирующей. Для этого были использованы следующие известные соотношения:

$$\frac{1}{\tau_{PL}} = \frac{1}{\tau_{NR}} + \frac{1}{\tau_R}, \tag{3}$$

$$\tau_R = \frac{\tau_{PL}}{\eta}, \tag{4}$$

$$\tau_{NR} = \frac{\tau_{PL}}{1 - \eta}, \tag{5}$$

где τ_{PL} — экспериментально измеренное время затухания интенсивности ФЛ.

Для расчета η при различных температурах было использовано следующее соотношение:

$$\eta(T) = \frac{\eta(300 \text{ K}) I_{PL}(T)}{I_{PL}(5 \text{ K})},$$

где I_{PL} — экспериментально измеренная интенсивность ФЛ. Используя уравнения (3)–(5) и температурную зависимость интенсивности ФЛ (рис. 2б), мы определили вклады безызлучательного τ_{NR} и излучательного τ_R времен жизни при различных температурах (рис. 4).

Так как $\eta = 1$ при $T = 5\text{--}20$ К, величина τ_{NR} стремится на этом интервале температур к бесконечности, однако для аппроксимации и простоты визуализации мы приняли значение τ_{NR} в данном температурном промежутке равным 10^5 нс. На рис. 4

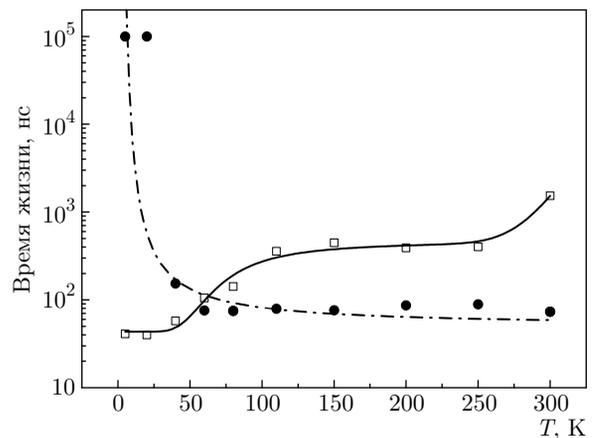


Рис. 4. Температурные зависимости излучательного (штрихпунктирная линия и квадраты) и безызлучательного (сплошная линия и черные точки) времен жизни

видно, что в интервале от 20 до 60 К время τ_{NR} быстро снижается и остается практически постоянным при более высоких температурах. Выше 60 К τ_{NR} намного меньше τ_R , что указывает на доминирование безызлучательных процессов. В то же время величина τ_R снова возрастает после 250 К. Два участка роста τ_R указывают на наличие двух термически активируемых процессов, что необычно с учетом того, что рост τ_R , как правило, обусловлен заполнением вышележащих оптически запрещенных состояний. Из рисунка также очевидно, что снижение интенсивности ФЛ после 60 К связано исключительно с возрастанием τ_R .

Таблица 1. Параметры аппроксимации для температурных зависимостей τ_R и τ_{NR}

	E_{r1} , мэВ	E_{r2} , мэВ	A_1	A_2	τ_g , нс	τ_{exc1} , нс	τ_{exc2} , нс	E_{nr} , мэВ	$\tau_{NR}(0\text{ К})$, нс
τ_R	26 ± 5	600 ± 100	400 ± 200	10^6-10^{12}	42	460 ± 50	$> 10^{10}$	—	—
τ_{NR}	—	—	—	—	—	—	—	4.5 ± 0.5	$> 10^4$

Таблица 2. Параметры аппроксимации для температурной зависимости τ_s

	E_{r1} , мэВ	A_1	τ_g , нс	τ_{exc1} , нс	E_{nr} , мэВ	$\tau_{NR}(0\text{ К})$, нс
τ_R	9 ± 1	5.5 ± 0.5	150	22 ± 4	—	—
τ_{NR}	—	—	—	—	80 ± 5	$> 10^4$

Температурная зависимость τ_R с учетом заполнения вышележащих оптически запрещенных состояний может быть представлена в универсальном виде следующей формулой, основанной на модели трех состояний [29]:

$$\frac{1}{\tau_R} = \left[\frac{1}{\tau_g} + \sum_{i=1}^n A_n \frac{1}{\tau_{exc,n}} \exp\left(\frac{-E_{r,n}}{kT}\right) \right] \times \left[1 + \sum_{i=1}^n A_n \exp\left(\frac{-E_{r,n}}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где τ_g — время жизни основного состояния, $\tau_{exc,n}$ — время жизни n -го возбужденного состояния, $E_{r,n}$ — разность энергий между основным и n -м возбужденным состояниями, A_n — отношение плотностей состояний n -го возбужденного и основного состояний. Уравнение (6) подразумевает, что рекомбинирующие частицы подчиняются статистике Больцмана. В теории при малом размере КТ эффект «бутылочного горлышка» будет препятствовать быстрой релаксации носителей заряда до равновесного распределения согласно статистике Больцмана. Тем не менее множество экспериментов показывает очень высокую скорость релаксации носителей заряда в КТ в основное состояние, что противоречит теоретическим предсказаниям [30]. Основываясь на этом, мы считаем возможным применение формулы (6) для описания нашего эксперимента. Безызлучательное время жизни может быть выражено следующей известной формулой:

$$\frac{1}{\tau_{NR}(T)} = \frac{1}{\tau_{NR}(0\text{ К})} \exp\left(\frac{-E_{NR}}{kT}\right). \quad (7)$$

Аппроксимировав зависимости τ_R и τ_{NR} во всем температурном диапазоне, используя уравнения (6),

(7), в которых приняли $n = 2$ и $\tau_g = \tau_f(5\text{ К}) = 42$ нс, мы получили значения, представленные в табл. 1.

Также мы аппроксимировали температурную зависимость медленной компоненты времени жизни, используя формулы (6) и (7), принимая, что $n = 1$ и $\tau_g = \tau_s(5\text{ К}) = 150$ нс. Аппроксимационная кривая показана на рис. 3б. Результаты аппроксимации представлены в табл. 2.

Зависимости τ_f и τ_s от размера КТ при температурах 5 и 300 К представлены на рис. 5. Зависимости получены из кинетики ФЛ, измеренной в различных точках спектра в пределах высокоинтенсивного пика ФЛ. Радиус КТ рассчитывался по формуле (1). Из зависимостей видно, что температура оказывает сильное влияние на значения τ_f и τ_s , что обусловлено доминированием различных процессов при разных температурах. При 5 К τ_f и τ_s возрастают с размером КТ. При 300 К времена жизни меняются слабо и могут быть рассмотрены как постоянные в пределах экспериментальной ошибки.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

4.1. Кинетика ФЛ

Бизэкспоненциальная кинетика ФЛ и ее зависимость от температуры в КТ CdS ранее исследовались двумя научными группами [13, 17]. На рис. 3а представлены данные, полученные этими группами. Видно, что они также наблюдали возрастание времени жизни быстрой компоненты с температурой. В обеих работах быстрая компонента связывалась с рекомбинацией экситонов (X). Быстрая компонента может быть обусловлена безызлучательными процессами, которые происходят при релаксации носи-

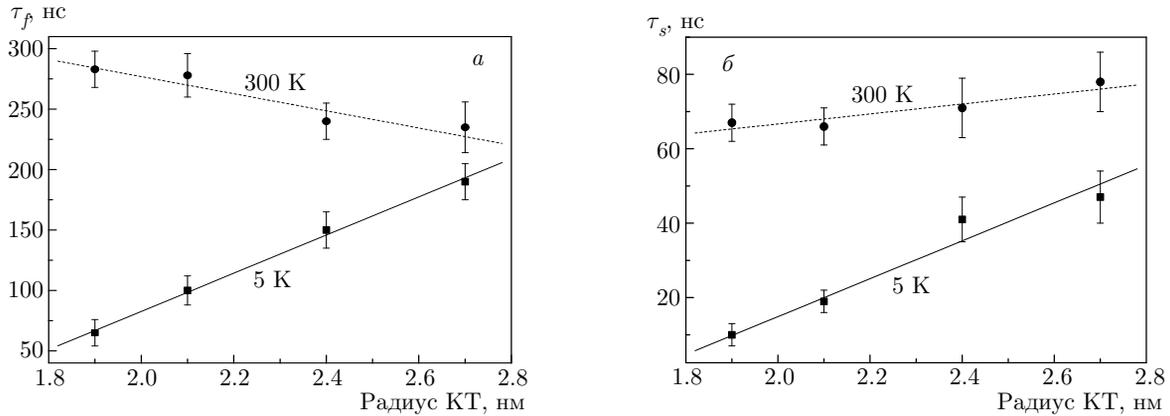


Рис. 5. Зависимости времен жизни τ_f (а) и τ_s (б) от размера КТ при температурах 5 и 300 К. Линии приведены для наглядности

телей заряда. Однако процессы релаксации происходят за времена порядка сотен пикосекунд [30], в то время как величина быстрой компоненты в нашем случае и по литературным данным более чем на порядок выше, что указывает на ее связь с другими процессами. Биэкспоненциальная кинетика также возможна, если в ансамбле КТ можно выделить два подансамбля КТ, характеризующихся разными временами жизни, что, например, может определяться степенью пассивации. Однако в этом случае трудно объяснить температурные зависимости времен жизни, кроме того, при 5 К мы наблюдаем практически полное подавление безызлучательных процессов, и пассивация не должна играть значительной роли, однако кинетика биэкспоненциальна.

Ким и др. [17] интерпретировали время жизни как рекомбинацию связанного экситона. Теоретические расчеты показывают, что время жизни связанного экситона сильно зависит от типа, зарядового состояния и расположения ловушки относительно КТ. Фоноберов и Баландин показали [31], что связанное состояние X в КТ ZnO может иметь большее время жизни, чем свободный X, причем разница наиболее ярко выражена при захвате на ионизированном акцепторе. Ванг получил [32] схожие результаты для КТ CdSe и указал, что в случае наличия вблизи поверхности КТ внешнего отрицательного заряда его потенциал может быть достаточно силен, чтобы притянуть на себя дырку и значительно отдалить ее от электрона в КТ, что может привести к увеличению времени жизни X в 70 раз. Несмотря на то, что рекомбинация связанных X действительно может быть причиной медленной компоненты времени жизни, возрастание температуры должно приводить к выбросу X из потенциала ловушки. Следо-

вательно, подразумевая, что время жизни свободного экситона меньше, мы должны наблюдать уменьшение времени жизни с ростом температуры. Помимо этого вклад медленной компоненты в общую интенсивность ФЛ должен заметно зависеть от температуры. Ничего из перечисленного выше в эксперименте не наблюдалось. Указанные противоречия указывают на то, что биэкспоненциальная кинетика ФЛ обусловлена рекомбинацией двух различных типов квазичастиц.

Высокоэнергетичный пик ФЛ может быть обусловлен одновременной рекомбинацией X, заряженных экситонов, т.е. трионов (X^- или X^+), и биэкситонов (XX). Энергии этих частиц близки друг к другу. Для КТ CdS радиусом 2.5 нм энергия связи X около 140 мэВ [33]. Энергия связи XX может быть выражена как $E_b = 2E_X - E_{XX}$, где E_X — энергия X, E_{XX} — энергия XX. Расчетное значение E_b для КТ CdS не превышает 30 мэВ [34]. Для X^- и X^+ энергия связи чуть меньше, чем для XX [35]. Следовательно, спектры излучения данных квазичастиц могут перекрываться и давать одиночный пик в спектре ФЛ. Данная проблема типична для ансамблей КТ даже с дисперсией по размерам на уровне 5% [36].

В отличие от энергии, времена жизни рассматриваемых квазичастиц различаются сильнее, что делает возможной их идентификацию по данным кинетики ФЛ. Насколько нам известно, в литературе отсутствуют данные о временах жизни для X^- , X^+ или XX в КТ CdS. Тем не менее в КТ CdSe рекомбинация различных типов квазичастиц исследовалась как экспериментально, так и теоретически. Если рассматривать XX как два отдельных X, то время жизни XX будет в два раза меньше, чем время жизни X. Экспериментальные же данные показыва-

ют, что разница может быть больше. В работе [37] в КТ CdSe/CdS типа ядро–оболочка время жизни ХХ было в 100 раз меньше, чем время жизни Х.

Основной причиной малого времени жизни ХХ является высокая вероятность оже-рекомбинации [38]. Вероятность образования ХХ возрастает с повышением мощности накачки, и их концентрация растет квадратично, в то время как для экситонов наблюдается линейный рост [39]. В нашем эксперименте интенсивность ФЛ линейно зависела от плотности мощности накачки во всем используемом интервале вплоть до 0.5 Вт/см². Кроме того, варьирование мощности накачки не влияло на вид спектра ФЛ и позицию пиков. Очевидно, что в нашем случае ХХ не проявляются, и мы исключаем их из дальнейшего рассмотрения.

Для трионов имеются свои особенности, в частности время жизни триона сильно зависит от его заряда: Х⁺ значительно быстрее рекомбинируют в сравнении с Х⁻. Это объясняется высокой плотностью состояний в валентной зоне и меньшим радиусом локализации дырки (большая эффективная масса) — факторами, которые увеличивают вероятность оже-рекомбинации, включающей в себя внутрizonный переход при возбуждении одной из дырок [37]. Тем не менее, известно точно, что в сферической КТ значение времени жизни трионов находится посередине между значениями времен жизни Х и ХХ [40].

Мы склоняемся к тому, что быстрая компонента связана с рекомбинацией Х⁻, в то время как медленная — с рекомбинацией Х. В связи с этим для удобства обсуждения вводятся величины τ_X и τ_{X^-} , в качестве замены соответственно τ_f и τ_s . Наблюдаемые спектр ФЛ и биекспоненциальная кинетика ФЛ обусловлены одновременной рекомбинацией Х и Х⁻ в КТ, причем рекомбинация трионов происходит в точках, вблизи которых находится дефект, обеспечивающий второй электрон. Предположение о том, что трионы обуславливают быстрое затухание ФЛ, может показаться спорным, поскольку многие теоретические исследования предсказывают, что излучательная рекомбинация трионов должна быть сильно подавлена из-за быстрого безызлучательного оже-процесса. Однако в последнее десятилетие опубликован ряд экспериментальных работ, в которых четко показано, что время жизни триона в КТ может находиться в пределах нескольких десятков наносекунд и давать основной вклад (более 50 %) в интенсивность ФЛ [41, 42].

Мы представляем себе механизм формирования триона следующим образом: при поглощении

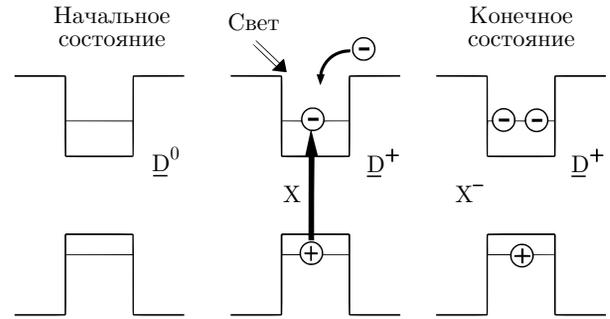


Рис. 6. Схема образования триона: D⁰ и D⁺ — нейтральный и ионизированный дефекты донорного типа; X — экситон; X⁻ — трион

кванта возбуждающего излучения в КТ образуется электрон–дырочная пара, которая после релаксации связывается в экситон. В процессе облучения возбуждающим излучением происходит также поглощение квантов дефектами донорного типа, причем возбужденный электрон в процессе релаксации переходит в КТ и присоединяется к X с образованием Х⁻. Ранее, используя метод сканирующей туннельной спектроскопии, мы наблюдали наличие дефектов донорного типа в исследуемых КТ [21]. Схематично процесс образования триона показан на рис. 6.

4.2. Тонкая структура экситона

Бесспорно, что волновая функция основного уровня электрона в КТ CdS S-типа, в то время как симметрия основного уровня дырки остается предметом многочисленных дискуссий. Теоретически было предсказано, что орбитальная симметрия основного состояния дырок в КТ зависит от размера КТ [12]. Вблизи критического размера КТ происходит антипересечение S- и P-подобных дырочных уровней. Ян и др. экспериментально подтвердили теорию и установили, что критический радиус КТ (R_c) составляет около 2 нм [13]. Для небольших КТ с $R < R_c$ основное состояние дырки P-типа, что приводит к оптически пассивному (запрещенному по четности) состоянию X. В нашем случае радиус КТ находится в диапазоне 1.9–2.7 нм по данным спектров ФЛ. Поэтому мы полагаем, что в нашем случае $1S_e1S_{3/2}$ является основным состоянием X во всем диапазоне размеров (здесь $1S_e$ обозначает S-огibaющую функцию электронного состояния, а нижний индекс 3/2 — полный угловой момент дырки J). В первом приближении $1S_e1S_{3/2}$ -состояние экситона 8-кратно вырождено. Гексагональное кристаллическое поле и анизотропия формы КТ рас-

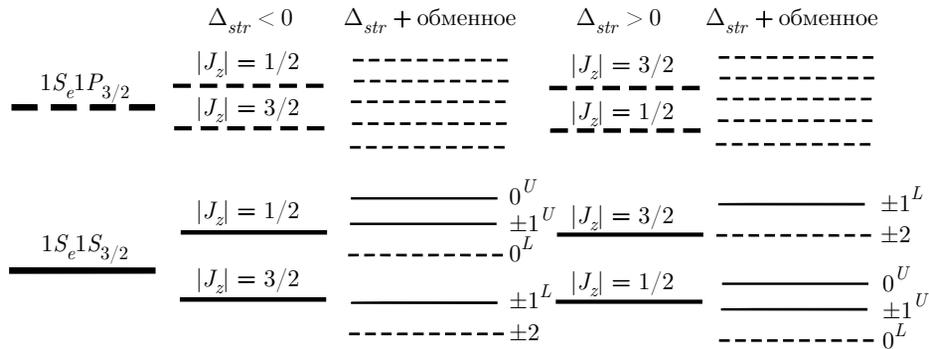


Рис. 7. Схематичная энергетическая диаграмма для КТ CdS, учитывающая расщепление за счет гексагонального поля кристалла, асимметрии формы КТ, а также обменного взаимодействия. Уровни экситона, соответствующие запрещенным переходам, обозначены штриховыми линиями. Все подуровни состояния $1S_e1P_{3/2}$ запрещены по симметрии, а часть подуровней $1S_e1S_{3/2}$ — по спину

щепляют 4-кратно вырожденный уровень дырки на два подуровня с разным модулем проекции полного углового момента дырки $|J_z|$ ($\pm 3/2$ тяжелые и $\pm 1/2$ легкие дырки). Расщепление уровней дырок приводит также к расщеплению 8-кратно вырожденного уровня X на два 4-кратно вырожденных подуровня. Согласно Эфросу [43], расщепление уровней экситона описывается следующей формулой:

$$\hat{H}_{exc} = \frac{\Delta_{str}}{2} \left(J_z^2 - \frac{1}{4} \right), \quad (8)$$

где J_z — проекция полного углового момента дырки, $\Delta_{str} = \Delta_{int} + \Delta_{sh}$ — сумма расщеплений за счет кристаллического поля Δ_{int} и формы КТ Δ_{sh} . В общем случае величина Δ_{str} может быть как отрицательной, так и положительной. В последнем случае, так как величина Δ_{int} всегда положительна, Δ_{str} может быть отрицательной только при $|\Delta_{sh}| > |\Delta_{int}|$. Знак Δ_{sh} зависит от того, вытянутая или сплюснутая форма у КТ (при рассмотрении эллипсоидальной формы), а также от соотношения эффективных масс легкой и тяжелой дырок (β). Степень эллиптичности может быть выражена как $\mu = 1 - c/b$, где c/b — отношение главной и вторичной осей эллипсоида. Тогда $\mu < 0$ и $\mu > 0$ соответствуют сплюснутой и вытянутой КТ. В этом случае Δ_{int} и Δ_{sh} можно выразить следующим образом:

$$\Delta_{int} = v(\beta)\Delta, \quad (9)$$

$$\Delta_{sh} = 2\mu\nu(\beta)E_{3/2}, \quad (10)$$

где $v(\beta)$ и $\nu(\beta)$ — безразмерные функции, показывающие смешивание между легкими и тяжелыми дырками, Δ — величина расщепления за счет гексагонального поля кристалла в объемном материа-

ле [44], $E_{3/2}$ — энергия квантования основного состояния дырки, рассчитанная в приближении сферической КТ.

Обменное взаимодействие дополнительно расщепляет уровни экситона с разным $|F_z|$, т.е. проекцией полного углового момента ($F_z = s_z + J_z$). В итоге образуется пять подуровней с $|F_z| = 0^{U,L}, 1^{U,L}, 2$, где индексы U и L вводятся для разделения подуровней с одинаковым $|F_z|$. В итоге тонкая структура X представляет собой 5 подуровней. Схематично расщепление уровней X как за счет кристаллического поля и анизотропии формы, так и за счет обменного взаимодействия представлены на рис. 7. Стоит также отметить, что на рисунке показаны уровни как $1S_e1S_{3/2}$, так и $1S_e1P_{3/2}$, вышележащие уровни не рассматривались ввиду того, что отделены от описанных как минимум на величину спин-орбитального взаимодействия Δ_{SO} , которое в CdS составляет около 70 мэВ [10].

На первый взгляд, зависимость τ_X от температуры можно объяснить, рассматривая только подуровни $1S_e1S_{3/2}$, но это не так. Как видно на рис. 7, самый нижний подуровень из серии $1S_e1S_{3/2}$ всегда оптически запрещенный, а за ним следует оптически разрешенный подуровень. Исходя из этого, время жизни τ_X должно уменьшаться с ростом температуры, чего не происходит. Стоит заметить, что τ_X при 5 К составляет 150 нс и не может рассматриваться как время жизни чисто оптически разрешенного или запрещенного состояния [40], что указывает на смешивание состояний даже при столь низкой температуре. Такое смешивание может быть объяснено только при рассмотрении перекрытия серии подуровней S - и P -типов симметрии.

Ранее нами было установлено, что КТ CdS, синтезированные с помощью метода Ленгмюра–Блоджетт, после удаления матрицы имеют сферическую форму и гексагональный тип кристаллической решетки, соответственно $\Delta_{str} > 0$ [25]. По расчетам Ходорской и др. [16] для сферических КТ с гексагональной решеткой нижними состояниями являются состояния экситона с $|J_z| = 3/2$, а основным состоянием экситона является состояние $1S_e1S_{3/2}$ с $|F_z| = 2$, при этом следующее за ним состояние 1^L является оптически разрешенным. Далее по энергии идет следующая серия подуровней $1S_e1S_{3/2}$ с $|J_z| = 1/2$, а именно 0^L , 1^U и 0^U . Данные подуровни также расположены близко по энергии (разница 1 мэВ при радиусе КТ около 2.5 нм). Два из этих подуровней являются оптически разрешенными (1^U и 0^U), поэтому их заполнение с ростом температуры должно приводить к уменьшению времени жизни, однако эксперимент показывает обратное. Это объясняется тем, что серия подуровней $1S_e1P_{3/2}$ пересекается с серией $1S_e1S_{3/2}$.

Все четыре 2-кратно вырожденные подуровня серии $1S_e1P_{3/2}$ являются запрещенными по симметрии, и их заполнение, даже с учетом заполнения оптически разрешенных состояний 1^U и 0^U , обуславливает наблюдаемый рост времени жизни. Значение энергии активации роста τ_X , полученное из аппроксимации эксперимента, составляет примерно 9 мэВ, что существенно меньше, чем расчетное расстояние между сериями $1S_e1S_{3/2}$ подуровней с $|J_z| = 3/2$ и $|J_z| = 1/2$, которое составляет около 20 мэВ (КТ радиусом 2.5 нм) [16]. Данное расхождение также говорит в пользу того, что серия подуровней $1S_e1P_{3/2}$ пересекает серию подуровней $1S_e1S_{3/2}$. Значение коэффициента A , полученное из аппроксимации, составляет около 5. Если рассмотреть тонкую структуру в упрощенном виде, т. е. без учета обменного взаимодействия, и принять, что подуровни $1S_e1S_{3/2}$ с $|J_z| = 1/2$ вырождены с подуровнями $1S_e1P_{3/2}$, то мы получим, что степень вырождения основного состояния экситона равна 4, а возбужденного — 12. Следовательно, их отношение равняется 3, что близко к данным аппроксимации.

В сферической КТ CdS, согласно формуле (9), $\Delta_{str} = \Delta_{int}$. Из аппроксимации $\Delta_{int} = 9$ мэВ, тогда, принимая, что для CdS $\Delta = 27$ мэВ, получаем $\nu(\beta) \approx 0.33$, а отношение масс легких и тяжелых дырок $\beta \approx 0.1$ по расчетам Эфроса и соавторов [44]. Край валентной зоны обычно описывается в рамках модели Кона–Латтинжера, где в сферической аппроксимации для этого требуются всего два параметра γ_1 и γ [45]. Эффективные массы

легких и тяжелых дырок могут быть рассчитаны по формулам соответственно $m_{lh} = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma)$ и $m_{hh} = m_0/(\gamma + 2\gamma_1)$.

Стоит отметить, что для CdS в литературе существует множество вариаций параметров Латтинжера, так как структура валентной зоны в данном материале до сих пор полностью не исследована [13]. Согласно Эфросу и Розену [45], $\gamma_1 = 1.02$ и $\gamma = 0.41$ для CdS, следовательно, $\beta = 0.11$, а $\nu(\beta) \approx 0.4$, что хорошо согласуется с нашими результатами, полученными из аппроксимации [44].

Энергия активации безызлучательных процессов для экситона, полученная из аппроксимации, составляет $E_{NR} = 80$ мэВ. Схожее значение (около 100 мэВ) для активации безызлучательных процессов получили в работе [17]. В то же время в нашем случае полученное значение близко к значению величины спин-орбитального расщепления между экситонными состояниями $1S_e1S_{3/2}$ и $1S_e1S_{1/2}$ (около 70 мэВ). Состояние $1S_e1S_{1/2}$, если не рассматривать тонкую структуру, также является оптически разрешенным, поэтому заполнение может быть причиной наблюдаемого снижения τ_X . Однако серия подуровней $1S_e1P_{1/2}$ также перекрывается с $1S_e1S_{1/2}$, как и серии уровней экситонов с легкими и тяжелыми дырками. Поэтому за счет смешивания данных уровней их заполнение не должно приводит к уменьшению τ_X .

При 5 К безызлучательные процессы подавлены и τ_X можно выразить следующей формулой:

$$\tau_X = \frac{6\pi\epsilon_0 m_0^2 c^3 \hbar^2}{e^2 n \beta_s E^2 f}, \quad (11)$$

где m_0 — масса свободного электрона, c — скорость света, f — сила осциллятора, β_s — фактор экранирования, E — энергия перехода, n — коэффициент преломления оболочки КТ. Сила осциллятора возрастает с размером КТ, а энергия перехода обратно пропорциональна квадрату радиуса КТ, поэтому эти величины противоположно влияют на изменение τ_X [40]. Согласно нашим данным, энергия перехода дает основной вклад, так как τ_X возрастает с размером КТ. Это согласуется со многими теоретическими расчетами, которые предсказывают слабую зависимость силы осциллятора от размера КТ, когда радиус КТ сравним с боровским радиусом экситона или больше него [46]. При 300 К τ_X практически не зависит от размера КТ за счет активации и преобладания безызлучательных процессов.

4.3. Трионы

При обсуждении трионов следует начать с температурной зависимости τ_R . Жавю и др. наблюдали схожую температурную зависимость τ_R для трионов в КТ CdSe/CdS типа ядро-оболочка [41]. Авторы объяснили полученный результат, а именно возрастание времени жизни с температурой, с помощью модели делокализации одного из электронов в составе триона из КТ в оболочку. Когда один из электронов в составе триона выбрасывается в оболочку, интеграл перекрытия уменьшается, что ведет к росту τ_R . В нашем случае высота барьера для электронов выше, чем в системе КТ CdSe/CdS типа ядро-оболочка, и составляет около 0.6–0.8 эВ, так как КТ окружены органическими остатками матрицы [20]. Полученная из аппроксимации эксперимента энергия активации первоначального роста τ_R ($E_{a1} \approx 26$ мэВ) более чем на порядок меньше высоты барьеров. Следовательно, по аналогии с экситонным рост τ_R связан с заполнением оптически запрещенных состояний X^- .

Насколько нам известно, тонкая структура трионов в КТ CdS не рассчитывалась и не исследовалась экспериментально. Однако Калифано и др. с помощью полуэмпирического нелокального метода псевдопотенциала рассчитали тонкую структуру и температурную зависимость τ_R для трионов в КТ CdSe [40]. Авторы обнаружили, что, как и в случае экситона, τ_R трионов может возрастать за счет заполнения оптически запрещенных по четности состояний. Далее для простоты рассмотрения мы опустим тонкую структур уровней X^- в связи с тем, что по аналогии с X они вероятнее всего перекрываются, и количественная оценка в нашем случае крайне сложна.

Анализ τ_R будет проводиться только путем рассмотрения 4-кратно вырожденных состояний X^- , происходящих от S - и P -состояний дырок. Так как время жизни τ_R при 5 К мало и начинает возрастать с повышением температуры, основным состоянием X^- , как и в случае X , является оптически разрешенное состояние, где два электрона (с противоположными спинами) на $1S_e$ -уровне, а дырка на $1S_{3/2}$ -уровне. Вышележащее состояние триона является оптически запрещенным и образовано из двух электронов на $1S_e$ -уровне и дыркой на $1P_{3/2}$ -уровне. Энергия активации возрастания τ_R на участке температур от 5 до 200 К (26 мэВ) значительно отличается от энергии активации возрастания времени жизни экситона (9 мэВ). Разница в энергии между оптически разрешенными и запрещенными состоя-

ниями X^- (около 26 мэВ) значительно превышает таковую для X (около 10 мэВ). Точный теоретический расчет с учетом кулоновского взаимодействия со вторым электроном может пролить свет на причину этого различия.

Интригующим вопросом остается высокое значение степени вырождения A_1 . Все подуровни $X^- 1S_e 1S_{3/2}$ оптически разрешенные, а все подуровни $1S_e 1P_{3/2}$ оптически запрещенные, поэтому значение A_1 для X^- должно быть равно единице, что более чем в 100 раз меньше значения, полученного из аппроксимации. Для упрощения мы не рассматриваем подуровни $1S_e 1S_{3/2}$ с разными $|J_z|$ по отдельности. Более того, очевидно, что рассмотрение этих подуровней и их смешанных состояний по аналогии с X не объясняет высокого значения A_1 . Следует отметить, что большой коэффициент вырождения в КТ CdS был получен ранее Кимом и др. [17], но не интерпретирован авторами.

Мы предлагаем рассмотреть некоторые дополнительные процессы, объясняющие увеличение τ_R . Например, один из электронов в составе X^- может быть многократно захвачен и освобожден ловушечными центрами, в то время как X остается в КТ. В этом случае τ_R будет определяться временем пребывания электронов на уровне ловушек [47]. Второй процесс, приводящий к увеличению τ_R при $T > 250$ К, характеризуется высокой энергией активации (около 0.6 эВ) и степенью вырождения $A_2 > 10^6$. Мы связываем этот процесс с делокализацией одного из электронов X^- из КТ в надбарьерный континуум состояний. Действительно, значение энергии активации близко к оценкам высоты барьера из предыдущих экспериментов, а континуум состояний хорошо согласуется с высоким значением степени вырождения.

Зависимости времен жизни X и X^- от размера КТ (см. рис. 5) при 5 К схожи. Излучательное время жизни X^- также описывается с помощью уравнения (11), поэтому объяснение наблюдаемой зависимости аналогично таковому для X .

Продолжим обсуждение температурной зависимости τ_{NR} . В общем случае безызлучательная рекомбинация трионов может происходить как с участием уровней ловушек, так и за счет оже-процессов. Считается, что основным каналом безызлучательной рекомбинации триона при низких температурах является оже-рекомбинация. С этой точки зрения, снижение τ_{NR} при температурах выше 20 К можно рассматривать как активацию оже-процесса. Известно, что скорость оже-рекомбинации сильно зависит от формы и глубины удерживающего носи-

тели заряда потенциала, а также от степени делокализации волновой функции [48]. Для глубокого и скачкообразного потенциала скорость оже-процесса выше, чем для мелкого или гладкого [49]. Джейн и др. [50] обнаружили, что увеличение делокализации волновых функций оказывает более существенное влияние, чем форма барьерного потенциала. Ранее температурная активация оже-рекомбинации наблюдалась в работе [18] и объяснялась делокализацией одного из электронов в составе X^- из ядра КТ CdSe/CdS в оболочку.

В нашем случае потенциал, ограничивающий носители заряда в КТ, достаточно большой (0.6 эВ). Поэтому нам нужно другое объяснение наблюдаемого явления. Мы предполагаем, что ниже 20 К X^- связан донором, ионизированным при фотовозбуждении (см. рис. 6). Обычно трионы рассматриваются как несвязанные частицы, однако имеются экспериментальные работы, очевидно показывающие, что ионизированные примеси могут эффективно связывать трионы в квантовых ямах [51]. Авторы получили энергию связи для комплекса трион-примесь, равную примерно нескольким миллиэлектронвольтам, что хорошо согласуется с $E_{NR} \approx 4$ мэВ, полученной из аппроксимации наших данных. Связанное состояние X^- характеризуется малой вероятностью оже-рекомбинации, так как электроны локализованы вблизи ионизированного донора гладким кулоновским потенциалом и далеки от острого барьерного потенциала. При повышении температуры X^- делокализуются и электроны могут взаимодействовать с резким потенциалом оболочки КТ, ускоряющим оже-рекомбинацию. При дальнейшем повышении температуры скорость оже-рекомбинации остается практически постоянной.

Зависимость времени жизни триона от размера КТ при 300 К (см. рис. 5а) определяется в основном безызлучательными процессами. Если считать оже-процесс преобладающим, можно сказать, что его скорость увеличивается с размером КТ. Климов и др. [38] предложили универсальную зависимость $\tau_{Auger} \propto R^3$, где R — размер КТ. Другие группы наблюдали схожий механизм: $\tau_{Auger} \propto R^\chi$ с χ в пределах от 2 до 6 [52, 53]. В нашем случае зависимость слишком слабая, чтобы ее можно было представить степенной функцией в описанных пределах изменения χ . Это свидетельствует о том, что помимо оже-рекомбинации X^- также безызлучательно рекомбинируют через уровни ловушек. При этом оже-рекомбинация является основным безызлучательным процессом при низких температурах в районе 20 К, а процессы рекомбинации через уровни

ловушек активируются при дальнейшем повышении температуры.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные с помощью метода Ленгмюра–Блоджетт КТ CdS изучены методами спектроскопии поглощения, стационарной и время-разрешенной фотолуминесценции. Спектр ФЛ КТ имеет ярко выраженный узкий высокоэнергетический пик, а также слабовыраженное широкое низкоэнергетическое плечо. Высокоэнергетичный пик ФЛ соответствует краевой эмиссии, а широкое плечо — рекомбинации через дефекты. Двойной экспоненциальный спад краевой ФЛ интерпретируется как одновременная рекомбинация экситонов и отрицательно заряженных трионов. Рекомбинация трионов является доминирующей. Температурная зависимость времени затухания экситона указывает на оптически разрешенный основной уровень, возникающий из S -подобных дырочных состояний с $|J_z| = 3/2$. Верхние экситонные уровни возникают из смеси S -подобных дырочных состояний с $|J_z| = 1/2$ и запрещенных по четности P -подобных дырочных состояний. Основываясь на температурных зависимостях излучательного и безызлучательного времени жизни трионов, мы предполагаем, что при низкой температуре трионы связаны на ионизированных донорах. Энергия связи триона составляет около 4 мэВ. При повышенных температурах трионы высвобождаются и занимают оптически запрещенные уровни, которые, как и в случае экситонов, связаны с P -подобными состояниями дырок. При температурах выше 250 К один из электронов триона термически возбуждается в континуум состояний над барьерами.

Благодарности. Особую благодарность выражаем Т. А. Дуде за подготовку образцов и участие в обсуждении.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации № МК-3148.2022.1.2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Yang, Y. Zheng, W. Cao, A. Titov, J. Hyvonen, J. R. Manders, J. Xue, P. H. Holloway, and L. Qian, *Nature Photon.* **9**, 259 (2015).

2. H. J. Eisler, V. C. Sundar, M. G. Bawendi, M. Walsh, H. I. Smith, and V. Klimov, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4614 (2002).
3. D. V. Talapin, J.-S. Lee, M. V. Kovalenko, and E. V. Shevchenko, *Chem. Rev.* **110**, 389 (2010).
4. S. V. Gaponenko and H. V. Demir, *Applied Nanophotonics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2018).
5. H. Shen, Y. Zhang, Q. Lin, Zh. Li, L. Chen, Z. Zeng, Y. Jia, Sh. Wang, Z. Du, and Lin Song Li, *Nature Photon.* **13**, 192 (2019).
6. E. Kadantsev and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **81**, 045311 (2010).
7. V. I. Klimov, *Nanocrystal Quantum Dots*, CRC Press, Boca-Raton (2017).
8. G. Konstantatos and E. H. Sargent, *Colloidal Quantum Dot Optoelectronics and Photovoltaics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2013).
9. A. Bagga, P. K. Chattopadhyay, and S. Ghosh, *Phys. Rev. B* **74**, 035341 (2006).
10. T. Richard, P. Lefebvre, H. Mathieu, and J. Allegre, *Phys. Rev. B* **53**, 7287 (1996).
11. J. Li and J.-B. Xia, *Phys. Rev. B* **62**, 12613 (2000).
12. Zh. Yu, J. Li, and D. B. O'Connor, *J. Phys. Chem. B* **107**, 5670 (2003).
13. B. Yang, J. E. Schneeloch, Z. Pan, M. Furis, and M. Achermann, *Phys. Rev. B* **81**, 073401 (2010).
14. D. O. Demchenko and L. W. Wang, *Phys. Rev. B* **73**, 155326 (2006).
15. M. Chamarro, M. Dib, V. Voliotis, A. Filoramo, P. Roussignol, T. Gacoin, J. P. Boilot, C. Delerue, G. Allan, and M. Lannoo, *Phys. Rev. B* **57**, 3729 (1998).
16. P. Hodorska, P. Nemes, D. Sprinzl, P. Maly, V. N. Gladilin, and J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **81**, 045301 (2010).
17. D. Kim, T. Mishima, and M. Nakayama, *J. Phys. Chem. C* **112**, 10668 (2008).
18. E. A. Багаев, К. С. Журавлев, Л. Л. Свешникова, *ФТП* **10**, 1218 (2006).
19. А. А. Зарубанов, К. С. Журавлев, *ФТП* **49**, 392 (2014).
20. К. А. Svit and K. S. Zhuravlev, *J. Phys. Chem. C* **119**, 19496 (2015).
21. E. A. Багаев, К. С. Журавлев, Л. Л. Свешникова, И. А. Бадмаев, С. М. Репинский, М. Воелсков, *ФТП* **37**, 1321 (2003).
22. D. Yu. Protasov, W.-B. Jian, K. A. Svit, T. A. Duda, S. A. Teys, A. S. Koshuhov, L. L. Sveshnikova, and K. S. Zhuravlev, *J. Phys. Chem. C* **115**, 20148 (2011).
23. А. А. Зарубанов, В. Ф. Плюснин, К. С. Журавлев, *ЖТФ* **51**, 605 (2017).
24. N. Kumar, F. Alam, and V. Dutta, *RCS Adv.* **6**, 28316 (2016).
25. К. А. Svit, А. А. Zarubanov, Т. А. Duda, S. V. Trubina, V. V. Zvereva, E. V. Fedosenko, and K. S. Zhuravlev, *Langmuir* **37**, 5651 (2021).
26. L. E. Brus, *J. Chem. Phys.* **80**, 4403 (1984).
27. O. V. Ovchinnikov, M. S. Smirnov, N. V. Korolev, P. A. Golovinski, and A. G. Vitukhnovsky, *J. Limin.* **179**, 413 (2016).
28. N. S. Kurochkin, A. A. Vashchenko, A. G. Vitukhnovsky, and P. N. Tananaev, *Semiconductors* **49**, 953 (2015).
29. S. A. Crooker, T. Barrick, J. A. Hollingsworth, and V. I. Klimov, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2793 (2003).
30. T. Inoshita and H. Sakaki, *Physica B* **227**, 373 (1996).
31. V. A. Fonoberov and A. A. Balandin, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5971 (2004).
32. L. W. Wang, *J. Phys. Chem. B* **105**, 2360 (2001).
33. С. И. Покутний, *ФТП* **44**, 507 (2010).
34. S. I. Pokutnii, *Tech. Phys.* **61**, 1737 (2016).
35. B. Patton, W. Langbein, and U. Woggon, *Phys. Rev. B* **68**, 125316 (2003).
36. M. Achermann, M. A. Petruska, S. A. Crooker, and V. I. Klimov, *J. Phys. Chem. B* **107**, 13782 (2003).
37. B. Mahler, P. Spinicelli, S. Buil, X. Quelin, J.-P. Hermier, and B. Dubertret, *Nature Mater.* **7**, 659 (2008).
38. I. Robei, R. Gresback, U. Kortshagen, R. D. Schaller, and V. I. Klimov, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 177404 (2009).
39. D. Sarkar, H. P. Meulen, J. M. Calleja, J. M. Becker, R. J. Haug, and K. Pierz, *J. Appl. Phys.* **100**, 023109 (2006).
40. M. Califano, A. Franceschetti, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **75**, 115401 (2007).
41. C. Javaux, B. Mahler, B. Dubertret, A. Shabaev, A. V. Rodina, Al. L. Efros, D. Yakovlev, F. Liu, M. Bayer, G. Camps, L. Biadala, S. Buil, X. Quelin, and J.-P. Hermier, *Nature Nanotech.* **8**, 206 (2013).

42. H. Sun, J. Wang, F. Wang, L. Xu, K. Jiang, L. Shang, Z. Hu, and J. Chu, *Nanoscale* **10**, 11553 (2018).
43. P. C. Sercel and A. L. Efros, *Nano Lett.* **18**, 4061 (2018).
44. A. L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D. J. Norris, and M. Bawendi, *Phys. Rev. B* **54**, 4843 (1996).
45. A. L. Efros and M. Rosen, *Phys. Rev. B* **58**, 7120 (1998).
46. M. Sahin, *Phys. Rev. B* **77**, 119901 (2008).
47. A. M. Gilinsky and K. S. Zhuravlev, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3455 (2001).
48. X. Hou, Y. Li, H. Qin, and X. Peng, *J. Chem. Phys.* **151**, 234703 (2019).
49. G. E. Cragg and A. L. Efros, *Nano. Lett.* **10**, 313 (2010).
50. A. Jain, O. Voznyy, S. Hoogland, M. Korkusinski, P. Hawrylak, and E. H. Sargent, *Nano. Lett.* **16**, 6491 (2016).
51. V. V. Solovyev and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **79**, 233306 (2009).
52. Y. Kobayashi, T. Nishimura, H. Yamaguchi, and N. Tamai, *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 1051 (2011).
53. A. W. Cohn, J. D. Rinehart, A. M. Schimpf, A. L. Weaver, and D. R. Gamelin, *Nano Lett.* **14**, 353 (2014).

ДИОДНЫЙ ЭФФЕКТ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ГИБРИДНОЙ ПОЛОСКЕ Cu/MoN С БОКОВЫМ РАЗРЕЗОМ

С. С. Уставщиков^{a,b*}, М. Ю. Левичев^a, И. Ю. Пашенькин^a,

Н. С. Гусев^a, С. А. Гусев^a, Д. Ю. Водолазов^a

^a Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

^b Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 20 марта 2022 г.,
после переработки 7 апреля 2022 г.
Принята к публикации 8 апреля 2022 г.

Экспериментально исследованы транспортные характеристики сверхпроводящих гибридных полосок Cu/MoN с одиночным разрезом около одного из краев полоски. Такие полоски имеют сильный диодный (незвзаимный) эффект — в присутствии перпендикулярного магнитного поля величина критического тока может различаться почти в пять раз в зависимости от направления течения тока. Наблюдаемый эффект связан со сгущением линий тока вблизи разреза, что приводит к различию условий входа вихрей с края полоски, имеющей разрез, и с противоположного края, где разрез отсутствует. Различие в критических токах приводит к различным напряжениям в резистивном состоянии при разных направлениях протекания тока одинаковой величины. Из-за возможности достижения высокой скорости вихрей (несколько км/с) и безгистерезисных вольт-амперных характеристик в широком интервале температур подобные гибридные системы могут быть использованы для создания сверхпроводящего диода, работающего до частот порядка одного гигагерца.

DOI: 10.31857/S0044451022080107
EDN: EHMGRV

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что в пространственно-несимметричном потенциале движение частицы в различных (в простейшем случае одномерной системы — в противоположных) направлениях может быть невзаимным, и это приводит к появлению «диодного» (ratchet) эффекта в переменном во времени поле. Другими словами, при наличии переменной во времени и направлении силы с нулевым средним частица может перемещаться в одном направлении. В сверхпроводниках роль частицы играют вихри Абрикосова, а неоднородный потенциал создается искусственно, например, за счет асимметричной модуляции параметров сверхпроводника, например, толщины, формы или материальных параметров [1–8]. В этом случае при пропускании тока и наличии внешнего магнитного поля возника-

ют выделенные направления, вдоль которых вихрям двигаться легче. Это приводит к разной величине критического тока и разной абсолютной величине напряжения, пропорциональной скорости движения вихрей, для разных направлений протекания тока.

Данный эффект может быть использован для создания сверхпроводящего диода. Однако здесь возникают трудности практического характера. Кроме модуляции параметров сверхпроводника, приводящей к управляемому пиннингу вихрей, в сверхпроводнике есть и естественные дефекты, сила пиннинга которых при температурах, уже не сильно меньших критической, может превысить силу пиннинга искусственных «дефектов». Это разрушает диодный эффект (невзаимность) и является основной причиной того, почему экспериментально он был продемонстрирован в основном только вблизи критической температуры сверхпроводника [1–8]. Другим ограничением являются неравновесные эффекты, например, джоулев разогрев. При достаточно высокой скорости вихрей (и, значит, большом на-

* E-mail: sergey@ipmras.ru

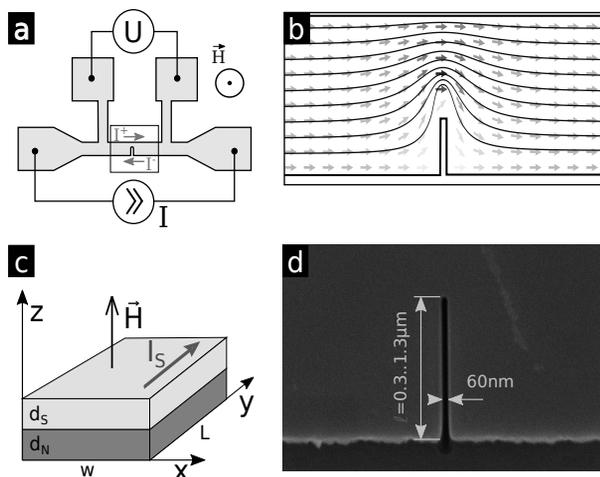


Рис. 1. а) Схематичное изображение исследуемой сверхпроводящей полоски с поперечным разрезом. б) Распределение плотности тока вблизи разреза. в) Схематичное изображение гибридной SN-структуры. д) Изображение полоски Cu/MoN с разрезом, полученное с помощью электронного микроскопа

пряжении) неравновесные эффекты становятся существенными и могут приводить к скачкообразному переходу сверхпроводника в нормальное состояние, что сильно затрудняет практическое использование сверхпроводящего диода. Ограничение на максимальную скорость вихря приводит к ограничению по частоте, при которой такой диод может работать: $\nu_c \lesssim v/w$, где v — скорость вихря, а w — ширина сверхпроводящей полоски. В настоящее время были достигнуты скорости вихрей порядка 10 км/с в различных сверхпроводниках [9–11], однако при ее превышении сверхпроводник скачкообразно переходит в нормальное состояние.

Целью настоящей работы является исследование диодного эффекта в гибридной сверхпроводящей полоске Cu/MoN с разрезом вблизи одного из краев (рис. 1). В нашей недавней работе [12] было показано, что в тонкопленочной полоске Cu/MoN пиннинг мал, скорость движения вихрей может достигать нескольких км/с и при достаточно большой толщине медного слоя пропадает гистерезис на вольт-амперных характеристиках (ВАХ), что делает этот материал перспективным для реализации сверхпроводящего диода. В предложенной системе невзаимность должна возникать из-за сгущения линий тока вблизи вершины разреза (рис. 1b), что приводит к различию условий входа вихрей с края полоски, имеющей разрез, и с противоположного края, где разрез отсутствует. Подобный меха-

низм возникновения диодного эффекта из-за наличия краевого дефекта был ранее предложен в работе [13] и позднее экспериментально реализован в Al-полоске с разным качеством краев [5]. Мы обнаружили, что по сравнению с работой [5] в полоске Cu/MoN с разрезом различие критических токов значительно больше, ВАХ являются безгистерезисными в широком интервале температур ниже критической, скорость движения вихрей достигает 2–3 км/с, что позволяет рассчитывать на работу такого диода при частотах до 1 ГГц при ширине полоски 1–2 мкм (в работе [5] диодный эффект исследовался при частоте несколько десятков килогерц). Рост величины выпрямленного напряжения в нашей системе возможен за счет увеличения количества разрезов вдоль полоски.

2. СТРУКТУРЫ СВЕРХПРОВОДНИК–НОРМАЛЬНЫЙ МЕТАЛЛ

В работе исследованы несколько полосок (ширина $w = 2.5$ мкм, длина $L = 30$ мкм), изготовленных из двухслойной гибридной пленки сверхпроводник (S — MoN) — нормальный металл (N — Cu). Пленки были выращены методом магнетронного напыления с базовым уровнем вакуума примерно $1.5 \cdot 10^{-7}$ мбар на стандартных кремниевых подложках размером 10×10 мм² без удаления оксидного слоя. Сначала был напылен слой меди в атмосфере аргона при давлении $1 \cdot 10^{-3}$ мбар. Затем *in situ* был сформирован слой нитрида молибдена напылением молибдена в атмосфере смеси газов Ar : N₂ = 10 : 1 при давлении $1 \cdot 10^{-3}$ мбар и комнатной температуре. Толщины слоев ($d_S = 20$ нм, $d_N = 40$ нм) были измерены методом рентгеновской дифрактометрии. Сверху был напылен защитный слой кремния толщиной 5 нм. Удельное сопротивление при комнатной температуре составляло $\rho \simeq 4$ мкОм·см, критическая температура сверхпроводящего перехода $T_c = 6.8$ К (у одиночного слоя MoN критическая температура равна 7.8 К).

Транспортные измерения проводились стандартным четырехточечным методом в режиме постоянного заданного тока в «сухом» криостате на базе криорефрижератора «Cryomech Pulse Tube 410» при температуре 4.2 К. Магнитное поле ориентировано по нормали к поверхности образца. Для подавления высокочастотного шума используется двухкаскадный аналоговый RC-фильтр с шириной полосы 50 кГц при комнатной температуре.

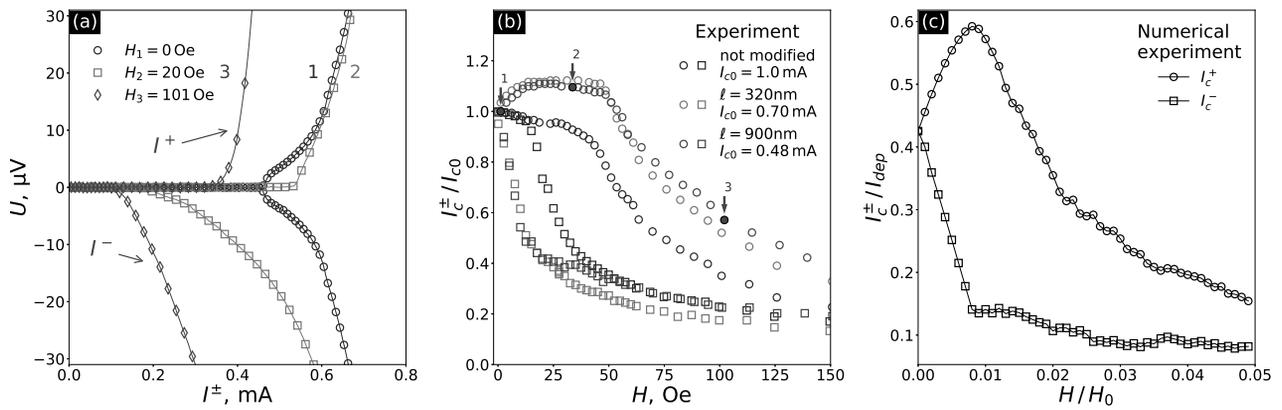


Рис. 2. а) ВАХ полоски Cu/MoN с разрезом длиной 900 нм при трех значениях магнитного поля: положительные значения напряжения соответствуют «положительному» направлению тока I^+ , отрицательные значения напряжения — «отрицательному» направлению тока I^- ; обе ветви тока отображены на положительное направление оси абсцисс. б, в) Зависимости критического тока I_c^\pm , текущего в разных направлениях, от перпендикулярного магнитного поля, эксперимент (б), теория (в), $H_0 = \Phi_0/2\pi\xi^2$, I_{dep} — ток распаривания, кружки соответствуют положительному направлению тока, квадраты — отрицательному

Разрез на краю полоски был сформирован с помощью сфокусированного пучка ионов Ga (focused ion beam, FIB). Ширина разреза составляла 60 нм (измерена с помощью электронного микроскопа на полувысоте разреза), длина разреза ℓ варьировалась от 300 до 1300 нм (скан типичного образца представлен на рис. 1d). Увеличение длины разреза приводит к уменьшению величины критического тока в нулевом поле, I_{c0} , и к увеличению разницы между величинами критического тока (в ненулевом магнитном поле), текущего в противоположных направлениях.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 2а приведены ВАХ для полоски с длиной разреза 900 нм, характерные для всей серии образцов. Положительное направление тока I^+ соответствует положительным значениям напряжения, отрицательное направление тока I^- — отрицательным значениям напряжения. Выбор положительного направления тока соответствует направлению магнитного поля, приведенному на рис. 1а. ВАХ приведены для трех значений внешнего магнитного поля: $H_1 = 0$ (кривая 1), H_2 в области максимальной разности критических токов $\Delta I_c = I_c^+ - I_c^-$ (кривая 2) и $H_3 \gg H_2$ (кривая 3). Критическое значение тока I_c^\pm соответствует появлению напряжения на потенциальных контактах величиной 0.1 мкВ.

На рис. 2б приведены зависимости $I_c^+(H)$ (на рисунке обозначены кружками) и $I_c^-(H)$ (на рисунке

обозначены квадратами) для полосок с различной длиной разреза и для полоски без разреза. С увеличением магнитного поля разность критических токов ΔI_c меняется от нуля при $H = 0$ до максимальной при $H = 40\text{--}50$ Э и при дальнейшем росте поля опять убывает. Заметим, что даже в полоске без разреза наблюдается различие в критических токах, что по-видимому, связано с наличием естественных краевых дефектов. Однако наличие искусственного дефекта (разреза) значительно увеличивает разность ΔI_c .

На рис. 2в приведены рассчитанные зависимости $I_c^+(H)$ и $I_c^-(H)$. В расчетах было принято во внимание, что неравновесные эффекты, возникающие при движении вихрей в SN-полоске могут быть значительно меньше, чем в обычном сверхпроводнике, именно по этой причине ВАХ являются безгистерезисными, а скорость вихрей может достигать несколько км/с [12]. Поэтому в модели использовалось стандартное нестационарное двумерное уравнение Гинзбурга–Ландау [14] для сверхпроводящего параметра порядка $\Delta = |\Delta| \exp(i\phi)$:

$$\frac{\pi\hbar}{8k_B T_c} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{2ie\varphi}{\hbar} \right) \Delta = \xi^2 \left(\nabla - i \frac{2e}{\hbar c} A \right)^2 \Delta + \left(1 - \frac{T}{T_c} - \frac{|\Delta|^2}{\Delta_{GL}^2} \right) \Delta, \quad (1)$$

вместе с уравнением для электрического потенциала φ :

$$\text{div } j = \text{div} \left(\frac{\sigma_n}{e} \frac{\pi |\Delta|^2 (\nabla \phi - 2eA/\hbar c)}{4k_B T_c} - \sigma_n \nabla \varphi \right) = 0, \quad (2)$$

где σ_n — проводимость в нормальном состоянии, $\Delta_{GL} = 3.06k_B T_c$ и A — векторный потенциал.

Распределение сверхпроводящего параметра порядка по толщине считалось однородным, поэтому задача является двумерной. Вообще говоря, это не так для SN-слоя, где форма вихря может иметь форму гриба [15], однако для нашей задачи данные эффекты несущественны. Для уменьшения времени счета мы выбрали ширину полоски $w = 50\xi$, длину $L = 150\xi$ (ξ — здесь некая эффективная сверхпроводящая длина когерентности — см. уравнение (1), которая лежит между $\xi_S \approx 6.3$ нм — длиной когерентности в слое MoN и $\xi_N \approx 30$ нм — длиной когерентности в слое Cu), длину разреза 20ξ , ширину разреза 2ξ . Численное моделирование показывает, что отличие $I_c^+(H)$ от $I_c^-(H)$ связано со сгущением линий тока около разреза и локально более высокой плотности тока. Поэтому при $H = 0$ вихри входят в полоску у вершины разреза. Внешнее поле создает экранирующие токи, которые либо складываются с транспортным током, либо вычитаются из него вблизи разреза. Это приводит к уменьшению I_c^- и росту I_c^+ при увеличении поля. В достаточно большом поле вихри начинают входить через край полоски напротив разреза и величина I_c^+ начинает уменьшаться. При этом поле достигает максимум на зависимости $I_c^+(H)$, а также максимальная разница между критическими токами $\Delta I_c(H)$. При дальнейшем увеличении поля вихри начинают входить и в других местах полоски, при этом $I_c^+(H)$ приближается к $I_c^-(H)$ и невзаимность становится слабее.

Экспериментальные ВАХ полностью обратимы (отсутствует гистерезис) даже в слабых магнитных полях, что выгодно отличает данную систему от других реализаций диодных сверхпроводящих систем. При $H = 0$ и в диапазоне токов I_c от 0.48 до 0.55 мА форма ВАХ похожа на ВАХ джозефсоновского контакта. Это не удивительно, так как еще в работе [16] было показано, что полоска с двумя разрезами на противоположных ее краях по своим свойствам схожа с джозефсоновским контактом (нашу систему можно рассматривать как «половину» такого джозефсоновского контакта). Однако при токе, большем 0.55 мА, возникает резкий рост напряжения (см. рис. 2а), что, как показывают ре-

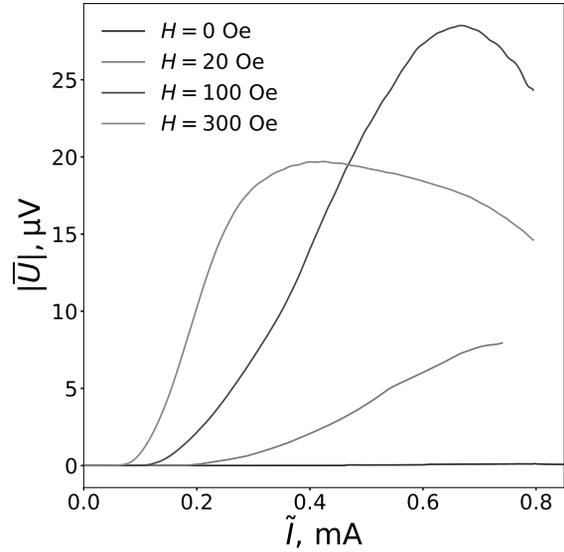


Рис. 3. Расчетная зависимость выпрямленного напряжения \bar{U} от амплитуды переменного тока \tilde{I} в различных магнитных полях

зультаты численного расчета, связано с появлением «вихревой речки» [9–11, 17], являющейся неким аналогом линии проскальзывания фазы в случае пространственно-неоднородного распределения тока [18]. Этот результат лежит вне области применимости работы [16]. Включение поля делает распределение плотности тока более однородным поперек полоски для положительного направления тока и более неоднородным для отрицательного направления. Это приводит к более резкому росту напряжения с ростом тока для I^+ , так как вихревая речка появляется почти при I_c^+ , и к более плавному росту напряжения для I^- , где вихревая речка появляется при $I^- \gg I_c^-$.

Заметим, что даже в нулевом поле до достижения режима вихревой речки в полоске одновременно могут находиться и двигаться несколько вихрей (их количество растет с увеличением ширины полоски и величины тока) — они движутся от разреза к противоположному краю полоски. С учетом ширины полоски Cu/MoN и длины разреза результаты численного счета дают оценку 2–3 вихря. Используя соотношение Джозефсона $2eU = \hbar d\phi/dt$ и то, что проход вихря поперек полоски приводит к изменению фазы ϕ на 2π , мы оценили скорость вихрей в момент перехода в режим вихревой речки как 2–3 км/с.

Используя экспериментальные ВАХ, мы рассчитали зависимости величины среднего по времени напряжения \bar{U} от амплитуды переменного тока \tilde{I} при нулевом постоянном токе (рис. 3). Качественно они сходны с аналогичными зависимостями, приведенными в работах [1–6], причем максимальная величина \bar{U} — несколько микровольт, близка к значениям из работ [1–3]. Это значение на практике можно легко увеличить, увеличив количество разрезов. Минимальное расстояние между разрезами должно быть больше ℓ — длины разреза, так как ток от вершины разреза убывает степенным образом, приблизительно как $1/\sqrt{r}$. В этом случае сгущение линий тока около одного разреза будет оказывать слабое влияние на сгущение линий тока у соседнего разреза.

В наших расчетах мы использовали квазистационарное приближение, т. е. предполагали, что $U(t) = U(I(t))$, т. е. что изменение тока приводит к мгновенному изменению напряжения. Понятно, что данное приближение должно быть разумным при частотах $\nu < v/w \sim 1$ ГГц для нашей системы. Интересно, что близкое, зависящее от геометрии и скорости вихрей ограничение по частоте в 700 МГц было экспериментально обнаружено для сверхпроводящего диода, основанного на Nb-полоске, покрытой модулированным в пространстве слоем Co [7].

При более низких температурах ВАХ мостиков Cu/MoN с используемыми толщинами становятся гистерезисными (см. рис. 4 в [12]). Однако увеличение толщины слоя нормального металла позволяет устранить эту проблему. Так, мы обнаружили, что даже в мостиках без разреза (имеющих большую величину критического тока) гистерезис ВАХ отсутствует вплоть до $T = 0.8$ К при толщине слоя меди 100 нм.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В нашей работе экспериментально продемонстрирована сильная зависимость величины критического тока от направления его течения в гибридной сверхпроводящей полоске Cu/MoN с боковым разрезом при наличии перпендикулярного магнитного поля. Диодный эффект обусловлен сильной концентрацией тока вблизи вершины разреза, что приводит к разным условиям для входа вихрей вблизи краев полоски с разрезом и без него. Благодаря слою нормального металла, ВАХ таких полосок безгистерезисные даже при температуре значительно ниже критической температуры, а скорость вихрей может достигать нескольких км/с. Это позволяет ожидать

наличия диодного эффекта в таких полосках шириной 1–2 мкм вплоть до частот порядка одного гигагерца.

Финансирование. Работа выполнена в рамках госзаданий ИФМ РАН 0030-2021-0020 (измерения и численные расчеты) и 0030-2022-0006 (изготовление образцов).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. E. Villegas, S. Savel'ev, F. Nori, E. M. Gonzalez, J. V. Anguita, R. Garcia, and J. L. Vicent, *Science* **302**, 1188 (2003).
2. G. Carapella and G. Costabile, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 077002 (2001).
3. J. Van de Vondel, C. C. de Souza Silva, B. Y. Zhu, M. Morelle, and V. V. Moshchalkov, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057003 (2005).
4. B. L. T. Plourde, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **19**, 3698 (2009).
5. D. Cerbu, V. N. Gladilin, J. Cuppens, J. Fritzsche, J. Tempere, J. T. Devreese, V. V. Moshchalkov, A. V. Silhanek, and J. Van de Vondel, *New J. Phys.* **15**, 063022 (2013).
6. J. Ji, J. Yuan, G. He, B. Jin, B. Zhu, X. Kong, X. Jia, L. Kang, K. Jin, and P. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 242601 (2019).
7. O. V. Dobrovolskiy, E. Begun, V. M. Bevz, R. Sachser, and M. Huth, *Phys. Rev. Appl.* **13**, 024012 (2020).
8. F. Ando, Y. Miyasaka, T. Li, J. Ishizuka, T. Arakawa, Y. Shiota, T. Moriyama, Y. Yanase, and T. Ono, *Nature* **584**, 373 (2021).
9. L. Embon, Y. Anahory, Z. L. Jelic, E. O. Lachman, Y. Myasoedov, M. E. Huber, G. P. Mikitik, A. V. Silhanek, M. V. Milosevic, A. Gurevich, and E. Zeldov, *Nature Comm.* **8**, 85 (2017).
10. O. V. Dobrovolskiy, D. Yu. Vodolazov, F. Porrati, R. Sachser, V. M. Bevz, M. Yu. Mikhailov, A. V. Chumak, and M. Huth, *Nature Comm.* **11**, 3291 (2020).
11. B. Budinska, B. Aichner, D. Yu. Vodolazov, M. Yu. Mikhailov, F. Porrati, M. Huth, A. V. Chumak, W. Lang, and O. V. Dobrovolskiy, *Phys. Rev. Appl.* **17**, 0340721 (2022).

12. S. S. Ustavshchikov, M. Yu. Levichev, I. Y. Pashenkin, A. M. Klushin, and D. Yu. Vodolazov, *Supercond. Sci. Technol.* **34**, 015004 (2021).
13. D. Yu. Vodolazov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **72**, 172508 (2005).
14. B. I. Ivlev and N. B. Kopnin, *Adv. Phys.* **33**, 80 (1984).
15. V. S. Stolyarov, T. Cren, Ch. Brun, I. A. Golovchanskiy, O. V. Skryabina, D. I. Kasatonov, M. M. Kha-
raev, M. Yu. Kupriyanov, A. A. Golubov, and D. Roditchev, *Nature Comm.* **9**, 2277 (2018).
16. Л. Г. Асламазов, А. Л. Ларкин, *ЖЭТФ* **68**, 766 (1975) [L. G. Aslamazov and A. I. Larkin, *Sov. Phys. JETP* **41**, 381 (1975)].
17. D. Y. Vodolazov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **76**, 014521 (2007).
18. С. В. Лемпицкий, *ЖЭТФ* **90**, 793 (1986) [S. V. Lempitskii, *Sov. Phys. JETP* **63**, 462 (1986)].

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЛАВИНЫ РЕЛЯТИВИСТСКИХ УБЕГАЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ МЕТОДОМ ГРУППОВЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ МОМЕНТОВ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

*Е. И. Бочков**

*Российский федеральный ядерный центр — ВНИИЭФ
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 12 апреля 2022 г.,
после переработки 12 апреля 2022 г.
Принята к публикации 18 апреля 2022 г.

Получена модифицированная система групповых уравнений для двух первых моментов функции распределения электронов высоких энергий: уравнения баланса концентрации и плотности потока электронов. Главное отличие полученной системы от имеющихся версий заключается в том, что в ней члены, отвечающие за рождение электронов, выведены непосредственно из ионизационного интеграла. С помощью данной системы выполнено численное моделирование развития в однородном электрическом поле лавины релятивистских убегающих электронов. Рассчитанные характеристики лавины: время усиления, средняя энергия электронов, направленная скорость, энергетический спектр и пространственные распределения электронов, хорошо согласуются с результатами расчетов по методу Монте-Карло.

DOI: 10.31857/S0044451022080119

EDN: EHSWHP

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1992 г. Гуревичем, Милихом и Рюсселем-Дюпре был предложен механизм развития атмосферных разрядов, основанный на генерации лавин релятивистских убегающих электронов (ЛРУЭ) в плотных газах и слабых электрических полях [1]. В настоящее время предполагается, что данный механизм лежит в основе широкого круга наблюдаемых в грозовой атмосфере явлений: усиление потоков рентгеновского излучения в грозовых облаках и ступенчатом лидере молнии; вспышки жесткого гамма-излучения, регистрируемые в ближнем космосе, вблизи уровня моря и в высокогорных условиях (см. обзор [2]); регистрация грозовых нейтронов в высокогорных условиях (см. обзор [3]); зарождение разряда молнии [4–7]; генерация высотных оптических явлений [8, 9] и узких биполярных электромагнитных импульсов [10, 11].

Для понимания результатов данных наблюдений необходима разработка эффективных методов чис-

ленного моделирования разрядов, развивающихся в режиме генерации ЛРУЭ. Как известно, наиболее полная информация, необходимая для описания плазменных процессов в газовом разряде, содержится в функции распределения электронов (ФРЭ), которую можно вычислить, решая кинетическое уравнение (КУ), или методом Монте-Карло (МК). Однако на практике численное моделирование на основе КУ или метода МК требует очень больших вычислительных ресурсов. Эффективнее моделирование в приближении сплошной среды на основе системы уравнений для моментов ФРЭ [12]. В работе [13] для моделирования стратосферных разрядов была использована система групповых уравнений (ГУ) для моментов релятивистской ФРЭ, но записаны данные уравнения были на основании упрощенных априорных соображений. Последовательный вывод системы ГУ для нулевого, первого и второго моментов релятивистской ФРЭ был выполнен в работе [14]. Точность метода моментов была продемонстрирована в [15] путем сравнения результатов численного решения системы ГУ с результатами моделирования методом МК. Существенным недостатком полученной в [14] системы ГУ является то, что в ней ионизационные члены, отвечающие за гене-

* E-mail: e_i_bochkov@mail.ru

рацию электронов высоких энергий, не были выведены непосредственно из ионизационного интеграла столкновений, а записаны из априорных соображений.

В данной работе представлена замкнутая система ГУ для двух первых моментов ФРЭ, в которой точно описаны ионизационные члены и не требуется задание априорных зависимостей. Возможности полученной системы продемонстрированы путем численного моделирования развития в воздухе при нормальных условиях в однородном электрическом поле ЛРУЭ. Сравнительный анализ вычисленных характеристик ЛРУЭ с результатами МК-расчетов показывает эффективность представленного метода ГУ.

2. СИСТЕМА ГРУППОВЫХ УРАВНЕНИЙ

В статье [14] получена система многогрупповых уравнений для первых трех моментов функции распределения электронов высоких энергий: концентрации электронов, уравнений движения (направленного импульса) и средней энергии. Как показали результаты работы [15], для численного моделирования эволюции лавины релятивистских убегающих электронов достаточно только уравнений баланса концентрации и уравнений движения. Уравнения для концентрации электронов имеют вид [14, 15]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_k}{\partial t} + \text{div}_{\mathbf{r}} \mathbf{j}_k = & \left[\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2}) \right] \times \\ & \times \frac{n_{k-1/2}}{p_k - p_{k-1}} - \left[\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2}) \right] \times \\ & \times \frac{n_{k+1/2}}{p_{k+1} - p_k} + S_{ion,k}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь N — число разбиений интервала в пространстве импульсов $[p_{min}, p_{max}]$, границы которого определяются условиями задачи; k — номер группы, ширина которой $[p_{k-1/2}, p_{k+1/2}]$ в общем случае произвольна; n_k — концентрация электронов; \mathbf{j}_k — плотность потока электронов в k -й группе; $\langle \mu \rangle_k$ — косинус угла между векторами \mathbf{j}_k и $\mathbf{e} = -\mathbf{E}/E$; q_e — элементарный заряд; F_D — сила трения, описывающая усредненные потери энергии электроном; $S_{ion,k}$ — источник вторичных электронов высоких энергий, рождаемых в результате ионизации.

Как отмечалось во Введении, недостатком системы ГУ, полученной в [14], является то, что в ней ионизационный член $S_{ion,k}$, не был непосредственно выведен из ионизационного интеграла столкновений. Для него была принята следующая упрощенная форма [14]:

$$S_{ion,k} = \frac{\delta_{1k}}{t_{re}(E)} \sum_{i=k}^N n_i. \quad (2)$$

Здесь предполагается, что все вторичные электроны попадают в первую группу, а число электронов растет с характерным временем t_{re} , которое зависит от напряженности поля. Таким образом, система ГУ, полученная в [14], не является замкнутой, поскольку требует априорного знания зависимости $t_{re}(E)$. Используя дифференциальное разложение интеграла столкновений электронов, полученное в [16], можно вывести точное выражение для ионизационного члена в уравнениях (1), что будет сделано ниже.

Поскольку в уравнениях (1) в дивергентный член, описывающий перенос электронов в пространстве, входят величины плотности потока электронов \mathbf{j}_k , при проведении практических расчетов предпочтительно иметь уравнения непосредственно для данных величин, а не направленного импульса, как в [14]. Для того чтобы получить систему уравнений для плотности потока электронов, рассмотрим релятивистское кинетическое уравнение для ФРЭ $f(\mathbf{r}, p, \mu, t)$ [17]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{r}, p, \mu, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, p, \mu, t) + \\ + \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} [p^2(\mu q_e E - F_D(p)) f(\mathbf{r}, p, \mu, t)] + \\ + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[q_e E \frac{1-\mu^2}{p} f(\mathbf{r}, p, \mu, t) \right] - \frac{(Z+4)F_D(p)}{8\gamma p} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1-\mu^2) \frac{\partial f(\mathbf{r}, p, \mu, t)}{\partial \mu} \right] = St_{ion}, \end{aligned} \quad (3)$$

где \mathbf{v} — скорость электрона, μ — угол между вектором импульса \mathbf{p} и единичным вектором в направлении электрической силы \mathbf{e} . Ионизационный интеграл в правой части уравнения (3), отвечающий за рождение электронов высоких энергий, имеет вид [17]

$$\begin{aligned} St_{ion} = N_0 v \int_{2\varepsilon + \varepsilon_{ion}}^{\infty} d\varepsilon' \left(\frac{\gamma'^2 - 1}{\gamma'^2 + 1} \right) \times \\ \times \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon) \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\mathbf{r}, p', \mu', t) d\alpha, \end{aligned} \quad (4)$$

где ε_{ion} — порог ионизации. В случае релятивистских электронов, энергия которых много больше энергии связи атомарных электронов, процесс ионизации можно описывать как рассеяние электрона на покоящемся свободном электроном, тогда связь между величинами μ и μ' задается уравнением [17]

$$\mu' = \mu\mu_0 + \sqrt{1 - \mu^2}\sqrt{1 - \mu_0^2} \cos \alpha, \quad (5)$$

где

$$\mu_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon(\varepsilon' + 2m_e c^2)}{\varepsilon'(\varepsilon + 2m_e c^2)}}$$

— угол рассеяния электрона.

Определим величину плотности потока электронов в k -й группе:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t) &\equiv \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\varphi = \\ &= \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} (\mathbf{v}_\perp + v\mu\mathbf{e}) f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\varphi = \\ &= 2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} v p^2 dp \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu \mathbf{e} \approx \\ &\approx 2\pi v_k p_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu \mathbf{e}. \quad (6) \end{aligned}$$

Также определим величину направленной скорости электронов:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_k(\mathbf{r}, t) &\equiv \mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t) / n_k(\mathbf{r}, t) = \\ &= \frac{\int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} v p^2 dp \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu}{\int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu} \mathbf{e} \approx \\ &\approx \frac{\int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu}{\int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu} v_k \mathbf{e} = \langle \mu \rangle_k v_k \mathbf{e}. \quad (7) \end{aligned}$$

Для того чтобы найти уравнения для величин \mathbf{j}_k , необходимо кинетическое уравнение (3) умножить на величину $\mathbf{v}p^2$ и проинтегрировать по переменным p , μ , φ на отрезках $p \in [p_{k-1/2}, p_{k+1/2}]$, $\mu \in [-1, 1]$ и $\varphi \in [0, 2\pi]$. Интегрируя таким образом первый член в левой части уравнения (3), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 \mu d\mu \int_0^{2\pi} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\varphi = \frac{\partial \mathbf{j}_k}{\partial t}. \quad (8)$$

Далее интегрируем второй член:

$$\begin{aligned} &\int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} \mathbf{v} \sum_i v_i \nabla_i f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\varphi = \\ &= \sum_i \nabla_i \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} \mathbf{v} \cdot v_i f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\varphi = \\ &= \sum_i \nabla_i n_k(\mathbf{r}, t) \langle \mathbf{v} \cdot v_i \rangle_k \approx \sum_i \nabla_i n_k \mathbf{u}_k u_{k,i} = \\ &= \mathbf{j}_k \sum_i \nabla_i u_{k,i} + \sum_i u_{k,i} \nabla_i \mathbf{j}_k = \\ &= \mathbf{j}_k \operatorname{div}_r \mathbf{u}_k + (\mathbf{u}_k \cdot \nabla_r) \mathbf{j}_k = (\nabla_r \cdot \mathbf{u}_k) \mathbf{j}_k. \quad (9) \end{aligned}$$

При выводе данного выражения величины моментов второго порядка $\langle \mathbf{v} \cdot v_i \rangle_k$ были заменены на произведение моментов первого порядка аналогично тому, как это было сделано в работе [14]. Данное приближение можно обосновать следующим образом. В рассматриваемом здесь случае полагается, что ФРЭ не зависит от азимутального угла в пространстве импульсов, поэтому если направить ось z в координатном пространстве вдоль вектора \mathbf{e} , то отличным от нуля будет только момент $\langle v_z^2 \rangle_k \mathbf{e}$. Величина $\langle v_z^2 \rangle_k$ выражается как

$$\begin{aligned} \langle v_z^2 \rangle_k &= \frac{2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} v^2 p^2 dp \int_{-1}^1 \mu^2 f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu}{2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu} \approx \\ &\approx \frac{\int_{-1}^1 \mu^2 f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu}{\int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu} = \\ &= v_k^2 \langle \mu^2 \rangle_k \approx v_k^2 \langle \mu \rangle_k^2 = u_k^2. \quad (10) \end{aligned}$$

Как показывают результаты МК-расчетов развития в электрическом поле ЛРУЭ [18], угловое распределение релятивистских электронов сильно вытянуто вдоль вектора \mathbf{e} , и средний косинус угла между вектором скорости электронов и вектором напряженности поля, а также среднее значение квадрата косинуса близки к единице, поэтому замена в (10) значения величины среднего квадрата косинуса $\langle \mu^2 \rangle_k$ на квадрат среднего значения $\langle \mu \rangle_k^2$ не должна приводить к большой ошибке.

Интегрирование третьего члена кинетического уравнения (3) дает

$$\begin{aligned}
 & \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} \frac{\mathbf{v}}{p^2} \times \\
 & \times \frac{\partial}{\partial p} [p^2(\mu q_e E - F_D(p))f(\mathbf{r}, p, \mu, t)] d\varphi = \\
 & = 2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} v dp \int_{-1}^1 \mu \times \\
 & \times \frac{\partial}{\partial p} [p^2(\mu q_e E - F_D(p))f(\mathbf{r}, p, \mu, t)] d\mu \mathbf{e} \approx \\
 & \approx \left[2\pi p_{k+1/2}^2 v_{k+1/2} \int_{-1}^1 (\mu^2 q_e E - \mu F_D(p_{k+1/2})) \times \right. \\
 & \times f(\mathbf{r}, p_{k+1/2}, \mu, t) d\mu - 2\pi p_{k-1/2}^2 v_{k-1/2} \times \\
 & \times \left. \int_{-1}^1 (\mu^2 q_e E - \mu F_D(p_{k-1/2})) f(\mathbf{r}, p_{k-1/2}, \mu, t) d\mu - \right. \\
 & \left. - 2\pi p_k^2 \left(\frac{dv}{dp} \right)_k (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \times \right. \\
 & \times \left. \int_{-1}^1 (\mu^2 q_e E - \mu F_D(p_k)) f(\mathbf{r}, p_k, \mu, t) d\mu \right] \mathbf{e} \approx \\
 & \approx \left[\langle \mu^2 \rangle_{k+1/2} q_e E - \langle \mu \rangle_{k+1/2} F_D(p_{k+1/2}) \right) \times \\
 & \times \frac{v_{k+1/2} n_{k+1/2}}{p_{k+1} - p_k} - \\
 & - \left(\langle \mu^2 \rangle_{k-1/2} q_e E - \langle \mu \rangle_{k-1/2} F_D(p_{k-1/2}) \right) \times \\
 & \times \frac{v_{k-1/2} n_{k-1/2}}{p_k - p_{k-1}} - \left(\frac{dv}{dp} \right)_k \times \\
 & \times \left(\langle \mu^2 \rangle_k q_e E - \langle \mu \rangle_k F_D(p_k) \right) n_k \right] \mathbf{e} \approx \\
 & \approx \left(\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2}) \right) \frac{\mathbf{j}_{k+1/2}}{p_{k+1} - p_k} - \\
 & - \left(\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2}) \right) \frac{\mathbf{j}_{k-1/2}}{p_k - p_{k-1}} - \\
 & - \frac{1}{v_k} \left(\frac{dv}{dp} \right)_k \left(\langle \mu \rangle_k q_e E - F_D(p_k) \right) \mathbf{j}_k = \\
 & = \frac{\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2})}{p_{k+1} - p_k} \mathbf{j}_{k+1/2} - \\
 & - \frac{\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2})}{p_k - p_{k-1}} \mathbf{j}_{k-1/2} - \\
 & - \frac{\langle \mu \rangle_k q_e E - F_D(p_k)}{\gamma_k^2 p_k} \mathbf{j}_k. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Здесь при получении последнего равенства мы учли соотношение

$$\frac{1}{v} \left(\frac{dv}{dp} \right) = \frac{1}{\gamma^2 p}.$$

Интегрируя сумму четвертого и пятого членов уравнения (3), получаем

$$\begin{aligned}
 & 2\pi \mathbf{e} \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} v p^2 dp \int_{-1}^1 \mu d\mu \times \\
 & \times \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} \left[q_e E \frac{1-\mu^2}{p} f(\mathbf{r}, p, \mu, t) \right] - \frac{(Z+4)F_D(p)}{8\gamma p} \times \right. \\
 & \times \left. \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1-\mu^2) \frac{\partial f(\mathbf{r}, p, \mu, t)}{\partial \mu} \right] \right\} = \\
 & = -2\pi \mathbf{e} \left[\int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} \frac{v}{p} p^2 dp \int_{-1}^1 q_e E (1-\mu^2) f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu - \right. \\
 & - \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} \frac{(Z+4)F_D(p)}{8\gamma p} v p^2 dp \times \\
 & \times \left. \int_{-1}^1 (1-\mu^2) \frac{\partial f(\mathbf{r}, p, \mu, t)}{\partial \mu} d\mu \right] \approx \\
 & \approx -\mathbf{e} \left[(1-\langle \mu^2 \rangle_k) \frac{v_k n_k}{p_k} q_e E - \right. \\
 & - \left. \frac{(Z+4)F_D(p_k)}{4\gamma_k p_k} \langle \mu \rangle_k v_k n_k \right] \approx \\
 & \approx -\left(1-\langle \mu \rangle_k^2 \right) \frac{v_k n_k}{p_k} q_e E \mathbf{e} + \frac{(Z+4)F_D(p_k)}{4\gamma_k p_k} \mathbf{j}_k \approx \\
 & \approx \frac{v_k n_k}{p_k} q_e \mathbf{E} + \left[\langle \mu \rangle_k q_e E + \frac{(Z+4)F_D(p_k)}{4\gamma_k} \right] \frac{\mathbf{j}_k}{p_k}. \quad (12)
 \end{aligned}$$

Объединяя выражения (8), (9), (11), (12), получаем следующее уравнение для плотности потока электронов:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \mathbf{j}_k}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{u}_k) \mathbf{j}_k = \left[\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2}) \right] \times \\
 & \times \frac{\mathbf{j}_{k-1/2}}{p_k - p_{k-1}} - \left[\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2}) \right] \frac{\mathbf{j}_{k+1/2}}{p_{k+1} - p_k} + \\
 & + \left[\frac{\langle \mu \rangle_k q_e E - F_D(p_k)}{\gamma_k^2} - \left(\langle \mu \rangle_k q_e E + \frac{(Z+4)F_D(p_k)}{4\gamma_k} \right) \right] \times \\
 & \times \frac{\mathbf{j}_k}{p_k} - \frac{v_k n_k}{p_k} q_e \mathbf{E} + \mathbf{S}_{ion,k}^j. \quad (13)
 \end{aligned}$$

Теперь вычислим ионизационные члены $S_{ion,k}$ и $S_{ion,k}^j$ в уравнениях (1) и (13). Используя дифференциальное разложение интеграла столкновений, полученное в работе [16], мы можем выразить интеграл по переменной α в (4) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\mathbf{r}, p', \mu', t) d\alpha &= f(\mathbf{r}, p', \mu, t) + \\ &+ \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(1-\mu_0)^l}{2^l(l!)^2} \frac{\partial^l}{\partial \mu^l} \left\{ (1-\mu^2)^l \frac{\partial^l f}{\partial \mu^l} \right\} = \\ &= f(\mathbf{r}, p', \mu, t) + \frac{1-\mu_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \left\{ (1-\mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right\} + \\ &+ \frac{(1-\mu_0)^2}{16} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \left\{ (1-\mu^2)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} \right\} + \dots \quad (14) \end{aligned}$$

Соответственно ионизационный интеграл примет вид

$$\begin{aligned} St_{ion} &= N_0 v \int_{2\varepsilon+\varepsilon_{ion}}^{\infty} \left(f(\mathbf{r}, p', \mu, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(1-\mu_0)^l}{2^l(l!)^2} \times \right. \\ &\times \left. \frac{\partial^l}{\partial \mu^l} \left\{ (1-\mu^2)^l \frac{\partial^l f}{\partial \mu^l} \right\} \right) \left(\frac{\gamma'^2-1}{\gamma^2-1} \right) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon) d\varepsilon'. \quad (15) \end{aligned}$$

Удобство данного разложения заключается в том, что его легко можно проинтегрировать по переменной μ , и таким образом можно получать уравнения для моментов ФРЭ любого порядка. Так, для момента нулевого порядка, т. е. величины $S_{ion,k}$, имеем

$$\begin{aligned} S_{ion,k} &= 2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 St_{ion} d\mu = 2\pi N_0 \times \\ &\times \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} \frac{vp^2}{\gamma^2-1} dp \int_{2\varepsilon+\varepsilon_{ion}}^{\infty} (\gamma'^2-1) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon) d\varepsilon' \times \\ &\times \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p', \mu, t) d\mu \approx N_0 \frac{v_k}{\gamma_k^2-1} \times \\ &\times 2\pi p_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \times \\ &\times \int_{2\varepsilon_k+\varepsilon_{ion}}^{\infty} (\gamma'^2-1) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon_k) d\varepsilon' \times \\ &\times \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p', \mu, t) d\mu \approx N_0 \frac{v_k p_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2})}{\gamma_k^2-1} \times \\ &\times \int_{2\varepsilon_k}^{\infty} \frac{(\gamma'^2-1) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon_k) v'}{p'^2} 2\pi p'^2 dp' \times \\ &\times \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p', \mu, t) d\mu. \quad (16) \end{aligned}$$

Здесь при получении последнего равенства мы учли, что $d\varepsilon' = v' dp'$ и $2\varepsilon_k \gg \varepsilon_{ion}$. С учетом того, что по определению

$$n_i \equiv 2\pi \int_{p_{i-1/2}}^{p_{i+1/2}} p^2 dp \int_{-1}^1 f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu,$$

выражение (16) окончательно можно записать в виде

$$\begin{aligned} S_{ion,k} &\approx N_0 \frac{v_k p_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2})}{\gamma_k^2-1} \times \\ &\times \sum_{i=i_k}^N \frac{\sigma_{ion}(\varepsilon_i, \varepsilon_k) v_i (\gamma_i^2-1)}{p_i^2} n_i = \\ &= N_0 v_k (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \sum_{i=i_k}^N v_i \sigma_{ion}(\varepsilon_i, \varepsilon_k), \quad (17) \end{aligned}$$

где i_k — номер интервала $[p_{i-1/2}, p_{i+1/2}]$, в котором лежит $p(2\varepsilon_k)$. Аналогичным образом можно получить ионизационный член, входящий в уравнение (13):

$$\begin{aligned} S_{ion,k}^j &= 2\pi \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} vp^2 dp \int_{-1}^1 \mu St_{ion} d\mu \mathbf{e} = \\ &= 2\pi N_0 \int_{p_{k-1/2}}^{p_{k+1/2}} \frac{v^2 p^2}{\gamma^2-1} dp \times \\ &\times \int_{2\varepsilon+\varepsilon_{ion}}^{\infty} (\gamma'^2-1) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon) \mu_0(\varepsilon', \varepsilon) d\varepsilon' \times \\ &\times \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p', \mu, t) d\mu \mathbf{e} \approx \frac{N_0 v_k^2 p_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2})}{\gamma_k^2-1} \times \\ &\times \int_{2\varepsilon_k}^{\infty} \frac{(\gamma'^2-1) \sigma_{ion}(\varepsilon', \varepsilon_k) \mu_0(\varepsilon', \varepsilon_k)}{p'^2} 2\pi v' p'^2 dp' \times \\ &\times \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p', \mu, t) d\mu \mathbf{e}. \quad (18) \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\mathbf{j}_i \equiv 2\pi \int_{p_{i-1/2}}^{p_{i+1/2}} vp^2 dp \int_{-1}^1 \mu f(\mathbf{r}, p, \mu, t) d\mu \mathbf{e},$$

окончательно имеем

$$\mathbf{S}_{ion,k}^j \approx N_0 v_k^2 (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \times \sum_{i=i_k}^N \sigma_{ion}(\varepsilon_i, \varepsilon_k) \mu_0(\varepsilon_i, \varepsilon_k) \mathbf{j}_i. \quad (19)$$

Выпишем теперь полную систему ГУ для двух первых моментов релятивистской ФРЭ — баланса концентрации и плотности потока электронов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_k}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_k) &= \frac{\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2})}{p_k - p_{k-1}} n_{k-1/2} - \\ &- \frac{\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2})}{p_{k+1} - p_k} n_{k+1/2} + \\ &+ \sum_{i=i_k}^N s_{ik} v_i n_i, \\ \frac{\partial \mathbf{j}_k}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{u}_k) \mathbf{j}_k &= \\ &= \frac{\langle \mu \rangle_{k-1/2} q_e E - F_D(p_{k-1/2})}{p_k - p_{k-1}} \mathbf{j}_{k-1/2} - \\ &- \frac{\langle \mu \rangle_{k+1/2} q_e E - F_D(p_{k+1/2})}{p_{k+1} - p_k} \mathbf{j}_{k+1/2} + \\ &+ \left[\frac{\langle \mu \rangle_k q_e E - F_D(p_k)}{\gamma_k^2} - \left(\langle \mu \rangle_k q_e E + \frac{(Z+4)F_D(p_k)}{4\gamma_k} \right) \right] \times \\ &\times \frac{\mathbf{j}_k}{p_k} - \frac{v_k n_k}{p_k} q_e \mathbf{E} + \sum_{i=i_k}^N s_{ik} \mu_0(\varepsilon_i, \varepsilon_k) v_k \mathbf{j}_i, \quad (20) \end{aligned}$$

где

$$s_{ik} = N_0 v_k (p_{k+1/2} - p_{k-1/2}) \sigma_{ion}(\varepsilon_i, \varepsilon_k).$$

Следует отметить главный недостаток данной системы ГУ. В исходном кинетическом уравнении (3) полагалось, что ФРЭ не зависит от азимутального угла φ в пространстве импульсов, поэтому система (20) не описывает диффузию электронов в направлении, ортогональном вектору напряженности поля. В дальнейших расчетах для зависимости от импульса энергетических потерь электрона F_D используется формула Бете [19], а для дифференциального сечения ионизации σ_{ion} — формула Мёллера [19].

При решении системы уравнений (20) необходимо также вычислять величины $n_{k-1/2}$ и $n_{k+1/2}$, для этого используется следующая процедура:

$$\begin{aligned} n_{k+1/2} &= \\ &= \begin{cases} n_k, & [\langle \mu \rangle_{k+1/2} eE - F_D(p_{k+1/2})] > 0, \\ n_{k+1}, & [\langle \mu \rangle_{k+1/2} eE - F_D(p_{k+1/2})] < 0. \end{cases} \quad (21) \end{aligned}$$

Аналогично рассчитываются $\mathbf{j}_{k-1/2}$ и $\mathbf{j}_{k+1/2}$. Величина $\langle \mu \rangle_{k+1/2}$ вычисляется путем линейной интерполяции значений $\langle \mu \rangle_k$ и $\langle \mu \rangle_{k+1}$.

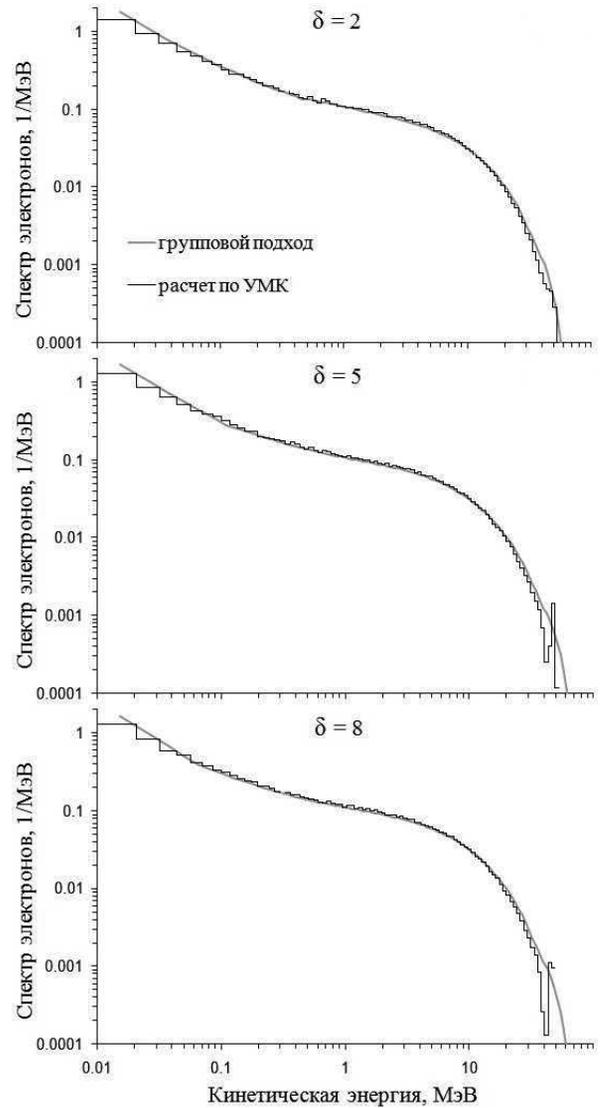


Рис. 1. Нормированное на единицу энергетическое распределение электронов для $\delta = 2, 5, 8$ в момент времени $t = 849$ нс, 167 нс, 88 нс соответственно. Результаты решения системы ГУ и расчет по УМК

3. СРАВНЕНИЕ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ГРУППОВЫХ УРАВНЕНИЙ С РЕЗУЛЬТАТАМИ РАСЧЕТОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Для того чтобы продемонстрировать точность предложенного метода ГУ, был выполнен расчет развития ЛРУЭ в однородном электрическом поле с напряженностью $E = F_{min} \delta$, где δ — параметр перенапряжения величины напряженности поля относительно минимума силы Бете F_{min} . Система уравнений (20) решалась численно в диапазоне энергий от 10 кэВ до 100 МэВ. Данный энергетический диа-

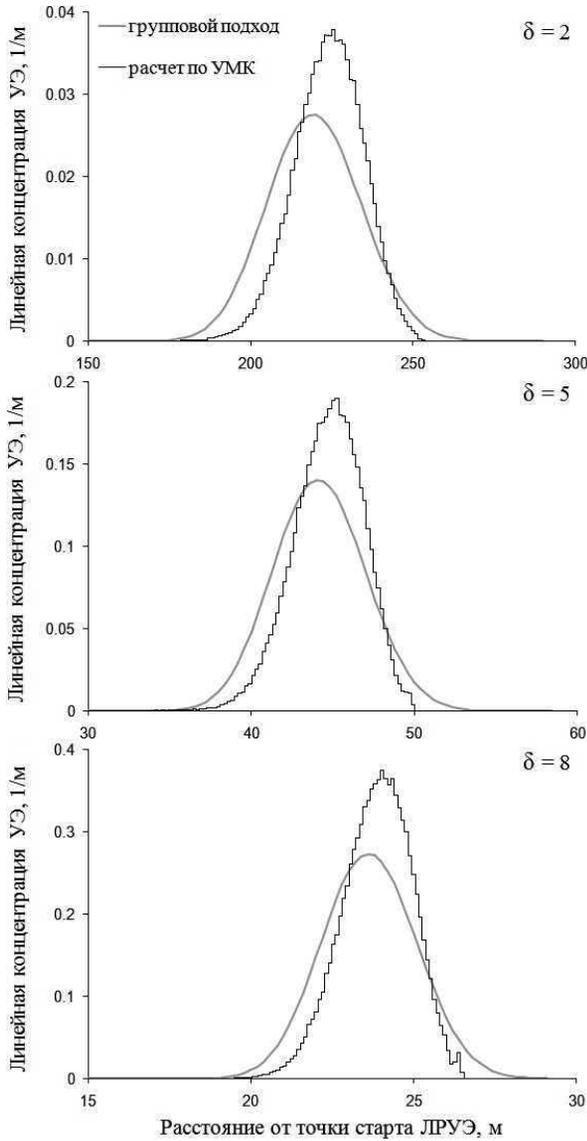


Рис. 2. Нормированное на единицу распределение электронов вдоль оси симметрии лавины для $\delta = 2, 5, 8$. Результаты решения системы ГУ и расчет по УМК

пазон был разбит на $N_\epsilon = 100$ интервалов, границы которых определялись по формуле

$$\epsilon_j = \epsilon_{min} \left(\frac{q^{j-1} - 1}{q - 1} \right),$$

где $j = 1 - N_\epsilon$, и q есть решение уравнения

$$\frac{q^{N_\epsilon - 1} - 1}{q - 1} = \frac{\epsilon_{max}}{\epsilon_{min}}.$$

Расчеты выполнены для воздуха ($Z = 14.5$, $F_{min} \approx 2.18$ кВ/см) при нормальных условиях ($N_0 = 2.69 \cdot 10^{25}$ м⁻³). Постановка задачи была следующей: в начальный момент времени задавалось дель-

тообразное распределение электронов в пространстве и гауссово по энергии со средней энергией 7 МэВ и шириной распределения 0.1 МэВ. Данная постановка задачи близка к принятой в численном моделировании ЛРУЭ методом МК [18, 20], что позволяет выполнять прямое сравнение результатов.

В таблице приведены рассчитанные методом ГУ характеристики ЛРУЭ: время усиления t_{re} , т. е. время, за которое число электронов увеличивается в e раз; средняя энергия $\langle \epsilon_{re} \rangle$ и направленная скорость электронов u_{re} . Для сравнения в таблице указаны и значения, рассчитанные по МК-программе ЭЛИЗА, отличающейся детальным описанием процессов взаимодействия электронов, гамма-квантов и позитронов с молекулами воздуха [18, 21], а также по упрощенной МК-программе (УМК), аналогичной описанной в [20]. Также для величины t_{re} в таблице приведены значения, полученные путем численного решения КУ [20]. Как можно видеть, значения t_{re} , вычисленные методом ГУ, наиболее близки именно к результатам решения КУ (отличия не превышают 8%), что естественно, поскольку система ГУ непосредственно выведена из КУ. Значения средней энергии электронов в лавине, полученные методом ГУ, не более чем на 10% отличаются от значений, вычисленных по УМК-модели. Значения же направленной скорости u_{re} , полученные разными методами, очень близки между собой, здесь отличия не превышают 2%.

На рис. 1 представлены нормированные на единицу энергетические распределения электронов, вычисленные методом ГУ и методом УМК, для $\delta = 2, 5$ и 8 в момент времени $t = 5t_{re}$, когда достигается равновесие электронов с полем. В целом наблюдается хорошее согласие распределений, полученных по обоим методикам. На рис. 2 показана линейная концентрация электронов вдоль оси симметрии лавины в те же самые моменты времени. В целом наблюдается нормальное согласие, хотя можно видеть, что распределение, полученное методом УМК, не совсем симметрично относительно максимума распределения, и сам максимум слегка опережает максимум распределения, рассчитанного методом ГУ.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из кинетического уравнения для релятивистских электронов, выполнен вывод групповых уравнений для плотности потока электронов. Совместно с уравнениями баланса концентрации электронов, полученными ранее, мы имеем замкнутую систему ГУ, позволяющих моделировать кинетику электронов высоких энергий. Особенностью полу-

Таблица. Время усиления t_{re} , средняя энергия $\langle \varepsilon_{re} \rangle$ и направленная скорость u_{re} электронов в лавине, вычисленные разными методами для нормальных условий

δ	t_{re} , нс				$\langle \varepsilon_{re} \rangle$, МэВ			u_{re} , 10^8 м/с		
	ГУ	УМК	КУ [20]	ЭЛИЗА [17]	ГУ	УМК	ЭЛИЗА [21]	ГУ	УМК	ЭЛИЗА [21]
2	191	177	197	189.7	7.74	7.27	6.74	2.59	2.64	2.64
3	81.5	75.1	—	77.6	7.95	7.39	6.79	2.59	2.65	2.65
4	51.2	47.1	—	47.5	7.97	7.36	6.83	2.62	2.67	2.65
5	37.0	34.0	39.9	34.3	7.93	7.31	6.87	2.64	2.68	2.66
6	28.8	26.4	—	26.4	7.62	7.23	6.79	2.66	2.69	2.66
8	19.6	17.9	21.2	17.8	7.66	7.30	6.61	2.67	2.70	2.68
10	14.6	13.5	—	13.3	7.45	6.90	6.41	2.67	2.71	2.69
12	11.6	10.6	—	10.45	7.32	6.71	6.15	2.69	2.71	2.69
14	9.35	8.72	—	8.56	7.01	6.55	5.99	2.69	2.71	2.69

ченной системы является то, что в ней ионизационные члены были непосредственно выведены из ионизационного интеграла, поэтому в представленном виде метод ГУ не требует задания априорной зависимости от напряженности поля времени усиления лавины. Система предназначена для численного моделирования газовых разрядов, развивающихся с участием электронов высоких энергий, в том числе релятивистских убегающих электронов. Для демонстрации точности полученной системы ГУ для моментов ФРЭ выполнено численное моделирование развития в однородном электрическом поле в воздухе ЛРУЭ. Рассчитанные характеристики лавины, вычисленные решением системы ГУ, близки к полученным методом МК. Преимущество метода ГУ состоит в том, что он позволяет рассчитывать пространственные и энергетические распределения электронов за гораздо меньшее счетное время, чем методы МК и КУ. Недостатком метода ГУ в представленном виде является невозможность описывать поперечную относительно вектора электрической силы диффузию электронов.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. V. Gurevich, G. M. Milikh, and R. Roussel-Dupre, *Phys. Lett. A* **165**, 463 (1992).
2. J. R. Dwyer, D. M. Smith, and S. A. Cummer, *Space*

Sci. Rev., **173**, 133, DOI: 10.1007/s11214-012-9894-0 (2012).

3. Л. П. Бабич, *УФН* **189**, 1044 (2019).
4. J. R. Dwyer, *Geophys. Res. Lett.* **32**, L20808, DOI: 10.1029/2005GL023975 (2005).
5. А. В. Гуревич, К. П. Зыбин, *УФН* **171**, 1177 (2001).
6. Л. П. Бабич, Е. И. Бочков, И. М. Куцык, *ЖЭТФ* **139**, 1028 (2011).
7. L. P. Babich, E. I. Bochkov, J. R. Dwyer, and I. M. Kutsyk, *J. Geophys. Res.* **117**, A09316, DOI: 10.1029/2012JA017799 (2012).
8. J. R. Dwyer, N. Liu, and H. Rassoul, *Geophys. Res. Lett.* **40**, 4067, DOI:10.1002/grl.50742 (2013).
9. Л. П. Бабич, Е. И. Бочков, *ЖЭТФ* **151**, 823 (2017).
10. Н. Е. Tierney, R. A. Roussel-Dupre, E. M. D. Symbalisty, and W. H. Beasley, *J. Geophys. Res.* **110**, D12109, DOI:10.1029/2004JD005381 (2005).
11. Л. П. Бабич, Е. И. Бочков, И. М. Куцык, *ЖЭТФ* **144**, 205 (2013).
12. В. Е. Голант, А. П. Жилинский, И. Е. Сахаров, *Основы физики плазмы*, Атомиздат, Москва (1977).
13. Л. П. Бабич, А. Ю. Кудрявцев, М. Л. Кудрявцева, И. М. Куцык, *Геомагнетизм и аэронавтика* **48**, 381 (2008).

14. Л. П. Бабич, М. Л. Кудрявцева, ЖЭТФ **131**, 808 (2007).
15. Л. П. Бабич, Е. И. Бочков, ЖЭТФ **139**, 568 (2011).
16. Е. И. Бочков, Физика плазмы **48**, 463 (2022).
17. Л. П. Бабич, ЖЭТФ **125**, 808 (2004).
18. Л. П. Бабич, Е. Н. Донской, Р. И. Илькаев, И. М. Куцык, Р. А. Рюссель-Дюпре, Физика плазмы **30**, 666 (2004).
19. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика. Теоретическая физика*, т. IV, Наука, Москва (1969).
20. L. P. Vabich et al., IEEE Trans. Plasma Sci. **29**, 430 (2001).
21. Л. П. Бабич, УФН **190**, 1261 (2019).

ХАОТИЧЕСКИЕ ТРАЕКТОРИИ НА ПОВЕРХНОСТЯХ ФЕРМИ И НЕТРИВИАЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ ПОВЕДЕНИЯ МАГНИТНОЙ ПРОВОДИМОСТИ

И. А. Дынников^a, А. Я. Мальцев^{b*}, С. П. Новиков^{a,b}

^a Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черногоровка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 17 апреля 2022 г.,
после переработки 17 апреля 2022 г.
Принята к публикации 18 апреля 2022 г.

Представлен обзор вопросов, связанных с недавно открытыми типами незамкнутых электронных траекторий на сложных поверхностях Ферми, соответствующих хаотической динамике в пространстве квазиимпульсов. Траектории такого типа найдены теоретически и в настоящее время достаточно хорошо изучены с теоретической точки зрения, однако, их экспериментальное обнаружение пока еще является задачей для будущих исследований. Здесь обсуждаются геометрические свойства таких траекторий, вероятность их появления на реальных поверхностях Ферми и поведение магнитопроводимости в пределе $\omega_{BT} \rightarrow \infty$ при их возникновении. В обзор включены результаты самых последних исследований хаотических траекторий для дисперсионных соотношений самого общего вида.

EDN: ENVOSH

DOI: 10.31857/S0044451022080120

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	276	3. Геометрические свойства хаотических траекторий и поведение проводимости в сильных магнитных полях	286
2. Типы хаотических траекторий и соответствующие им особенности угловой диаграммы	280	4. Заключение	290
		Литература	291

1. ВВЕДЕНИЕ

Наша работа относится к области теории проводимости нормальных металлов, берущей свое начало от работ И. М. Лифшица, М. Я. Азбеля, М. И. Каганова и В. Г. Песчанского, опубликованных в конце 1950-х–начале 1960-х гг. (см. [1–3]). Она интенсивно развивалась в школе И. М. Лифшица и в последую-

ющие годы (см., например, [4, 5]). А именно, мы обсуждаем вопросы, связанные с влиянием геометрии квазиклассических электронных траекторий, лежащих на сложных поверхностях Ферми, на поведение проводимости металлов в сильных магнитных полях.

Как хорошо известно, движение электронов на поверхности Ферми в присутствии внешнего магнитного поля может быть описано адиабатически и задается квазиклассической системой

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}_{\text{gr}}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] = \frac{e}{c} [\nabla \epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] \quad (1.1)$$

в \mathbf{p} -пространстве.

* E-mail: maltsev@itp.ac.ru

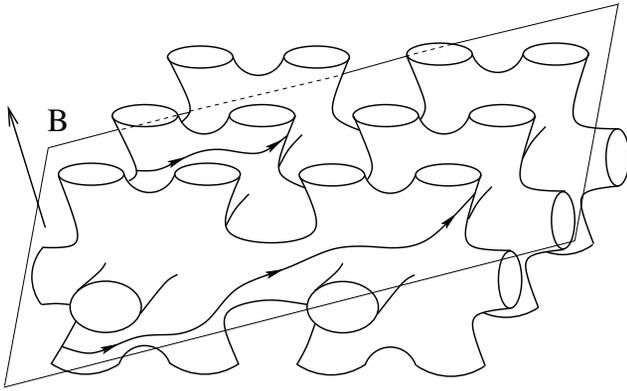


Рис. 1. Траектории системы (1.1) в пространстве \mathbb{R}^3 на некотором уровне энергии $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ (схематически)

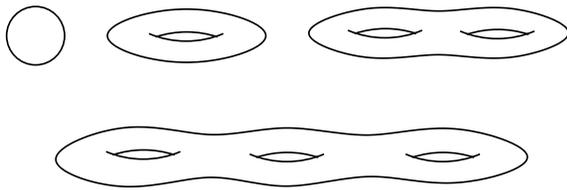


Рис. 2. Абстрактные поверхности рода 0, 1, 2, 3

Важную роль играет тот факт, что значение \mathbf{p} , т. е. квазиимпульс электрона, определяется с точностью до векторов обратной решетки L^* (где L — кристаллическая решетка металла). Таким образом, систему (1.1) можно рассматривать как систему на трехмерном торе

$$\mathbb{T}^3 = \mathbb{R}^3 / L^*,$$

или как систему в трехмерном пространстве с некоторой гладкой 3-периодической функцией $\epsilon(\mathbf{p})$. В последнем случае мы должны помнить, что точки пространства \mathbb{R}^3 , отличающиеся на векторы обратной решетки, фактически представляют одно и то же физическое состояние.

В пространстве \mathbb{R}^3 траектории системы (1.1) задаются пересечениями плоскостей, ортогональных \mathbf{B} , с периодическими поверхностями постоянной энергии $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$. Геометрия таких пересечений может быть достаточно сложной для периодических функций $\epsilon(\mathbf{p})$ общего вида (рис. 1). При описании гальваномагнитных явлений в металлах основную роль играют траектории системы (1.1) на поверхности Ферми $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$.

Каждое из представлений поверхности Ферми дает важную информацию о ней. Так, представле-

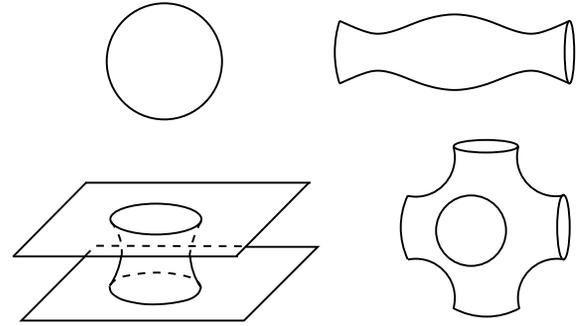


Рис. 3. Примеры поверхностей Ферми ранга 0, 1, 2 и 3

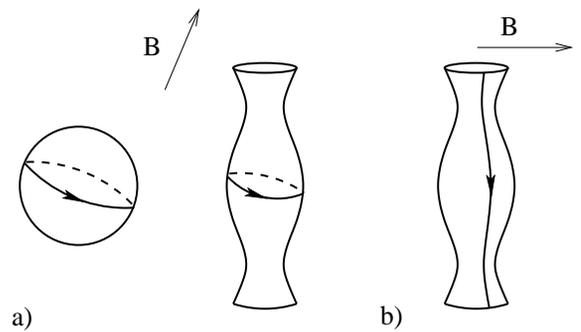


Рис. 4. Замкнутые (а) и открытая периодическая (б) траектории системы (1.1) на поверхностях Ферми различной формы

ние поверхности Ферми в виде компактной двумерной поверхности, вложенной в трехмерный тор, позволяет определить такую важную характеристику, как ее род. А именно, каждая замкнутая ориентируемая поверхность диффеоморфна двумерной сфере с g -прикрепленными ручками, где g — род поверхности (рис. 2).

С другой стороны, форма поверхности Ферми в накрывающем трехмерном пространстве обнаруживает важные особенности топологического вложения этой поверхности в трехмерный тор \mathbb{T}^3 . В частности, это представление определяет такую важную характеристику вложения, как ранг поверхности Ферми. По определению, ранг поверхности Ферми может принимать значения 0, 1, 2, 3 и определяет число независимых направлений, вдоль которых простирается поверхность Ферми в накрывающем трехмерном пространстве (рис. 3). По топологическим причинам ранг поверхности Ферми не может превышать ее род g .

Наиболее важным при описании гальваномагнитных явлений в металлах является различие меж-

ду замкнутыми и открытыми (незамкнутыми в \mathbf{p} -пространстве) траекториями системы (1.1). В работе [1] было показано принципиальное различие вкладов замкнутых и открытых периодических траекторий (рис. 4) в проводимость в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$. Формулы для тензора проводимости, полученные в [1] для чистых монокристаллических образцов при достаточно низких температурах, можно записать в главном порядке в следующем виде:

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} & * \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

(для замкнутых траекторий, $\omega_B \tau \rightarrow \infty$),

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & * & * \\ (\omega_B\tau)^{-1} & * & * \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

(для открытых периодических траекторий, $\omega_B \tau \rightarrow \infty$).

Формулы (1.2), (1.3) описывают только асимптотическое поведение тензора проводимости в сильных магнитных полях. Это означает, что каждый матричный элемент определен в действительности с точностью до множителя порядка единицы. Величина n обозначает концентрацию электронов в металле, а величина m^* определяет значение эффективной массы электрона в кристалле. Величина τ представляет собой время свободного пробега электрона, а величина $\omega_B = eB/m^*c$ имеет смысл циклотронной частоты в металле. Отметим, что циклотронная частота фактически определена только для замкнутых траекторий системы (1.1) и совпадает с ω_B только по порядку величины. В обоих случаях мы предполагаем, что ось z направлена вдоль магнитного поля, а во втором случае ось x совпадает со средним направлением периодических траекторий в \mathbf{p} -пространстве. Символы «*» в обеих формулах обозначают некоторые константы порядка единицы.

Видно, что основное отличие замкнутых траекторий от периодических проявляется в проводимости в плоскости, ортогональной \mathbf{V} . А именно, вклад замкнутых траекторий в проводимость довольно быстро убывает во всех направлениях в этой плоскости с ростом значения B , тогда как вклад периодических траекторий имеет сильную анизотропию в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$. Направление, в котором

происходит наибольшее подавление проводимости в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , во втором случае совпадает со средним направлением открытых траекторий в \mathbf{p} -пространстве. Последнее обстоятельство обусловлено известной связью между траекториями электронов в координатном и (квази)импульсном пространствах при наличии магнитного поля. А именно, проекции траекторий в \mathbf{x} -пространстве на плоскость, ортогональную \mathbf{V} , подобны соответствующим траекториям в \mathbf{p} -пространстве, повернутым на 90° . Описанные особенности проводимости позволяют различать вклады замкнутых и открытых периодических траекторий, а также экспериментально определять направление периодических траекторий в \mathbf{p} -пространстве.

Более детальное изучение системы (1.1) привело также к открытию других важных примеров незамкнутых электронных траекторий в \mathbf{p} -пространстве, более общих, чем периодические (см. [2–5]). Открытые в этот период незамкнутые траектории системы (1.1) также имели сильную анизотропию (среднее направление) в плоскостях, ортогональных \mathbf{V} , и, как следствие, также вносили сильно анизотропный вклад (1.3) в проводимость в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$ (в главном порядке).

Отметим, что изучение геометрии траекторий системы (1.1) является одним из важнейших методов изучения дисперсионных соотношений для широкого круга проводников (см., например, [4–8]). Заметим также, что появление незамкнутых орбит на достаточно сложных поверхностях Ферми играет важную роль и в магнитной проводимости поликристаллов при достаточно низких температурах (см. [9, 10]).

Проблема полной классификации траекторий системы (1.1) для произвольного закона дисперсии впервые была поставлена Новиковым в работе [11]. Эта проблема исследовалась в последующие десятилетия в его топологической школе (см. [12–18]), и к настоящему времени получена качественная классификация траекторий (1.1), которые могут возникать на произвольно сложных периодических поверхностях. В этой классификации все замкнутые траектории (в накрывающем \mathbf{p} -пространстве) рассматриваются как однотипные, поэтому только открытые траектории (1.1), глобальные геометрические свойства которых могут сильно различаться, подлежат классификации.

Наиболее важным в классификации открытых траекторий (1.1) является описание устойчивых открытых траекторий этой системы. Здесь мы называем устойчивыми такие открытые траектории сис-

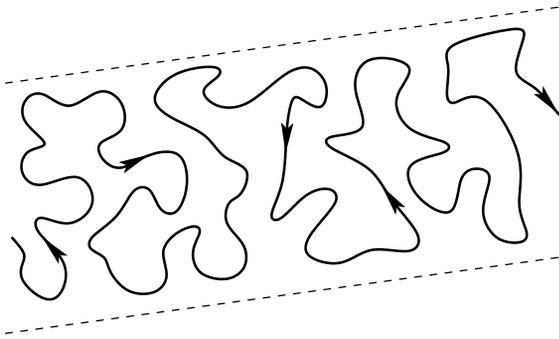


Рис. 5. Устойчивая открытая траектория в плоскости, ортогональной \mathbf{V} (схематично)

темы (1.1), которые не исчезают и существенно не меняют свою форму при малых изменениях параметров задачи (к которым относятся направление \mathbf{V} и дисперсионное соотношение $\epsilon(\mathbf{p})$). Как следует из работ [12, 14, 15], такие траектории всегда обладают следующими двумя важными свойствами:

1) каждая устойчивая открытая траектория системы (1.1) лежит в прямой полосе конечной ширины в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , и проходит через нее насквозь (рис. 5);

2) все устойчивые открытые траектории имеют при фиксированном направлении \mathbf{V} и фиксированном законе дисперсии одно и то же среднее направление, которое задается пересечением плоскости, ортогональной \mathbf{V} , с некоторой целочисленной плоскостью Γ , остающейся неизменной при малых изменениях любых параметров задачи.

Целочисленность плоскости Γ в утверждении 2) означает, что она порождается двумя неколлинеарными векторами из обратной решетки в \mathbf{p} -пространстве. Эквивалентно, плоскость Γ ортогональна некоторому ненулевому вектору прямой решетки. Таким образом, среднее направление устойчивых открытых траекторий в \mathbf{p} -пространстве всегда ортогонально некоторому кристаллографическому вектору

$$\mathbf{m} = m^1 \mathbf{e}_1 + m^2 \mathbf{e}_2 + m^3 \mathbf{e}_3,$$

где $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ — некоторый фиксированный базис прямой решетки L и m^1, m^2, m^3 — некоторые целые числа. Можно видеть также, что указанные выше свойства определяют среднее направление \mathbf{l} устойчивых открытых траекторий в \mathbf{p} -пространстве согласно формуле

$$\mathbf{l} \sim [\mathbf{V} \times \mathbf{m}].$$

Свойство 1) открытых траекторий системы (1.1) общего положения было впервые сформулировано Новиковым в виде гипотезы [11].

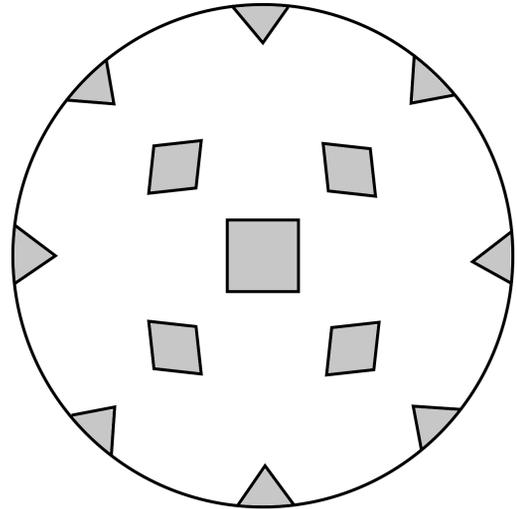


Рис. 6. Зоны устойчивости на единичной сфере (схематично)

Вклад устойчивых открытых траекторий в проводимость в пределе $\omega_{BT} \rightarrow \infty$ также определяется формулой (1.3) при соответствующем выборе системы координат. Как и прежде, направление максимального подавления проводимости в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , совпадает со средним направлением устойчивых открытых траекторий в \mathbf{p} -пространстве (ортогональным проекции среднего направления траекторий в \mathbf{x} -пространстве на плоскость, ортогональную \mathbf{V}).

Величины (m^1, m^2, m^3) имеют топологическую природу и, как сказано выше, устойчивы при малых вариациях параметров задачи. В частности, они локально устойчивы по отношению к малым поворотам направления \mathbf{V} при фиксированном дисперсионном соотношении $\epsilon(\mathbf{p})$ и энергии Ферми ϵ_F . Как следствие, на угловой диаграмме (единичной сфере), параметризующей направления \mathbf{V} , возникает семейство зон устойчивости Ω_α , в каждой из которых тройка $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$ определена и постоянна. Из-за особого вклада в проводимость устойчивых открытых траекторий как форму зон устойчивости, так и числа $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$ можно наблюдать экспериментально. Именно таким образом числа $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$ были введены в работе [19] (см. также [20]) как топологические числа, наблюдаемые в проводимости нормальных металлов. Зоны устойчивости, как правило, представляют собой области с кусочно-гладкими границами на единичной сфере (рис. 6). Отметим, что топологические числа определяют только геометрические свойства тензора проводимости, тогда как его аналитические свойства в

пределе $\omega_{BT} \rightarrow \infty$ внутри и вблизи зон устойчивости могут быть весьма нетривиальными (см., например, [21, 22]).

Что касается неустойчивых открытых траекторий системы (1.1), то одним из важнейших примеров таких траекторий являются периодические траектории на поверхностях Ферми ранга 1 (рис. 4). Однако на достаточно сложных поверхностях Ферми могут существовать и значительно более сложные неустойчивые открытые траектории, существование которых было обнаружено при изучении общей проблемы Новикова в последние десятилетия [13, 16, 17]. Эти траектории обладают значительно более сложными геометрическими свойствами и неустойчивы относительно любых малых поворотов направления \mathbf{B} (а также сколь угодно малых вариаций значения ϵ_F). Геометрическая сложность таких траекторий приводит к более сложному поведению тензора проводимости в пределе $\omega_{BT} \rightarrow \infty$ при наличии таких траекторий на поверхности Ферми. Как мы увидим, все такие траектории можно разделить на два основных типа (типы Царева и Дынникова), которые имеют существенно разные геометрические свойства и вносят весьма разный вклад в проводимость при $\omega_{BT} \rightarrow \infty$.

С момента своего открытия неустойчивые «хаотические» траектории системы (1.1) активно изучались с различных точек зрения. Наиболее значимые результаты, связанные с предметом, приведены в работах [13, 16, 17, 23–46]. Это далеко не полный список работ по теме, и в ближайшее время их ожидается больше. В данной работе мы делаем обзор состояния этой области исследований на данный момент, обращая внимание как на геометрические аспекты возникновения и поведения открытых траекторий, так и на физические следствия, вытекающие из их геометрических свойств.

2. ТИПЫ ХАОТИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ И СООТВЕТСТВУЮЩИЕ ИМ ОСОБЕННОСТИ УГЛОВОЙ ДИАГРАММЫ

Опишем здесь сначала более простые с геометрической точки зрения хаотические траектории типа Царева. Хаотические траектории Царева могут возникать только тогда, когда направление магнитного поля лишь частично иррационально, а именно, плоскость, ортогональная \mathbf{B} , содержит ненулевой вектор обратной решетки. Для описания основных особенностей хаотических траекторий Царева можно использовать следующий пример.

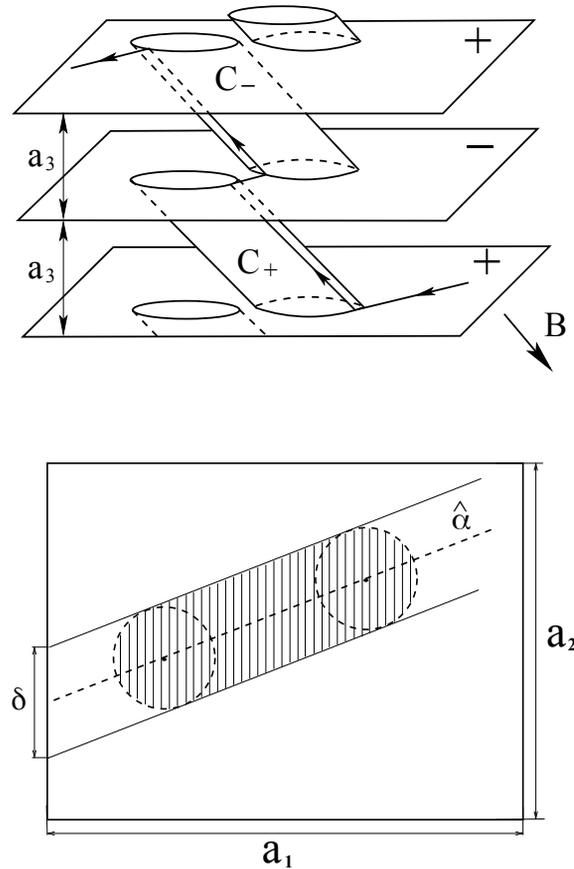


Рис. 7. Форма поверхности Ферми, несущей траекторию царевского типа, и ее вертикальная проекция (для одной зоны Бриллюэна, заштрихованная область соответствует перескоку между плоскостями)

Рассмотрим периодическое семейство $\{P_i\}$ горизонтальных плоскостей в трехмерном пространстве с одинаковым расстоянием a_3 между соседними плоскостями. Пронумеруем их последовательно, так что $P_{i+1} = P_i + \mathbf{a}_3$. Выберем также два (ортогональных) периода $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ в горизонтальной плоскости и соединим все пары соседних плоскостей 3-периодическим семейством одинаковых «наклонных» цилиндров, как показано на рис. 7. Основания цилиндров выровнены так, что прямая, проходящая через центры верхнего основания цилиндра C и нижнего основания цилиндра $C + \mathbf{a}_3$, имеет иррациональное направление $\hat{\alpha}$ в горизонтальной плоскости. Полученная поверхность снабжена ориентацией и как ориентированная поверхность инвариантна относительно сдвигов на $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ и $2\mathbf{a}_3$. Мы сглаживаем эту поверхность 3-периодическим образом, что приводит к поверхности вида $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$ для гладкой 3-периодической функции ϵ и уровня ϵ_F .

Пусть теперь направление \mathbf{V} лежит в горизонтальной плоскости и ортогонально направлению $\hat{\alpha}$. Рассмотрим траектории системы (1.1), соответствующие такому направлению \mathbf{V} . Эти траектории следуют прямым линиям направления $\hat{\alpha}$ до тех пор, пока не наткнутся на один из цилиндров, и в этом случае они перепрыгивают с Π_i на Π_{i+2} или Π_{i-2} в зависимости от четности i , далее по другой прямой с направлением $\hat{\alpha}$ до следующего прыжка и т. д. Скачки происходят с четко определенной частотой, поэтому траектории имеют асимптотическое направление в накрывающем \mathbf{p} -пространстве в обычном смысле. Однако легко может случиться, что такая траектория не содержится ни в какой прямой плоской полосе конечной ширины.

Описанный пример представляет довольно общее явление. В некотором смысле, для частично иррациональных направлений \mathbf{V} хаотические траектории системы (1.1) всегда имеют описанные свойства. В частности, как показано в [17], в этом случае они всегда имеют асимптотическое направление. Это свойство позволяет также дать качественное описание вклада таких траекторий в проводимость в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$. Этот вклад также имеет сильно анизотропную форму в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , что выявляет асимптотические направления таких траекторий в \mathbf{p} -пространстве.

Формула (1.3), вообще говоря, уже неприменима в случае общих траекторий этого типа; однако для вклада таких траекторий в общий тензор проводимости справедливо следующее:

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} o(1) & o(1) & o(1) \\ o(1) & * & * \\ o(1) & * & * \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

$\omega_B \tau \rightarrow \infty.$

Здесь, как и в формуле (1.3), мы также предполагаем, что ось z направлена вдоль \mathbf{V} , а ось x направлена вдоль асимптотического направления открытых траекторий в \mathbf{p} -пространстве.

Более точные аналитические свойства тензора проводимости в этом случае, однако, сложнее, чем в случае устойчивых открытых траекторий (1.1).

С точки зрения компактной версии поверхности Ферми, вложенной в трехмерный тор \mathbb{T}^3 , поведение хаотических траекторий типа Царева весьма специфично. Каждая такая траектория всюду плотно заполняет половину всей поверхности (при условии, что последняя имеет род 3, как в примере выше), отделенной от другой половины сепаратрисными циклами, не гомологичными нулю в \mathbb{T}^3 .

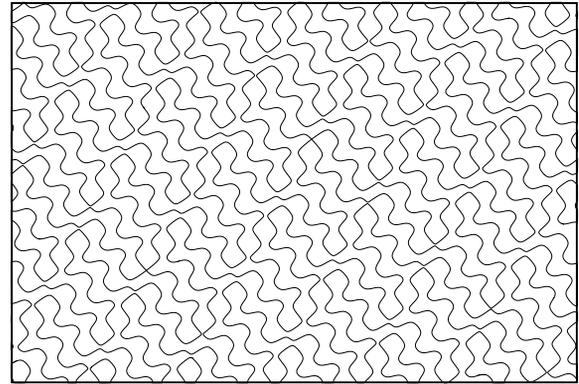


Рис. 8. Хаотическая траектория Дынникова, возникающая на поверхности $\cos p_x + \cos p_y + \cos p_z = 0$.

Более сложные хаотические траектории системы (1.1) можно наблюдать, когда направление \mathbf{V} имеет максимальную степень иррациональности, т. е. когда плоскость, ортогональная \mathbf{V} , не содержит векторов обратной решетки. Первые примеры таких траекторий были построены Дынниковым в работах [16, 17]. Хаотические траектории типа Дынникова имеют гораздо более сложную геометрию в \mathbf{p} -пространстве, так что соответствующая динамика чем-то напоминает диффузию в плоскостях, ортогональных \mathbf{V} (рис. 8). Как и траектории Царева, траектории Дынникова могут возникать только на поверхностях Ферми ранга 3, и они также неустойчивы по отношению к любым сколь угодно малым отклонениям направления \mathbf{V} и изменениям величины ϵ_F .

Для объяснения возникновения траекторий типа Дынникова полезно рассмотреть угловую диаграмму, связанную с произвольным дисперсионным соотношением $\epsilon(\mathbf{p})$. Под угловой диаграммой мы понимаем сферическую карту, на которой для каждой точки, рассматриваемой как направление \mathbf{V} , мы указываем тип динамики, определяемый соответствующими системами (1.1) согласно нашей классификации. Возможность использовать эту диаграмму исходит из следующих важных фактов о системе (1.1).

Рассмотрим произвольную гладкую 3-периодическую функцию $\epsilon(\mathbf{p})$, принимающую значения в некотором интервале $[\epsilon_{min}, \epsilon_{max}]$. Зафиксируем некоторое направление \mathbf{V} и рассмотрим соответствующую систему (1.1). Для простоты будем считать, что направление \mathbf{V} не является рациональным. Тогда верно следующее.

1) Открытые траектории системы (1.1) присутствуют либо в замкнутом интервале энергий

$$\epsilon_{min} < \epsilon_1(\mathbf{V}) \leq \epsilon(\mathbf{p}) \leq \epsilon_2(\mathbf{V}) < \epsilon_{max}$$

либо на одном энергетическом уровне $\epsilon_0 = \epsilon_1(\mathbf{V}) = \epsilon_2(\mathbf{V})$.

2) В случае $\epsilon_1(\mathbf{V}) < \epsilon_2(\mathbf{V})$ все открытые траектории в интервале $[\epsilon_1(\mathbf{V}), \epsilon_2(\mathbf{V})]$ лежат в прямых полосах конечной ширины в плоскостях, ортогональных \mathbf{V} , и имеют (на всех уровнях энергии) одно и то же среднее направление, задаваемое пересечением плоскости, ортогональной \mathbf{V} , и некоторой целочисленной плоскости Γ в \mathbf{p} -пространстве. Величины $\epsilon_1(\mathbf{V})$ и $\epsilon_2(\mathbf{V})$ для направлений \mathbf{V} общего положения совпадают со значениями некоторых непрерывных функций $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{V})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{V})$, определенных всюду на \mathbb{S}^2 . Однако для направлений \mathbf{V} , соответствующих возникновению периодических открытых траекторий, значения $\epsilon_1(\mathbf{V})$ и $\epsilon_2(\mathbf{V})$ имеют «скачки», при этом всегда

$$\epsilon_1(\mathbf{V}) \leq \tilde{\epsilon}_1(\mathbf{V}) \leq \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{V}) \leq \epsilon_2(\mathbf{V}).$$

3) Свойство $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{V}) < \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{V})$, так же как и целочисленная плоскость Γ , локально устойчивы относительно малых поворотов \mathbf{V} , поэтому каждая из плоскостей Γ_α определяет некоторую зону устойчивости $\hat{\Omega}_\alpha$ в пространстве направлений \mathbf{V} .

4) Если открытые траектории возникают только на одном энергетическом уровне, то возможны два случая: все они лежат в прямых плоских полосах конечной ширины (это происходит на границах зон $\hat{\Omega}_\alpha$) или все они хаотичны (это происходит, когда \mathbf{V} является точкой накопления бесконечного числа зон $\hat{\Omega}_\alpha$, диаметр которых стремится к нулю).

Приведенное выше свойство 2) позволяет определить зоны устойчивости для всего дисперсионного соотношения путем объединения зон устойчивости по всем $\epsilon_F \in [\epsilon_1, \epsilon_2]$. Из свойства 1) следует, что для каждого направления \mathbf{V} открытые траектории системы (1.1) присутствуют хотя бы на одном энергетическом уровне. Такие траектории называются «топологически регулярными», если направление \mathbf{V} принадлежит одной из зон устойчивости (включая границы), и хаотическими в противном случае.

Какова общая картина распределения зон устойчивости на единичной сфере? Согласно [18], могут возникнуть только две следующие ситуации.

1) Вся единичная сфера представляет собой единственную зону устойчивости $\hat{\Omega}$, соответствующую некоторой целочисленной плоскости Γ .

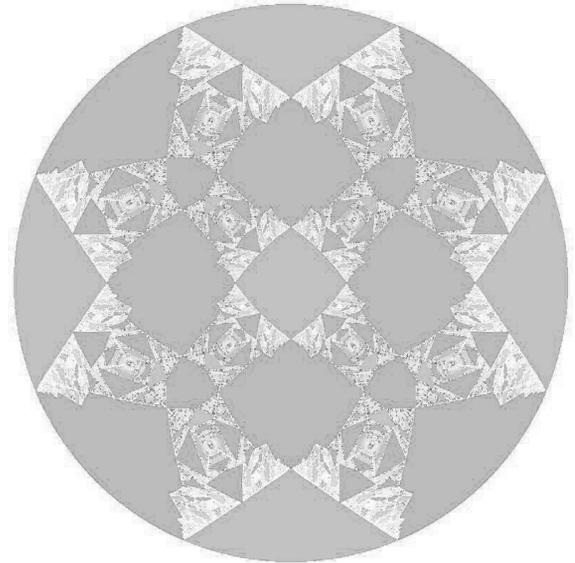


Рис. 9. Распределение зон устойчивости для дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p}) = \cos p_x \cos p_y + \cos p_y \cos p_z + \cos p_z \cos p_x$ [44]

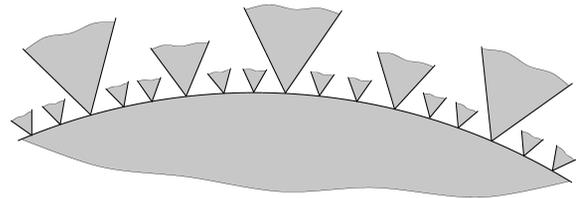


Рис. 10. Граница зоны устойчивости с прилегающими к ней меньшими зонами в точках, соответствующих появлению периодических открытых траекторий системы (1.1)

2) Угловая диаграмма содержит бесконечное число зон устойчивости, объединение которых всюду плотно в пространстве направлений \mathbf{V} (см., например, рис. 9).

Случай 1) соответствует весьма специфическим дисперсионным соотношениям (как в случае квазиодномерных проводников), и для большинства дисперсионных соотношений в реальных проводниках имеет место случай 2). В частности, ситуация 1) не может возникнуть при наличии какой-либо вращательной симметрии кристалла, действие которой на \mathbb{R}^3 неприводимо.

Картина зон устойчивости, появляющаяся на угловой диаграмме в случае 2), в действительности довольно сложна. В частности, как показано в [18], граница каждой из зон устойчивости представляет собой в этом случае множество скопления бесконечного числа других зон устойчивости, примыка-

ющих к ней во всех точках, соответствующих возникновению периодических открытых траекторий (рис. 10). Легко видеть, что такие траектории возникают в зоне $\hat{\Omega}_\alpha$ всякий раз, когда пересечение плоскости, ортогональной \mathbf{V} , и соответствующей плоскости Γ_α задает целочисленное направление в \mathbf{p} -пространстве. Соответствующие направления \mathbf{V} не являются направлениями общего положения; в то же время они образуют всюду плотное множество на границе любой из зон устойчивости в случае 2).

Дополнением к объединению зон устойчивости в случае 2) является множество фрактального типа, и это как раз множество направлений \mathbf{V} , для которых возникают хаотические открытые траектории (типа Царева или Дынникова). Согласно гипотезе Новикова [30], для дисперсионного соотношения общего положения это множество имеет нулевую меру и хаусдорфову размерность строго меньше 2. Гипотеза Новикова подтверждается серьезными численными исследованиями, но пока еще не доказана аналитически в общем виде. Совсем недавно, однако, Дынников, Юбер, Мерка и Скрипченко смогли доказать утверждение о нулевой мере для дисперсионных соотношений, обладающих центральной симметрией $\epsilon(-\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p})^1$.

В ситуации 2) множество «хаотических» направлений \mathbf{V} никогда не бывает пустым. Это означает, что для определенных направлений \mathbf{V} и значений ϵ_0 хаотические траектории обязательно должны возникать. В частности, каждая точка на границе любой из зон устойчивости $\hat{\Omega}_\alpha$ является точкой накопления таких направлений \mathbf{V} . В реальном проводнике, конечно, можно наблюдать только те хаотические траектории, которые возникают на уровне Ферми ϵ_F .

Таким образом, каждая угловая диаграмма для реального проводника (с фиксированным ϵ_F) в действительности вкладывается в угловую диаграмму для всего дисперсионного соотношения. Это означает, в частности, что при фиксированном значении ϵ_F каждая зона устойчивости Ω_α на угловой диаграмме является подобластью зоны устойчивости $\hat{\Omega}_\alpha$ на полной угловой диаграмме. При этом на угловых диаграммах для фиксированных значений ϵ_F обычно наблюдается только часть зон устойчивости, определенных для всего дисперсионного соотношения, и большая часть такой диаграммы может быть заполнена направлениями \mathbf{V} , для кото-

рых на соответствующей поверхности уровня имеются только замкнутые траектории.

Нам будет полезно теперь посмотреть на угловую диаграмму для каждого отдельного значения ϵ_F . Рассмотрим снова 3-периодическую функцию $\epsilon(\mathbf{p})$ (дисперсионное соотношение), принимающую значения в интервале $[\epsilon_{min}, \epsilon_{max}]$ и порождающую бесконечное число зон устойчивости на полной угловой диаграмме. Как указано в [47], для (реалистичных) общих дисперсионных соотношений интервал $[\epsilon_{min}, \epsilon_{max}]$ естественным образом делится на семь подынтервалов промежуточными точками

$$\epsilon_{min} < \epsilon_1^{A'} < \epsilon_1^A < \epsilon_1^B < \epsilon_2^B < \epsilon_2^A < \epsilon_2^{A'} < \epsilon_{max},$$

согласно разным уровням сложности угловых диаграмм при соответствующих значениях ϵ_F , которые заключаются в следующем.

Для ϵ_F , лежащих в интервалах $(\epsilon_{min}, \epsilon_1^{A'})$ и $(\epsilon_2^{A'}, \epsilon_{max})$, угловые диаграммы не содержат никаких зон устойчивости, а все неособые траектории на соответствующих поверхностях Ферми замкнуты.

Для значений ϵ_F , лежащих в интервалах $(\epsilon_1^{A'}, \epsilon_1^A)$ и $(\epsilon_2^A, \epsilon_2^{A'})$, открытые траектории системы (1.1) присутствуют для некоторых \mathbf{V} , но все они являются периодическими и неустойчивыми. Соответствующие угловые диаграммы также достаточно просты, так как содержат только дуги, соответствующие наличию неустойчивых периодических траекторий.

Весь интервал $(\epsilon_1^A, \epsilon_2^A)$ состоит из значений ϵ_F , для которых существуют устойчивые открытые траектории на соответствующей поверхности Ферми для некоторых направлений \mathbf{V} , а соответствующая угловая диаграмма содержит непустые зоны устойчивости Ω_α . Этот интервал подразделяется на три меньших интервала согласно разным уровням сложности соответствующих угловых диаграмм.

А именно, в интервалах $(\epsilon_1^A, \epsilon_1^B)$ и $(\epsilon_2^B, \epsilon_2^A)$ все угловые диаграммы содержат лишь конечное число зон устойчивости (диаграммы типа А), а открытые траектории на соответствующих поверхностях Ферми либо устойчивые, либо периодические. Здесь также следует отметить, что угловые диаграммы проводимости, соответствующие интервалам $(\epsilon_1^A, \epsilon_1^B)$ и $(\epsilon_2^B, \epsilon_2^A)$ на самом деле несколько отличаются друг от друга. Их различие проявляется в поведении холловской проводимости для направлений \mathbf{V} , соответствующих наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми. Так, во всех областях диаграмм, соответствующих наличию только замкнутых траекторий на поверхности Ферми, холловская

¹⁾ Заметим, что при постановке общей задачи Новикова требуется только периодичность дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$.

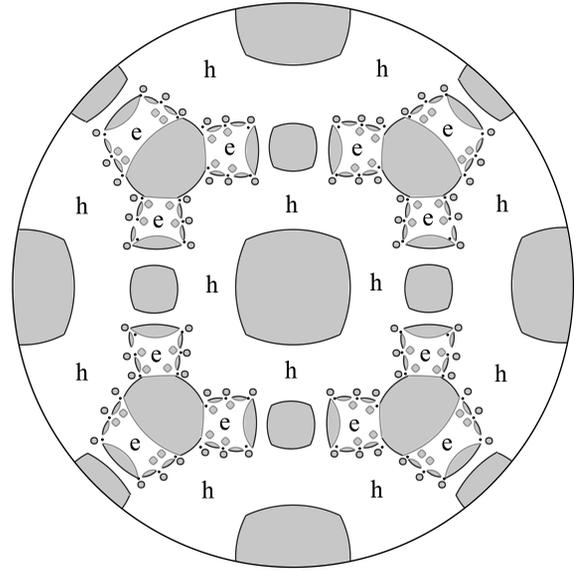
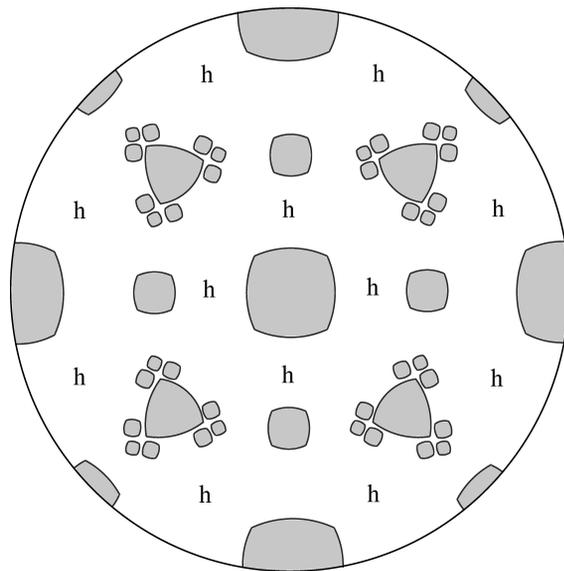
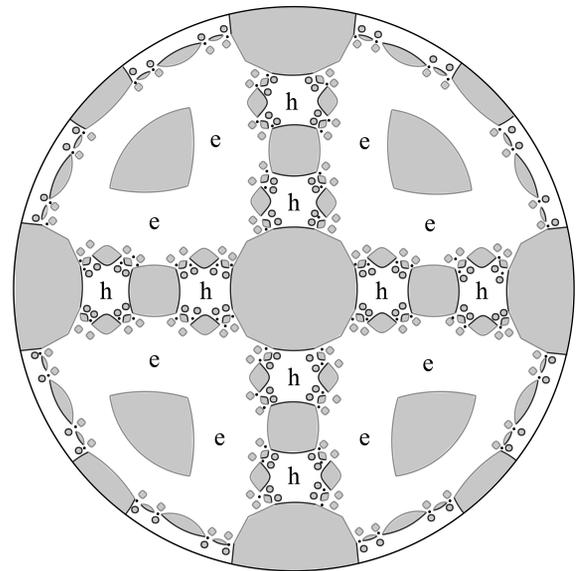
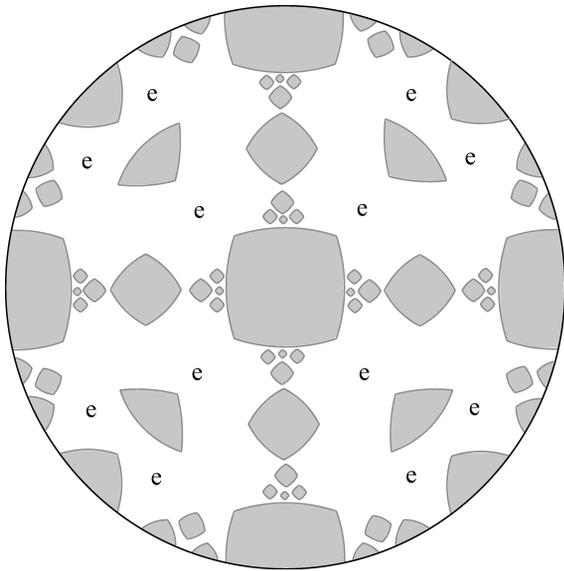


Рис. 11. Угловые диаграммы типа А (схематично). Знаки “е” и “h” показывают тип холловской проводимости в областях наличия лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми

Рис. 12. Угловые диаграммы типа В (схематично). Знаки “е” и “h” показывают тип холловской проводимости в областях наличия лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми

проводимость имеет электронный тип в интервале $(\epsilon_1^A, \epsilon_1^B)$ и дырочный тип в интервале $(\epsilon_2^B, \epsilon_2^A)^2$ (рис. 11).

В интервале $(\epsilon_1^B, \epsilon_2^B)$ в случае общего положения для любого уровня энергии соответствующая уг-

ловая диаграмма содержит бесконечное количество зон устойчивости (диаграммы типа В). Область, соответствующая отсутствию открытых траекторий на поверхности Ферми, несвязна и распадается на части, характеризующиеся либо электронной, либо дырочной холловской проводимостью (рис. 12). В интервале $[\epsilon_1^B, \epsilon_2^B]$ почти на каждом уровне энергии появляются хаотические траектории (типа Царева или Дынникова) для некоторых направлений

²⁾ Точнее, это верно для вклада в холловскую проводимость от рассматриваемой связной компоненты поверхности Ферми.

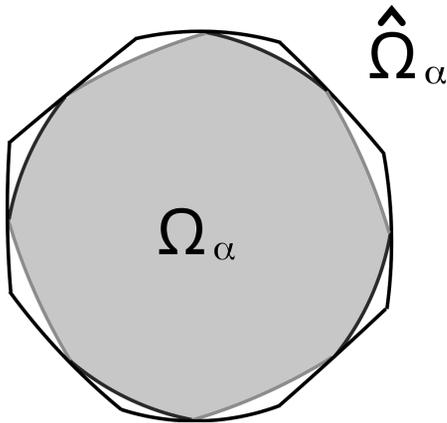


Рис. 13. Зона Ω_α (закрашена) внутри зоны $\hat{\Omega}_\alpha$ для значения ϵ_F , лежащего в интервале $[\epsilon_1^{B,\alpha}, \epsilon_2^{B,\alpha}]$ (схематически)

В. Области на угловой диаграмме, соответствующие разным типам холловской проводимости, разделены «цепочками», состоящими из бесконечного числа зон устойчивости и «хаотических» направлений **В** (в ситуации общего положения).

Как следует из [18], мера Лебега «хаотических» направлений **В** для фиксированной поверхности Ферми общего положения равна нулю. Согласно гипотезе Новикова [31, 32], верхняя хаусдорфова размерность множества хаотических направлений **В** (на \mathbb{S}^2) для фиксированной поверхности Ферми общего положения строго меньше единицы (хотя для некоторых специальных поверхностей Ферми может быть больше единицы).

В дополнение к интервалу $[\epsilon_1^B, \epsilon_2^B]$, определенному для всего дисперсионного соотношения, также может быть полезно рассмотреть интервалы $[\epsilon_1^{B,\alpha}, \epsilon_2^{B,\alpha}]$, связанные с каждой из зон $\hat{\Omega}_\alpha$. Интервал $[\epsilon_1^{B,\alpha}, \epsilon_2^{B,\alpha}]$ можно рассматривать как энергетический интервал, где хаотические траектории возникают для направлений **В**, накапливающихся вблизи границы зоны $\hat{\Omega}_\alpha$. Его можно определить следующим образом. Как мы отмечали выше, на границе каждой из зон определена непрерывная функция

$$\epsilon_0(\mathbf{V}) = \tilde{\epsilon}_1(\mathbf{V}) = \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{V}).$$

Величины $\epsilon_1^{B,\alpha}$ и $\epsilon_2^{B,\alpha}$ определяются как значения $\min \epsilon_0(\mathbf{V})$ и $\max \epsilon_0(\mathbf{V})$, взятые по границе $\hat{\Omega}_\alpha$.

Интервал $[\epsilon_1^{B,\alpha}, \epsilon_2^{B,\alpha}]$ может быть достаточно большим для «больших» зон $\hat{\Omega}_\alpha$ (при малых значениях $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$) и стремится к нулю при уменьшении зон (росте $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$).

Для значений ϵ_F , лежащих в интервале $[\epsilon_1^{B,\alpha}, \epsilon_2^{B,\alpha}]$, граница соответствующей зоны устойчивости Ω_α имеет общие точки с границей зоны

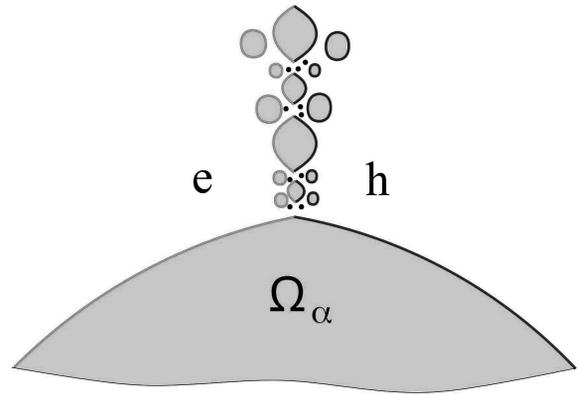


Рис. 14. Точка скопления «хаотических» направлений **В** и уменьшающиеся зоны устойчивости на границе зоны Ω_α (схематично). Указан также тип холловской проводимости в областях, где на поверхности Ферми присутствуют лишь замкнутые траектории

$\hat{\Omega}_\alpha$ (рис. 13), и именно эти граничные точки Ω_α являются точками накопления «хаотических» направлений **В** на угловых диаграммах для таких ϵ_F (рис. 14).

Как можно видеть, таким образом, наличие хаотических траекторий на поверхности Ферми должно иметь место для определенных проводящих материалов и специально выбранных направлений магнитного поля. Насколько нам известно, однако, такие траектории (как и угловые диаграммы типа **В**) пока не были обнаружены в экспериментах по магнитной проводимости в сильных магнитных полях. Одной из основных причин этого, на наш взгляд, может являться то, что в действительности интервал $[\epsilon_1^B, \epsilon_2^B]$ достаточно узок для большинства реальных дисперсионных соотношений, поэтому вероятность попадания уровня Ферми в этот интервал довольно мала. С другой стороны, большое разнообразие материалов, доступных для создания на сегодняшний день, дает надежду, что в достаточно точных экспериментах в ряде проводников такие траектории могут быть обнаружены. Напомним, что хаотические траектории Царева или Дынникова могут возникать только на поверхностях Ферми ранга 3.

В заключение данного раздела сделаем еще одно замечание. Приведенные выше формулировки относятся к общей ситуации, когда законы дисперсии и поверхности Ферми не имеют дополнительных симметрий нефизического происхождения. Однако некоторые полезные теоретические модели могут иметь такие симметрии, и в этом случае приведенные выше утверждения должны быть изменены.

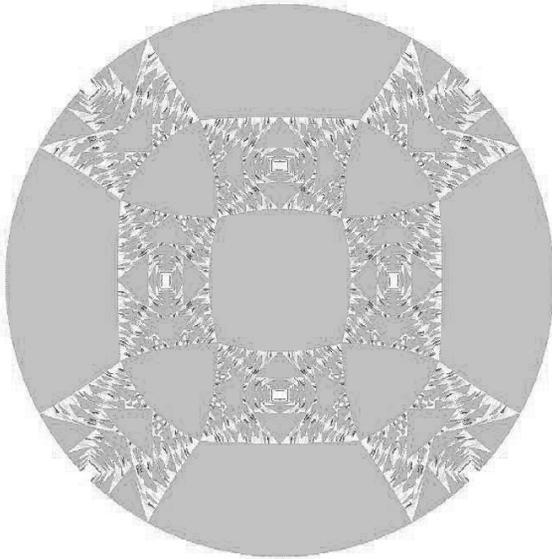


Рис. 15. Угловая диаграмма для поверхности $\cos p_x + \cos p_y + \cos p_z = 0$ [44]

Например, рассмотрим дисперсионное соотношение

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \cos p_x + \cos p_y + \cos p_z \quad (2.2)$$

и поверхность Ферми

$$\cos p_x + \cos p_y + \cos p_z = 0. \quad (2.3)$$

Легко видеть, что значение $\epsilon(\mathbf{p})$ меняется на противоположное при сдвиге на «полупериод»

$$p_x \rightarrow p_x + \pi, \quad p_y \rightarrow p_y + \pi, \quad p_z \rightarrow p_z + \pi.$$

Поэтому, любая поверхность уровня $\epsilon(\mathbf{p}) = -\epsilon$ получается из поверхности $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon$ сдвигом в \mathbf{p} -пространстве. Следовательно, любая пара противоположных уровней $\epsilon(\mathbf{p}) = -\epsilon$ и $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon$ содержит траектории одинаковой геометрии, а поверхность (2.3) должна содержать открытые траектории системы (1.1) для любого направления \mathbf{V} . То же самое можно сказать о любом дисперсионном соотношении, фурье-разложение которого содержит только нечетные гармоники.

Таким образом, в приведенном примере угловая диаграмма для поверхности Ферми (2.3) совпадает с диаграммой для всего дисперсионного соотношения (рис. 15). Хаотические траектории для дисперсионного соотношения (2.2) возникают только на нулевом уровне энергии, и введенный выше интервал $[\epsilon_1^B, \epsilon_2^B]$ схлопывается здесь в одну точку $\epsilon = 0$.

3. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХАОТИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ И ПОВЕДЕНИЕ ПРОВОДИМОСТИ В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Влияние геометрии траекторий системы (1.1) на поведение проводимости в сильных магнитных полях обусловлено, конечно, в первую очередь, связью формы траектории в координатном и импульсном пространствах. Для описания гальваномагнитных явлений в обсуждаемой ситуации удобнее всего использовать кинетическое уравнение

$$f_t + \frac{e}{c} \sum_{l=1}^3 [\nabla \epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{V}]^l \frac{\partial f}{\partial p^l} + e \sum_{l=1}^3 E^l \frac{\partial f}{\partial p^l} = I[f](\mathbf{p}, t),$$

где $I[f]$ представляет интеграл столкновений.

Как известно, электропроводность определяется линейной поправкой к равновесной функции распределения

$$f_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp[(\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon_F)/T] + 1},$$

удовлетворяющей соотношению

$$\frac{e}{c} \sum_{l=1}^3 [\nabla \epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{V}]^l \frac{\partial f_{(1)}}{\partial p^l} + e \sum_{l=1}^3 E^l \frac{\partial f_0}{\partial p^l} = [\widehat{L}_{[f_0]} \cdot f_{(1)}](\mathbf{p}), \quad (3.1)$$

где $\widehat{L}_{[f_0]}$ представляет линейризацию функционала $I[f](\mathbf{p})$ на функции f_0 .

После перехода к переменным, непосредственно связанным с системой (1.1)

$$p_z, s = teB/c, \epsilon$$

(где t — время пробега по траекториям системы (1.1)), уравнение (3.1) может быть записано в виде

$$\frac{eB}{c} \frac{\partial f_{(1)}}{\partial s} + e (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{gr}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = [\widehat{L}_{[f_0]} \cdot f_{(1)}](p_z, s, \epsilon). \quad (3.2)$$

Анализ системы (3.2) является наиболее простым, когда на поверхности Ферми присутствуют лишь замкнутые или периодические траектории (1.1) (в обоих случаях траектории замкнуты на компактной поверхности Ферми в трехмерном торе). В этом случае [1] функция $f_{(1)}$ имеет следующее разложение:

$$f_{(1)} = f_{(1)}^{(0)} + f_{(1)}^{(1)} B^{-1} + f_{(1)}^{(2)} B^{-2} + \dots, \quad (3.3)$$

и соответствующие тензоры проводимости имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma^{kl}(B) \simeq & \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * \end{pmatrix} + \\ & + \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} 0 & * & * \\ * & 0 & * \\ * & * & 0 \end{pmatrix} (\omega_B \tau)^{-1} + \\ & + \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} (\omega_B \tau)^{-2} + \dots \end{aligned} \quad (3.4)$$

в случае замкнутых траекторий или

$$\begin{aligned} \sigma^{kl}(B) \simeq & \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{pmatrix} + \\ & + \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} 0 & * & * \\ * & 0 & * \\ * & * & 0 \end{pmatrix} (\omega_B \tau)^{-1} + \\ & + \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} (\omega_B \tau)^{-2} + \dots \end{aligned} \quad (3.5)$$

в случае открытых периодических траекторий.

Однако при наличии открытых траекторий более общего вида разложения (3.3)–(3.5) уже неприменимы, что связано с наличием всюду плотных обмоток части (компактной) поверхности Ферми такими траекториями. В частности, даже для случая устойчивых открытых траекторий выражение (1.3) задает только главный член их вклада в проводимость, а поправочные члены имеют более сложный вид (см., например, [21]).

Для упрощения анализа системы (3.2) можно использовать τ -приближение и перейти к системе

$$\frac{eB}{c} \frac{\partial f_{(1)}}{\partial s} + e (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\text{gr}}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -f_{(1)}/\tau, \quad (3.6)$$

дающей аналогичные результаты более простым путем.

Решения системы (3.6) естественно представить в виде

$$f_{(1)}(p_z, s, \epsilon) = -\frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial \epsilon} \sum_{l=1}^3 E^l g^l(p_z, s, \epsilon),$$

где

$$g^l(p_z, s, \epsilon) = \frac{c}{B} \int_{-\infty}^s v_{\text{gr}}^l(p_z, s', \epsilon) e^{c(s'-s)/eB\tau} ds'$$

получены интегрированием по траектории, проходящей через точку (p_z, s, ϵ) .

Легко видеть, что тогда тензор проводимости задается следующим интегралом по поверхности Ферми:

$$\begin{aligned} \sigma^{kl}(B) = & \frac{ec}{B} \iint_{S_F} \frac{dp_z ds}{(2\pi\hbar)^3} v_{\text{gr}}^k(p_z, s) \times \\ & \times \int_{-\infty}^s v_{\text{gr}}^l(p_z, s') e^{c(s'-s)/eB\tau} ds'. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Можно также показать, что в этом случае симметричная часть тензора проводимости дается формулой

$$s^{kl}(B) = e^2 \tau \iint_{S_F} \langle v_{\text{gr}}^k \rangle_B \langle v_{\text{gr}}^l \rangle_B \frac{dp_z ds}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (3.8)$$

где

$$\begin{aligned} \langle v_{\text{gr}}^k \rangle_B(p_z, s) & \equiv \\ & \equiv \frac{c}{eB\tau} \int_{-\infty}^s v_{\text{gr}}^k(p_z, s') e^{c(s'-s)/eB\tau} ds'. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Из представлений (3.7)–(3.9) уже можно видеть, что свойства проводимости в сильных магнитных полях тесно связаны с геометрией соответствующих траекторий системы (1.1). Действительно, величина (3.9) может быть аппроксимирована выражением

$$\langle v_{\text{gr}}^k \rangle_B(p_z, s) \simeq \frac{c}{eB\tau} \int_{s-eB\tau/c}^s v_{\text{gr}}^k(p_z, s') ds',$$

которое пропорционально приращению k -й координаты вдоль траектории в \mathbf{x} -пространстве. В то же время, как мы отмечали выше, проекции электронных траекторий в \mathbf{x} -пространстве на плоскость, ортогональную \mathbf{B} , подобны траекториям в \mathbf{p} -пространстве, повернутым на 90° . Таким образом, из формул (3.7), (3.8) следует, что проводимость в плоскости, ортогональной \mathbf{B} , тесно связана с геометрией траекторий электронов в \mathbf{p} -пространстве.

Представления (3.7)–(3.9) особенно удобны для оценки поведения проводимости при наличии хаотических открытых траекторий системы (1.1). Для

полного описания тензора проводимости при этом необходимо знать не только геометрию хаотических траекторий в накрывающем \mathbf{p} -пространстве, но и их поведение на компактной поверхности Ферми (с точки зрения общей теории динамических систем). Заметим здесь, что для любой заданной поверхности Ферми и направления \mathbf{V} могут возникать хаотические траектории только одного типа (Царева или Дынникова). В случае наличия хаотических траекторий могут присутствовать и замкнутые траектории системы (1.1), и тогда поверхность Ферми разделяется на части, заполненные хаотическими траекториями, и части, заполненные замкнутыми. В каждом конкретном случае все имеющиеся хаотические траектории имеют при этом сходные геометрические и динамические свойства.

Как упоминалось выше, хаотические траектории типа Царева ведут себя на компактной поверхности Ферми весьма специальным образом. В то же время их геометрические свойства в накрывающем \mathbf{p} -пространстве гораздо проще, чем у хаотических траекторий типа Дынникова. Как мы уже отмечали, вклад таких траекторий в проводимость в сильных магнитных полях описывается формулой (2.1). В этом случае асимптотика старшего члена тензора проводимости отличается от (1.3) тем, что компонента σ^{xx} затухает несколько медленнее, чем $(\omega_B\tau)^{-2}$ (не обязательно по степенному закону).

В случае хаотических траекторий типа Дынникова как их геометрия в \mathbf{p} -пространстве, так и их поведение на компактной поверхности Ферми играют важную и нетривиальную роль в их вкладе в проводимость в пределе $\omega_B\tau \rightarrow \infty$. Например, для связанных физических поверхностей Ферми рода меньше шести каждая из таких траекторий плотно заполняет часть поверхности Ферми, инвариантную относительно отражения $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$. Это обстоятельство приводит к соотношению

$$\langle v^k \rangle_{\text{tr}} = 0$$

для каждой из компонент групповой скорости (включая компоненту вдоль направления \mathbf{V}) для таких траекторий. Вследствие этого вклад таких траекторий в полный тензор проводимости в пределе сильных магнитных полей имеет вид [26]

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} o(1) & o(1) & o(1) \\ o(1) & o(1) & o(1) \\ o(1) & o(1) & o(1) \end{pmatrix}, \quad \omega_B\tau \rightarrow \infty.$$

Таким образом, траектории типа Дынникова отличаются от всех других типов траекторий тем, что

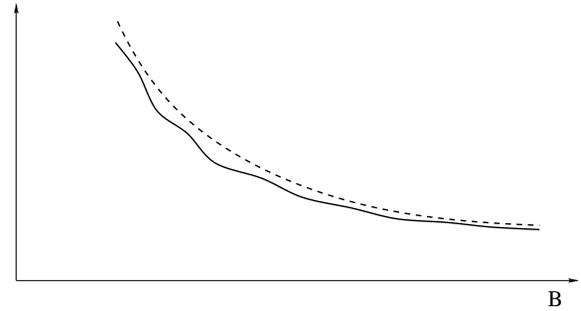


Рис. 16. Зависимость величин σ^{xx} и σ^{yy} , определяемых вкладом хаотических траекторий Дынникова, от величины B в пределе сильных магнитных полей

они не дают никакого вклада в проводимость вдоль направления \mathbf{V} в пределе достаточно сильных магнитных полей. В этой ситуации вклад в компоненту σ^{zz} полного тензора проводимости вносят только замкнутые траектории системы (1.1) на поверхности Ферми.

При описании вклада траекторий типа Дынникова в поперечную проводимость важную роль играет их блуждание по плоскостям, ортогональным \mathbf{V} . Первые примеры таких траекторий, построенные в работе [17], обладали замечательным свойством самоподобия. А именно, всегда существовали два направления, ортогональные \mathbf{V} , такие, что соответствующие траектории совпадали сами с собой после растяжения по этим направлениям с некоторыми растягивающими коэффициентами λ_1 и λ_2 и последующей конечной деформации в плоскости. На основе этого свойства в работе [26] было установлено анизотропное поведение проводимости в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , описываемой некоторыми «скейлинговыми» коэффициентами α и β . А именно, при соответствующем выборе координатных осей в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , компоненты $\sigma^{xx}(B)$ и $\sigma^{yy}(B)$ подчиняются степенному закону:

$$\begin{aligned} \sigma^{xx} &\sim \frac{ne^2\tau}{m^*} (\omega_B\tau)^{2\alpha-2}, \\ \sigma^{yy} &\sim \frac{ne^2\tau}{m^*} (\omega_B\tau)^{2\beta-2}, \end{aligned} \tag{3.10}$$

$$0 < \alpha, \beta < 1.$$

Вообще говоря, замечательное свойство самоподобия не выполняется для траекторий типа Дынникова в общем случае. Тем не менее, как показано в [43], соотношения (3.10) на самом деле носят более общий характер и, вероятно, должны выполняться и в общем случае хаотических траекторий типа Дынникова. Данное обстоятельство связано, в действи-

тельности, с индексами Зорича – Концевича – Форни для динамических систем на двумерных поверхностях (см. [23–25, 27]).

Заметим, что выражения (3.10) не представляют членов какого-либо разложения компонент проводимости по величине B , а в действительности выражают лишь «общий тренд» в затухании этих компонент с увеличением напряженности магнитного поля. Более точно, эти отношения имеют вид

$$\limsup_{B \rightarrow \infty} \frac{\ln \sigma^{xx}(B)}{\ln \omega_B \tau} = 2\alpha - 2,$$

$$\limsup_{B \rightarrow \infty} \frac{\ln \sigma^{yy}(B)}{\ln \omega_B \tau} = 2\beta - 2,$$

а поведение $\sigma^{xx}(B)$ и $\sigma^{yy}(B)$ схематично показано на рис. 16. Отметим также, что строгое обоснование существования индексов Зорича – Концевича – Форни для модели хаотических траекторий типа Дынникова достаточно общего вида дано в работе [41].

При обсуждении индексов Зорича – Концевича – Форни следует отметить еще одну особенность хаотических траекторий типа Дынникова. Всякий раз, когда они возникают, имеет место один из следующих двух взаимоисключающих случаев (см. [36, 38–40]). В первом случае почти все плоскости, ортогональные \mathbf{B} , содержат только одну хаотическую траекторию. Во втором случае почти все плоскости, ортогональные \mathbf{B} , содержат бесконечное число хаотических траекторий. Таким образом, траектории в первом случае должны, вообще говоря, «заполнять» соответствующие плоскости «намного плотнее», чем во втором случае. В первом случае можно ожидать выполнения соотношения $\alpha + \beta = 1$, а во втором – неравенства $\alpha + \beta > 1$. Соответственно, во втором случае проводимость в плоскости, ортогональной \mathbf{B} , должна, вероятно, уменьшаться медленнее при $B \rightarrow \infty$, чем в первом случае.

Для вклада траекторий типа Дынникова в продольную проводимость $\sigma^{zz}(B)$ в работе [26] была также предложена аналогичная формула:

$$\sigma^{zz} \sim \frac{ne^2\tau}{m^*} (\omega_B \tau)^{2\gamma-2}, \quad \omega_B \tau \rightarrow \infty$$

($0 < \gamma < 1$). Вероятно, это приближение (с учетом тех же замечаний, что и относительно $\sigma^{xx}(B)$ и $\sigma^{yy}(B)$) является наиболее подходящим в общей ситуации.

Что касается вклада траекторий типа Дынникова в холловскую проводимость, то следует учитывать [15, 17], что такие траектории распадаются на

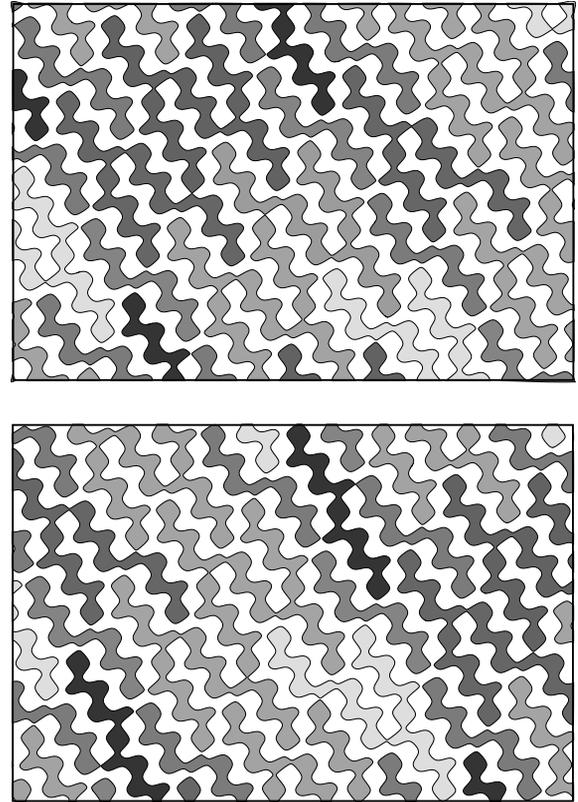


Рис. 17. Расщепление траектории типа Дынникова (рис. 8) на электронноподобные и дырочноподобные замкнутые траектории при небольшом сдвиге энергии Ферми соответственно вниз или вверх

замкнутые траектории электронного типа при сколь угодно малом понижении уровня Ферми, и на траектории дырочного типа при сколь угодно малом повышении уровня Ферми (рис. 17). Аналогично, направления \mathbf{B} на угловой диаграмме, для которых возникают траектории типа Дынникова, принадлежат множеству, отделяющему области холловской проводимости электронного типа от областей холловской проводимости дырочного типа (рис. 12), что уже обсуждалось выше. Как следствие этого, вклад таких траекторий в холловскую проводимость может быть как электронным, так и дырочным; можно только утверждать, что он убывает при $B \rightarrow \infty$. Заметим также, что теми же свойствами обладает и вклад открытых траекторий любого другого типа в холловскую проводимость.

В заключение этого раздела мы опишем специфику некоторых квантовых явлений, связанных с хаотическими траекториями типа Дынникова. Одно из важных свойств траекторий Дынникова состоит в том, что они всегда содержат пары дуг, близ-

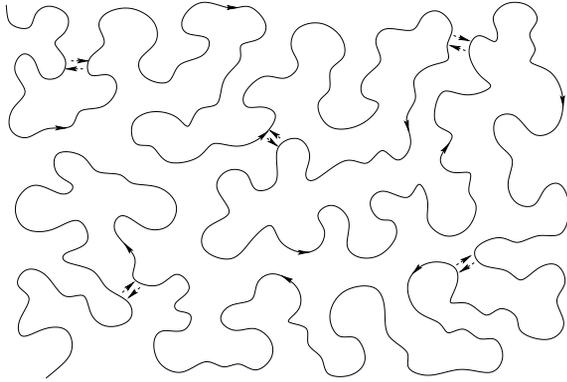


Рис. 18. Явление магнитного пробоя на участках хаотической траектории типа Дынникова, близких друг к другу (схематично)

ких в плоскости, ортогональной \mathbf{B} , но далеких друг от друга вдоль траектории. Беря все более и более длинные участки хаотической траектории, мы можем найти пары, подходящие сколь угодно близко друг к другу. Можно поэтому ожидать, что в пределе сильных магнитных полей и больших значений τ определенную роль может играть явление магнитного пробоя, возникающее в таких областях (рис. 18).

Как известно, явление магнитного пробоя может возникать на траекториях систем (1.1) самой разной геометрии (см., например, [48–53]). В нашем случае мы можем наблюдать влияние этого явления на эффективную длину свободного пробега. Как известно, вероятность (внутризонного) магнитного пробоя при заданном расстоянии между близкими участками траектории сильно зависит от величины магнитного поля и стремится к $1/2$ в пределе $B \rightarrow \infty$. В грубом приближении для заданного значения B можно ввести характерное расстояние $\delta p(B)$ между сегментами, такое что вероятность пробоя близка к $1/2$ при расстоянии между отрезками меньшем чем $\delta p(B)$, и близка к нулю при расстоянии большем чем $\delta p(B)$. По заданному значению $\delta p(B)$ также можно определить характерную длину $l(B)$ участка траектории в \mathbf{p} -пространстве, на котором пара таких отрезков оказывается на расстоянии порядка $\delta p(B)$. Легко видеть, что длина $l(B)$ уменьшается с ростом B . Естественно также ввести характерное время $\tau_{(1)}(B) \sim l(B)/V$ движения между двумя отрезками, находящимися на расстоянии $\delta p(B)$ в плоскости и далеко друг от друга по траектории. В рассматриваемой ситуации время $\tau_{(1)}(B)$ играет роль времени свободного пробега, связанного с явлением магнитного пробоя на хаотической траектории.

В этом же приближении естественно также ввести эффективное время свободного пробега $\tau_{eff}(B)$, определяемое соотношением

$$\tau_{eff}^{-1}(B) = \tau^{-1} + \tau_{(1)}^{-1}(B),$$

в уравнение (3.6).

Можно видеть, что явление магнитного пробоя не оказывает существенного влияния на проводимость при условии $\tau_{(1)}(B) \gg \tau$. В противоположной ситуации ($\tau_{(1)}(B) < \tau$) явление магнитного пробоя очень важно и может существенно изменить поведение тензора проводимости в пределе $B \rightarrow \infty$ (в частности, это может сказаться на скорости убывания компонент тензора проводимости в этом пределе).

Надо сказать, что условия внутризонного магнитного пробоя обычно достаточно жесткие и требуют для его наблюдения очень сильных магнитных полей и очень сильного сближения участков траектории друг с другом. В целом, для наблюдения описанного эффекта в любом случае требуются сверхчистые материалы, очень низкие температуры и чрезвычайно сильные магнитные поля (а также, возможно, некоторые геометрические особенности электронного спектра). Для большинства материалов выполнение условий $\tau_{(1)}(B) < \tau$, вероятно, приближается к пределу экспериментальных возможностей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты исследований наиболее сложных квазиклассических траекторий электронов, возникающих на поверхностях Ферми в присутствии внешнего магнитного поля. Существование траекторий этого типа пока доказано теоретически, хотя их экспериментальное обнаружение еще предстоит осуществить. Геометрия описанных траекторий соответствует хаотической динамике в пространстве квазиимпульсов, что, в свою очередь, приводит к весьма нетривиальному поведению магнитопроводимости в сильных магнитных полях. В общем случае наличие таких траекторий характерно для широкого класса дисперсионных соотношений в кристалле; однако их появление требует специального выбора значения энергии Ферми и направления магнитного поля. Сложность экспериментального поиска описанных траекторий связана в основном с достаточно узким энергетическим интервалом их возникновения для большинства дисперсионных соотношений. В

данном обзоре представлены результаты самых последних исследований геометрии описанных траекторий, особенностей диаграмм угловой проводимости, соответствующих возможности их возникновения на поверхности Ферми, а также особенностей электронных транспортных явлений в пределе $\omega_{BT} \rightarrow \infty$ при наличии таких траекторий на поверхности Ферми.

Благодарности. Статья посвящена 90-летию М. Я. Азбеля.

ЛИТЕРАТУРА

- И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, ЖЭТФ **31**, 63 (1956).
- И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, ЖЭТФ **35**, 1251 (1958).
- И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, ЖЭТФ **38**, 188 (1960).
- И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
- M. I. Kaganov and V. G. Peschansky, Phys. Rep. **372**, 445 (2002).
- Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
- Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1966).
- А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
- Ю. А. Дрейзин, А. М. Дыхне, ЖЭТФ **36**, 127 (1973).
- Ю. А. Дрейзин, А. М. Дыхне, ЖЭТФ **84**, 1756 (1983).
- С. П. Новиков, УМН **37**, 3 (1982).
- А. В. Зорич, УМН **39**, 235 (1984).
- С. П. Царев, Частное сообщение, 1992-93 г.
- И. А. Дынников, УМН **47**, 161 (1992).
- И. А. Дынников, Математические заметки **53**, 57 (1993).
- I. A. Dynnikov, *Surfaces in 3-torus: Geometry of Plane Sections*, Proc. of ECM2, BuDA (1996).
- I. A. Dynnikov, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 45.
- И. А. Дынников, УМН **54**, 21 (1999).
- С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, Письма в ЖЭТФ **63**, 809 (1996).
- С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, УФН **168**, 249 (1998).
- А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **151**, 944 (2017).
- А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **152**, 1053 (2017).
- A. V. Zorich, in: Proc. *Geometric Study of Foliations* (Tokyo, November 1993), ed. by T. Mizutani et al., World Scientific, Singapore (1994), p. 479.
- A. V. Zorich, Annales de l'Institut Fourier **46**, 325 (1996).
- A. V. Zorich, Amer. Math. Soc. Transl., Ser. 2, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 173.
- А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **112**, 1710 (1997).
- A. V. Zorich, Amer. Math. Soc. Transl., Ser. 2, Vol. 197, AMS, Providence, RI (1999), p. 135.
- Р. Де Лео, УМН **55**, 181 (2000).
- Р. Де Лео, УМН **58**, 197 (2003).
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, *Dynamical Systems, Topology and Conductivity in Normal Metals*, arXiv:cond-mat/0304471, DOI:10.1023/B:JOSS.0000019835.01125.92.
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, Sol. State Phys. Bulletin of Braz. Math. Society, New Series **34**, 171 (2003).
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, J. Stat. Phys. **115**, 31 (2004).
- A. V. Zorich, in *Frontiers in Number Theory, Physics and Geometry*, Vol. 1: *On Random Matrices, Zeta Functions and Dynamical Systems*, ed. by P. Cartier, B. Julia, P. Moussa, P. Vanhove, Ecole de physique des Houches, France, March 9–21 (2003), Springer-Verlag, Berlin (2006), p. 439.
- Р. Де Лео, И. А. Дынников, УМН **62**, 151 (2007).
- R. De Leo and I. A. Dynnikov, Geom. Dedicata **138**, 51 (2009).
- И. А. Дынников, Труды МИАН **263**, 72 (2008).
- A. Skripchenko, Discrete Contin. Dyn. Sys. **32**, 643 (2012).

38. A. Skripchenko, *Ann. Glob. Anal. Geom.* **43**, 253 (2013).
39. I. Dynnikov and A. Skripchenko, *Amer. Math. Soc. Transl., Ser. 2, Vol. 234*, AMS, Providence, RI (2014), p. 173.
40. I. Dynnikov and A. Skripchenko, *Trans. Moscow Math. Soc.* **76**, 287 (2015).
41. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, *Invent. Mathem.* **206**, 109 (2016).
42. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, *Bulletin de la societe mathematique de France*, **144**(3), 539 (2016).
43. А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, *Труды МИАН* **302**, 296 (2018).
44. R. D. Leo, in: *Advanced Mathematical Methods in Biosciences and Applications*, ed. by F. Berezovskaya and B. Toni, pp. 53–88 STEAM-H: Science, Technology, Engineering, Agriculture, Mathematics & Health. Springer (2019), p. 53.
45. А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, *УМН* **74**, 149 (2019).
46. А. Я. Мальцев, *ЖЭТФ* **154**, 1183 (2018).
47. А. Я. Мальцев, *ЖЭТФ* **156**, 140 (2019).
48. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **32**, 296 (1957).
49. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **33**, 387 (1958).
50. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **34**, 748 (1958).
51. М. Я. Азбель, *ЖЭТФ* **39**, 1276 (1960).
52. А. А. Слущкин, *ЖЭТФ* **53**, 767 (1967).
53. A. Alexandradinata and L. Glazman, *Phys. Rev. B* **97**, 144422 (2018).

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

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, 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,
член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ,
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании),
д-р физ.-мат. наук А. А. ЦЕЙТЛИН, акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
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