

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Продолжение физической части

*Журнала Русского физико-химического общества,
издававшегося с 1873 по 1930 г.*

Выходит 12 раз в год

Том 159

ЯНВАРЬ

ВЫПУСК 1

МОСКВА

2021

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР А. Ф. АНДРЕЕВ

ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

Е. И. КАЦ, С. В. ТРОИЦКИЙ, И. А. ФОМИН, Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ

Редколлегия: акад. А. Ф. АНДРЕЕВ,

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ, д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции), д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ,
акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании), акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук В. Т. ДОЛГОПОЛОВ, член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ,
д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Москва

ООО «Объединённая редакция»

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Исследование поверхности кремнезоля методом рентгеновского рассеяния	Тихонов А. М., Асадчиков В. Е., Волков Ю. О., Рощин Б. С., Хонкимаки В., Бланко М. В.	5
Особенности бездиссипативного каналирования движущихся заряженных частиц около проводника с током	Высоцкий В. И., Высоцкий М. В.	25
Элементарный излучатель на границе плоскостной структуры	Петрин А. Б.	35
Динамическая ионизация и оже-переходы в квазимолекуле при столкновениях Ne^+-Ne	Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П.	56
Субизлучение холодных и разреженных атомных ансамблей, возбуждаемых резонансным импульсным излучением	Соколов И. М.	68
Число солитонов, порождаемых из интенсивного начального импульса при асимптотически больших временах	Камчатнов А. М.	76

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

О механизме температурных вариаций средней энергии мюонов на больших глубинах	Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С.	88
---	--	----

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Магнитокалорический эффект в наносистемах на основе ферромагнетиков с различными температурами Кюри	Кузнецов М. А., Дровосеков А. Б., Фраерман А. А.	95
Фононная спектроскопия шоттки-подобных низкоэнергетических возбуждений парамагнитной природы в кристаллах твердых растворов гранатов	Таранов А. В., Хазанов Е. Н., Чарная Е. В.	111
Об оценке параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар металлов из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов	Емельянов А. Н., Шахрай Д. В., Ким В. В.	120

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

Характеристики турбулентности, индуцированной механическими волнами в лотке	
..... Полников В. Г., Цяо Ф.	129
Пространственно-временные режимы в системе неидентичных осцилляторов Курамото – Баттогтоха ... Болотов М. И., Смирнов Л. А., Бубнова Е. С., Осипов Г. В., Пиковский А. С.	150
Распределение электронов и ионов вблизи поглощающего сферического тела в неравновесной плазме	
..... Филиппов А. В.	176

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗОЛЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

А. М. Тихонов^{a,b}, В. Е. Асадчиков^c, Ю. О. Волков^{b,c},
Б. С. Рошин^c, В. Хонжимаки^d, М. В. Бланко^d*

^a *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

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

^c *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук
119333, Москва, Россия*

^d *European Synchrotron Radiation Facility
38000, Гренобль, Франция*

Поступила в редакцию 17 июня 2020 г.,
после переработки 21 июля 2020 г.
Принята к публикации 28 июля 2020 г.

Методами рефлектометрии и диффузного (незеркального) рассеяния синхротронного излучения с энергией фотонов около 71 кэВ исследована структура планарной поверхности коллоидных растворов аморфных 27-нанометровых частиц кремнезема, обогащенных тяжелыми щелочными ионами K^+ , Rb^+ и Cs^+ . В работе для жидкофазных систем применен самосогласованный подход, позволяющий без использования какой-либо априорной информации о приповерхностной структуре восстановить по экспериментальным данным как профили электронной концентрации перпендикулярно поверхности гидрозольа, так и спектры корреляционной функции высот в плоскости поверхности. Представленный анализ показывает, что при высоких рН щелочные катионы с большим радиусом и поверхностной концентрацией $(5 \pm 1) \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2}$ замещают ионы Na^+ с меньшим радиусом. Этот результат находится как в качественном согласии с зависимостью одноионной электростатической свободной энергии Харкаца–Улstrup от ионного радиуса, так и в количественном хорошо соответствует данным других работ с использованием капиллярно-волнового подхода. Интегральное значение эффективной высоты шероховатости границ раздела $3.2 \pm 0.5 \text{ \AA}$ в пределах погрешности совпадает с предсказанием теории капиллярных волн, однако полученные из эксперимента спектры корреляционной функции высот принципиально отличаются от теоретических в области низких пространственных частот $\nu < 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$. Аппроксимация спектров суммой двух K -корреляционных распределений указывает на переход от собственной шероховатости компактного слоя ионов щелочных металлов к капиллярной шероховатости поверхности жидкости в области корреляционной длины около 1 мкм. Совокупность имеющихся данных, по нашему мнению, свидетельствует о дроблении этого слоя на двумерные кластеры — острова Вигнера.

DOI: 10.31857/S0044451021010016

1. ВВЕДЕНИЕ

Протекание множества электрохимических и физико-химических явлений на межфазных границах газ–вода и масло–вода происходит при непосред-

ственном участии небольших неорганических ионов [1, 2]. Например, катионы фонового электролита обычно вовлекаются в качестве посредников [3] или выступают в роли конкурентов [4] при взаимодействии заряженных полипептидных макромолекул с фосфолипидным лэнгмюровским монослоем, имитирующим поверхность биологической мембраны. Для изучения молекулярных структур и ионных эффектов на поверхности жидкости с 90-х годов

* E-mail: tikhonov@kapitza.ras.ru

прошлого века интенсивно привлекаются вычисления, например, молекулярной динамики с атомным разрешением [5–7]. В связи с этим экспериментальные работы, основанные на рассеянии рентгеновского излучения поверхностью жидкости [8], являются хорошей базой для проверки как теоретических моделей [9], так и вычислительных экспериментов [10]. Их основным преимуществом является то, что по данным рассеяния обычно можно получать структурную информацию о микроскопическом устройстве межфазных границ с субнанометровым пространственным разрешением, которую невозможно извлечь из измерений интегральных макроскопических характеристик, таких как поверхностное натяжение, емкость или поверхностный потенциал Вольта [11, 12]. К примеру, в работе [13] при использовании данных рефлектометрии показано, что термотропное поведение адсорбированных монослоев длинноцепочечных спиртов на границе *n*-гексан–вода, в которых наблюдается явление кроссовера, характеризуются одним значением критического показателя. Более того, при определенных условиях с использованием синхротронного излучения в жесткой части спектра удается по экспериментальным данным описать поперечную структуру поверхности жидкости фактически с атомным разрешением [14, 15]. При этом кристаллический порядок в плоскости поверхности можно исследовать методом скользящей дифракции с субатомным пространственным разрешением [16].

В данной работе мы делаем обзор имеющихся и приводим новые систематические экспериментальные данные по рефлектометрии и незеркальному (диффузному) рассеянию в условиях полного внешнего отражения синхротронного излучения с энергией фотонов около 71 кэВ для поверхности водного раствора аморфных наночастиц SiO₂ как стабилизированного NaOH, так и обогащенного гидроксидами щелочных металлов K, Rb, и Cs [17]. При анализе данных рассеяния мы применили для жидкофазных систем самосогласованный подход, предложенный ранее Кожевниковым [18]. Он позволяет без использования какой-либо априорной информации о приповерхностной структуре восстановить по экспериментальным данным как профили электронной концентрации перпендикулярно поверхности гидрозоля, так и спектры корреляционной функции высот в плоскости поверхности суспензии. Представленный анализ подтверждает ранее полученные в работе [19] результаты, а также дает новые сведения о спектре шероховатости поверхности жидкости, который, как оказалось, в нашем случае прин-

ципально отличается от предсказаний общепринятой теории капиллярных волн [20]. Возникновение наблюдаемой особенности в спектрах мы связываем с дроблением приповерхностного компактного слоя щелочных ионов на двумерные кластеры.

2. СИЛЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ

При взаимодействии иона электролита с поверхностью силы электрического изображения играют основополагающую роль [21]. При этом уже в приближении точечного заряда Вагнера – Онзагера – Самараса удается получить качественное описание свойств поверхности раствора электролита [22, 23]. Например, классическая теория электрического двойного слоя Гуи – Чепмена – Штерна строится в этом приближении [24–27]. Обзор Волкова и др. [28] детально отражает все исторические этапы развития теории электрического двойного слоя. Принято считать, что Фрумкин был первым, кто обратил внимание на зависимость поверхностного натяжения раствора электролита от размера его ионов [29, 30]. Относительно недавно Маркин и Волков [31], используя теорию Харкаца и Улstrup [32, 33], смогли количественно объяснить зависимость поверхностного натяжения раствора простых неорганических солей от ионного радиуса.

Итак, рассмотрим плоскую межфазную границу воздух – вода, расположенную при $z = 0$, и ось z направим по нормали к поверхности противоположно силе тяжести (см. рис. 1). Тогда при $z > 0$ диэлектрическая проницаемость воздуха $\epsilon_1 \approx 1$, а при $z < 0$ проницаемость воды $\epsilon_2 \approx 78$. В традиционном приближении сплошной среды ион электролита рас-

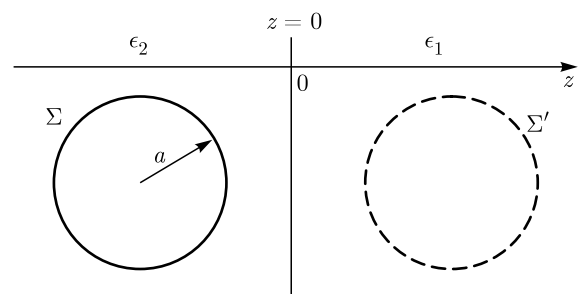


Рис. 1. Взаимодействие однородно заряженной сферы радиусом a и зарядом Σ с плоской межфазной границей между двумя диэлектрическими средами, Σ' — фиктивный заряд «электрического изображения»

сма­три­ва­ет­ся как точечный заряд Σ , а его энергия имеет следующий вид [21]:

$$\frac{\Sigma^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_2} \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{z}, \quad (1)$$

где электрическая постоянная $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м, а z — расстояние от центра иона до межфазной границы. Поскольку $\epsilon_2 - \epsilon_1 > 0$, любой точечный заряд в водной среде отталкивается от поверхности по направлению в глубь объема водной фазы вследствие взаимодействия со своим «электрическим изображением».

Основным препятствием, которое затрудняет теоретическое описание переходного слоя, связано с расходимостью порядка $1/z$ в (1). Харкац и Улstrup разрешили эту проблему, учтя ненулевой размер иона [32, 33]. Согласно их работам, в приближении сплошной среды свободная энергия $F(z)$ заряда Σ , помещенного в сферическую полость радиусом a на границе двух диэлектрических сред, описывается следующими выражениями:

$$\begin{aligned} F(0 \leq z \leq a) = & \\ = & \frac{\Sigma^2}{32\pi\epsilon_0\epsilon_1 a} \left[2 + \frac{2z}{a} + \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \left(4 - \frac{2z}{a} \right) \right] + \\ + & \frac{\Sigma^2}{32\pi\epsilon_0\epsilon_1 a} \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^2 \frac{(1 - z/a)(1 - 2z/a)}{1 + 2z/a} + \\ + & \frac{\Sigma^2}{64\pi\epsilon_0\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^2 \frac{1}{z} \ln \left[1 + \frac{2z}{a} \right] + \\ + & \frac{\Sigma^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_2 a} \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^2 \left(1 - \frac{z}{a} \right) \quad (2) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} F(z \geq a) = & \frac{\Sigma^2}{32\pi\epsilon_0\epsilon_2 a} \left[4 + \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{2a}{z} \right] + \\ + & \frac{\Sigma^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_2 a} \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^2 \frac{1}{1 - (2z/a)^2} + \\ + & \frac{\Sigma^2}{64\pi\epsilon_0\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^2 \frac{1}{z} \ln \left[\frac{2z + a}{2z - a} \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

Электростатическая свободная энергия иона в воде $z < 0$ получается из выражений (2) и (3) заменой $\epsilon_1 \leftrightarrow \epsilon_2$. Таким образом, чем больше ионный радиус, тем слабее его взаимодействие с границей, хотя эта особенность важна только в очень узкой области порядка $2a$ вблизи поверхности. На рис. 2 показаны зависимости (2) и (3) для ионов щелочных металлов. Непосредственно на самой межфазной границе энергия сферического заряда конечна:

$$F(0) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\Sigma^2}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \frac{1}{a}. \quad (4)$$

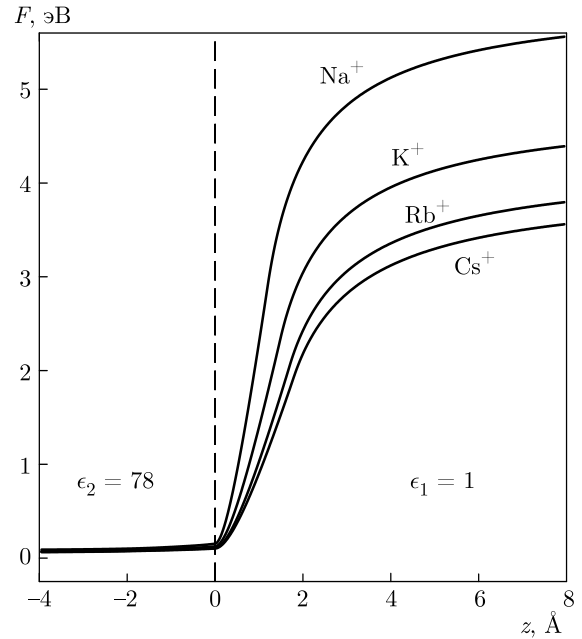


Рис. 2. Одноионная электростатическая свободная энергия Харкаца–Улструпа для ряда ионов щелочных металлов на межфазной границе воздух–вода как функция z

Считается, что на расстоянии в несколько ионных радиусов от поверхности ионы взаимодействуют с ней фактически как точечные заряды [34, 35]. Также ряд авторов проверяли справедливость выражений (2), (3) и указывали на типографскую ошибку в оригинальных публикациях Харкаца и Улструпа [5, 28, 36].

Сплошные линии на рис. 3 показывают различие $\Delta F_M(z)$ (на границе воздух–вода) в одноионной свободной энергии Харкаца–Улструпа для ряда моновалентных ионов щелочных металлов M^+ (K^+ , Rb^+ , Cs^+) от энергии иона Na^+ , $F_{Na}(z)$. Для Na^+ — радиус $a = 1.2 \text{ \AA}$; для K^+ имеем $a = 1.5 \text{ \AA}$; для Rb^+ — $a = 1.7 \text{ \AA}$; и для Cs^+ — $a = 1.8 \text{ \AA}$ [37]. С одной стороны, при $z \leq 0$ разность $\Delta F < 0.03 \text{ эВ}$ (порядка $k_B T$ при $T = 298 \text{ К}$ и k_B — постоянная Больцмана) мала, без особенностей, но из этого следует, что ионы с большим радиусом на самой границе имеют меньшую энергию, чем с малым a . Частично это связано с различием в борновской энергии растворения ионов в воде $F_M(-\infty)$. С другой стороны, при $z \approx 2 \text{ \AA}$ эти кривые имеют минимум глубиной $0.05\text{--}0.1 \text{ эВ}$ (примерно $2k_B T - 4k_B T$) на расстоянии порядка $2a$ над поверхностью воды, т. е. более крупные ионы будут накапливаться здесь, вытесняя мелкие — эффект, связанный с размером иона. Однако при нормальных условиях ($T = 298 \text{ К}$) это явление не проявляется, потому что подвешивание над по-

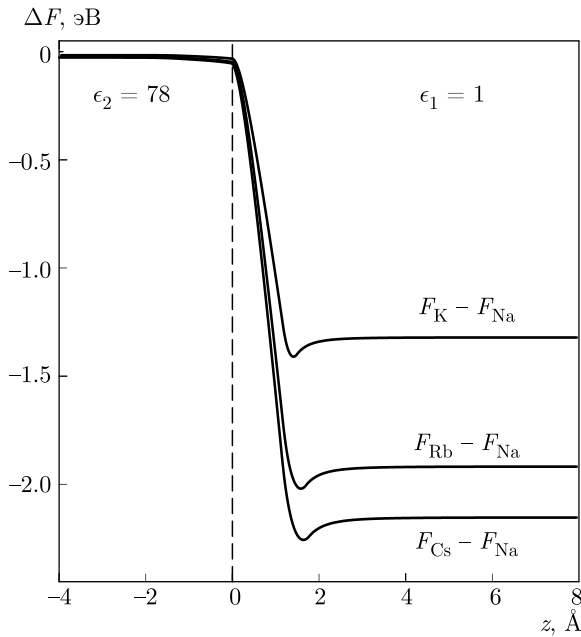


Рис. 3. Размерный эффект на границе воздух–вода. Отличие свободной энергии одновалентного щелочного иона M^+ ($M = K, Rb, Cs$) от энергии иона Na^+ на границе воздух–вода

верхностью, например Na^+ , на высоту около 1 \AA связано с преодолением значительного энергетического барьера примерно в 2.5 эВ . Для этого требуется специфическое граничное условие, например, электрическое поле напряженностью около 10^9 В/м . Поле такой величины типично для первой гидратной оболочки у небольших неорганических ионов (например, Na^+ , Cu^{2+} , Al^{3+}), но не может быть получено в электролитическом конденсаторе.

3. ПЕРЕХОДНЫЙ СЛОЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗЕМНОГО ГИДРОЗОЛЯ

Экспериментальная оценка для толщины переходного слоя на поверхности концентрированного водного раствора сильного электролита, например, простой неорганической соли $CsCl$ составляет менее 10 \AA [38], т.е. порядка предела пространственного разрешения в эксперименте рентгеновской рефлектометрии. Однако на поверхности концентрированного коллоидного раствора аморфных наночастиц диоксида кремния SiO_2 (примерно 40% по массе), стабилизированного небольшим количеством (примерно 0.1 моль/л) гидроксида щелочного металла [17, 39, 40], наблюдается слой протяженностью около 10^3 \AA [41].

Дело в том, что химическое равновесие в гидрозоле при умеренных рН наступает благодаря процессам протонирования и депротонирования силанольных групп на поверхности кремнезема [42–44]. При значениях рН в интервале между 9 и 12 объемная концентрация ионов OH^- составляет $c^- = 10^{-5} - 10^{-2}$ моль/л, что на два-четыре порядка величины меньше, чем объемная концентрация ионов щелочных катионов $M^+ c^+ = 0.1 - 1.0$ моль/л. Так, в состоянии равновесия при рН = 9 десорбция гидроксильных ионов (процесс протонирования силанольной группы) с поверхности кремнезема (в объеме) связана с преодолением энергетического барьера порядка $k_B T \ln(c^+/c^-) \approx 9k_B T$ на ион (k_B – постоянная Больцмана) и порядка $4k_B T$ при рН = 12. Таким образом, частицы кремнезема можно рассматривать как макроионы с зарядом $\Sigma = 10^2 e - 10^3 e$ (где e – элементарный заряд), а гидрозоле – раствор сильного электролита, который полностью ионизован. Поскольку большинство ионов электролита МОН концентрируются у поверхности коллоидных частиц, дебаевская длина экранирования в растворе составляет

$$\Lambda_D = \sqrt{\epsilon_0 \epsilon_2 k_B T / c^- N_A e^2} \approx 30 - 1000 \text{ \AA}$$

(где N_A – число Авогадро). Благодаря разнице в потенциалах сил электрического изображения для одновалентных катионов Na^+ и отрицательно заряженных наночастиц-макроионов (1) на поверхности золя возникает градиент поверхностного потенциала. В результате, при сохранении электронейтральности всей системы на поверхности гидрозоля возникает широкий переходный слой (см. рис. 4), протяженность которого порядка Λ_D [41, 45].

В работе [46] сообщалось, что при сильном обогащении раствора тяжелыми ионами Cs^+ они селективно накапливаются в тонком слое на границе гидрозоле–воздух, замещая там легкие ионы Na^+ . Предложенная в ней качественная четырехслойная модель структуры планарной границы гидрозоле–воздух представлена на рис. 4. Она также основана на структурных параметрах, извлеченных из данных скользящего малоуглового рассеяния и рефлектометрии синхротронного излучения с энергией фотонов около 15 кэВ [41]. В последнем случае использовался стандартный модельный подход (см., например, [47, 48]) с построением профилей электронной концентрации с помощью функции ошибок, в рамках стандартной теории капиллярных волн [20, 49, 50].

Первый слой (толщиной $h \sim 8 \text{ \AA}$) – компактный слой щелочных ионов. Их поверхностная концентра-

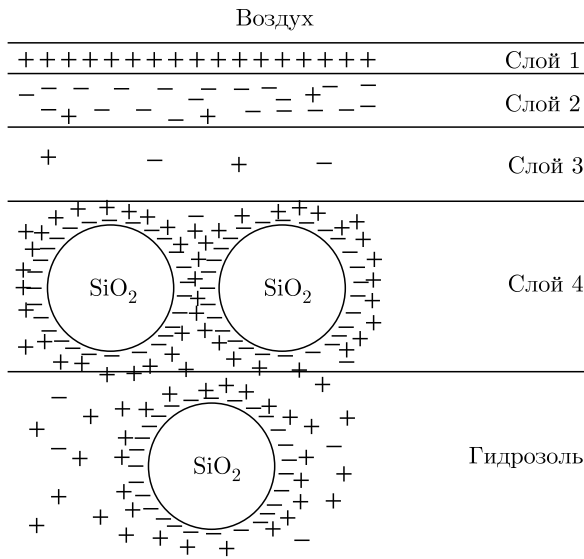


Рис. 4. Четырехслойная модель поперечного строения переходного слоя на границе кремнеземный гидрозоль–воздух [46, 52]. Ионы щелочных металлов с поверхностной концентрацией около $4 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2}$ располагаются в компактном слое 1 с низкой плотностью и толщиной $h \sim 8 \text{ \AA}$, а в слое 2 толщиной около 13 \AA — гидратированные анионы OH^- . Слой 3 с низкой концентрацией электролита имеет толщину примерно $10\text{--}20 \text{ нм}$, а толщина монослоя наночастиц (слой 4) определяется их диаметром (примерно 27 нм)

ция в нем, согласно данным скользящей дифракции и рефлектометрии, составляет примерно $4 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2}$ [51, 52]. Второй слой (толщиной около 13 \AA) — диффузный слой пространственного заряда гидратированных ионов. Плотность этого слоя не зависит от присутствия тяжелых ионов в объеме гидрозоля, поэтому разумно полагать, что в нем в основном сосредоточен отрицательный заряд анионов OH^- с их оценочной поверхностной концентрацией порядка 10^{19} м^{-2} [45, 46]. Слои 1 и 2 в духе классической теории электрического двойного слоя следует называть соответственно компактным и диффузным [1]. Их суммарная толщина составляет $d \sim 20 \text{ \AA}$.

Обедненный слой 3 с низкой концентрацией электролита отделяет первые два слоя от отрицательно заряженных частиц в четвертом слое. Его толщина зависит от уровня pH (около 20 нм при $\text{pH} = 9$). Наконец, толщина слоя 4 такая же, как диаметр коллоидных наночастиц в растворе, а их концентрация в нем значительно выше, чем в объеме раствора. Разумно полагать, что плоскость наименьшего сближения коллоидных частиц с поверхностью определяется их взаимодействием с пространственным зарядом в диффузном слое, кото-

рый создает поле фиктивного заряда «изображения». Увеличение pH вызывает сближение слоя частиц с поверхностью, видимо, за счет экранирования их взаимодействия с пространственным зарядом в диффузном слое при уменьшении дебаевской длины.

В работе [52] ионы в компактном слое предложено рассматривать как тяжелый и очень плотный аналог двумерной системы «классических» электронов, подвешенных над поверхностью некоторых криогенных диэлектриков (жидкий ^3He , ^4He , жидкий и твердый водород) силами электрического изображения и внешним электрическим полем [53]. Однако существование над поверхностью золя области протяженностью в несколько ангстрем с напряженностью поля порядка 10^9 В/м требует подтверждения. Отметим, что замещение в компактном слое при обогащении легких маленьких катионов Na^+ на более тяжелые и крупные согласуется с выражением (4). При этом в распределении поверхностного потенциала имеются, как минимум, два скачка: первый на плоскости наименьшего сближения с поверхностью для гидроксильных ионов, а второй на плоскости наименьшего сближения для наночастиц.

Отметим также, что имеющиеся данные свидетельствуют о наличии более протяженной, чем показано на рис. 4, области расслоения гидрозоля (более чем в два раза). Связано это с тем, что образование плотного монослоя наночастиц эквивалентно появлению дополнительной границы раздела. Возникающее при этом различие в потенциалах сил электрического изображения для щелочных катионов и анионных наночастиц, видимо, служит причиной расслоения золя в глубине [45, 54, 55].

4. ЭКСПЕРИМЕНТ

Мы провели систематическое исследование поверхностей монодисперсных суспензий 27-нм нанометровых частиц кремнезема, обогащенных щелочными ионами K^+ , Rb^+ и Cs^+ . Для обеспечения насыщения слоя 1 в структуре поверхности образцов зольей (см. рис. 4) выбиралась объемная концентрация щелочных металлов, которая значительно превышала объемную концентрацию натрия. Исходный концентрированный монодисперсный золь Ludox TM-50, стабилизированный гидроксидом натрия, поставлялся компанией Grace Davison ($\text{pH} = 9$, $50 \text{ масс. \%} - \text{SiO}_2$ и $0.2 \text{ масс. \%} - \text{Na}$). Далее золь либо разбавлялся деионизован-

ной водой (ELGA, PURELAB Option-Q), либо обогащался путем смешивания в колбе (взбалтывался и помещался затем в ультразвуковую ванну Vandelin) с раствором гидроксида щелочного металла МОН в деионизованной воде до раствора с массовой концентрацией SiO₂ примерно 30%, следуя подходу, изложенному в работе [46]. Таким образом, концентрация ионов Na⁺ в растворах составляет около 0.03 моль/л, а концентрация М⁺ в обогащенном растворе варьируется в интервале от 0.8 до 1.2 моль/л (рН ≈ 12). Твердые гидраты CsOH·x(H₂O) и RbOH·x(H₂O) (99.9% — по содержанию металла и 15–20% H₂O — по массе) приобретались у компании Alfa Aesar. Гидроксид КОН приобретался у Sigma-Aldrich (99.9% — по содержанию металла).

Согласно данным малоуглового рассеяния, исходный раствор Ludox TM-50 содержит однородные аморфные частицы кремнезема с характерным диаметром около 27 нм [56,57]. Такой размер частиц диоксида кремния в гидрозоле был выбран намеренно для облегчения интерпретации данных рентгеновской рефлектометрии. Дело в том, что чем больше частицы, тем меньше их вклад в коэффициент отражения при больших углах скольжения α. Эта связано как с широкой (L_D ≈ 400 Å) приповерхностной структурой золя 27-нанометровых частиц (> 200 Å), так и с высокой шероховатостью поверхности монослоя наночастиц (см. рис. 4).

Добавляя, например, CsOH в исходный гидрозоль, стабилизированный NaOH (рН ~ 9), можно получить раствор с очень высокой объемной концентрацией катионов Cs⁺ (рН < 12), который в герметичном контейнере при комнатной температуре остается жидкостью, по крайней мере, в течение месяца [58–60]. При более высокой концентрации, например, гидроксида цезия (рН > 12.5) золи Ludox обычно становятся мутными и за время порядка недели затвердевают, переходя в гель, но при этом в последнем распределение наночастиц SiO₂ по размерам существенно не изменяется [61].

Измерения коэффициента отражения R и интенсивности поверхностного диффузного (незеркального) рентгеновского рассеяния I_d на границе гидрозоль–воздух проведены при нормальных условиях на станции ID31 синхротрона ESRF [62]. В экспериментах интенсивность I₀ сфокусированного монохроматического луча фотонов с длиной волны λ = 0.1747 ± 0.0003 Å (энергия кванта около 71 кэВ) составляла порядка 10¹⁰ ф/с при поперечных размерах менее 10 мкм по высоте и около 250 мкм в горизонтальной плоскости. Для регистрации дан-

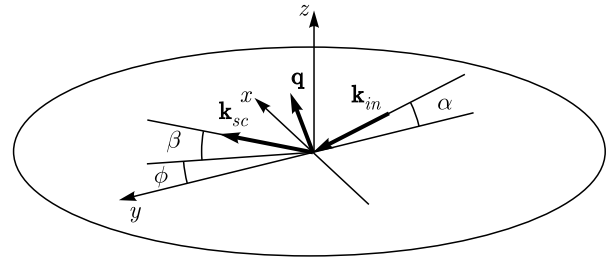


Рис. 5. Кинематика рассеяния на поверхности жидкости при скользющем падении излучения

ных рассеяния был использован двумерный CCD-детектор MaxiPix (256 × 256 пикселей, линейный размер пиксела составлял примерно 55 мкм) [63]. Таким образом, при расстоянии от центра образца до детектора около 0.9 м угловое разрешение одиночного пиксела составляет приблизительно 6 · 10⁻⁵ рад. Экспериментальная область засветки при единичном измерении составляла около 54 × 54 пиксела.

Образцы кремнезольей приготавливались и изучались при нормальных условиях (T = 298 К) в термостатированной герметичной ячейке (фторопластовая тарелка диаметром приблизительно 100 мм) с рентгенопрозрачными окнами в соответствии с методикой, описанной в работе [46]. Значение угла полного внешнего отражения α_c для всех границ золь–воздух составляет α_c = λ√r_eρ_b/π ≈ 3 · 10⁻⁴ рад или примерно 0.017° (где r_e = 2.814 · 10⁻⁵ Å — классический радиус электрона) и определяется объемной электронной концентрацией ρ_b ≈ 1.2ρ_w в растворах, где ρ_w = 0.333 e⁻Å⁻³ — электронная концентрация в воде при нормальных условиях.

В скользящей геометрии кинематику рассеяния на макроскопически плоской межфазной границе, ориентированной силой гравитации, удобно описывать в системе координат, в которой начало лежит в центре области засветки. Плоскость xy совпадает с границей между монослоем и водой, ось x перпендикулярна к направлению луча (см. рис. 5). Пусть k_{in} — волновой вектор луча с амплитудой k₀ = 2π/λ, падающего в плоскости yz на межфазную границу xy под углом скольжения α. Тогда направление рассеянного луча с волновым вектором k_{sc} задается в вертикальной плоскости углом β, в горизонтальной — углом φ. Таким образом, компоненты вектора рассеяния q = k_{in} - k_{sc} в плоскости межфазной границы q_x = k₀ cos β sin φ и q_y = k₀(cos β cos φ - cos α), а проекция на ось z — q_z = k₀(sin α + sin β). В нашем эксперименте α, β, φ ≪ 1, тогда имеем

$$\begin{aligned} q_x &\approx k_0\phi, \\ q_y &\approx \frac{k_0}{2}(\alpha^2 - \beta^2), \\ q_z &\approx k_0(\alpha + \beta). \end{aligned} \quad (5)$$

В рефлектометрическом эксперименте $\beta = \alpha$, $\phi = 0$, т. е. вектор \mathbf{q} направлен строго по нормали к поверхности $|\mathbf{q}| = q_z \approx 2k_0\alpha$. При измерении незеркального рассеяния $\beta \neq \alpha$, $\phi = 0$ и, соответственно, только $q_x = 0$.

Заметим, что при $q_z < q_c = (4\pi/\lambda)\alpha_c \approx 0.025 \text{ \AA}^{-1}$ падающий луч испытывает полное внешнее отражение $R \approx 1$. При этом за счет наличия шероховатостей на поверхности происходит перераспределение потока падающего излучения между зеркально отраженной и рассеянной в воздух компонентами. В то же время при $q_z > q_c$ излучение, проникающее в объем образца, рассеивается на наночастицах SiO_2 . Таким образом, для корректного анализа экспериментальных данных рефлектометрии необходимо разделить поверхностную и объемную (фоновую) компоненты рассеяния.

В случае рентгеновского излучения длина волны λ существенно меньше корреляционной длины шероховатости поверхности $\xi \sim 1 \text{ мкм}$. Тогда при малых углах скольжения α (так, что $k_{in}\xi \gg 1$ и $k_{sc}\xi \gg 1$) индикатриса поверхностного рассеяния распределена вдоль q_y и быстро убывает при $|q_x| > 0$. В то же время интенсивность объемного рассеяния зависит только от модуля вектора \mathbf{q} и, наоборот, медленно меняется с увеличением q_x . С учетом этого, уровень фона при обработке экспериментальных данных рассчитывался как усредненное значение интенсивности, регистрируемой при значениях азимутальных углов $|\phi| > 0.05^\circ$ ($|q_x| > 0.03 \text{ \AA}^{-1}$) для каждого значения углов α (рефлектометрия) и β (поверхностное рассеяние).

На рис. 6 показаны зависимости коэффициента отражения $R(q_z)$ для поверхности стабилизированного NaOH и обогащенных зольей. На рис. 7–10 для гидрозолей показаны двумерные карты распределения интенсивности поверхностного рассеяния как функции углов β и ϕ . Они получены при фиксированном угле скольжения $\alpha \approx 2.1 \cdot 10^{-4}$ рад, что составляет примерно 0.012° . На рис. 11 изображены одномерные кривые интенсивности поверхностного диффузного (незеркального) рассеяния $I_d(\beta)$ от поверхности стабилизированного NaOH и обогащенных зольей при том же значении α , полученные интегрированием двумерных карт рассеяния по углу ϕ в пределах $-0.03^\circ \dots 0.03^\circ$. На этих кривых

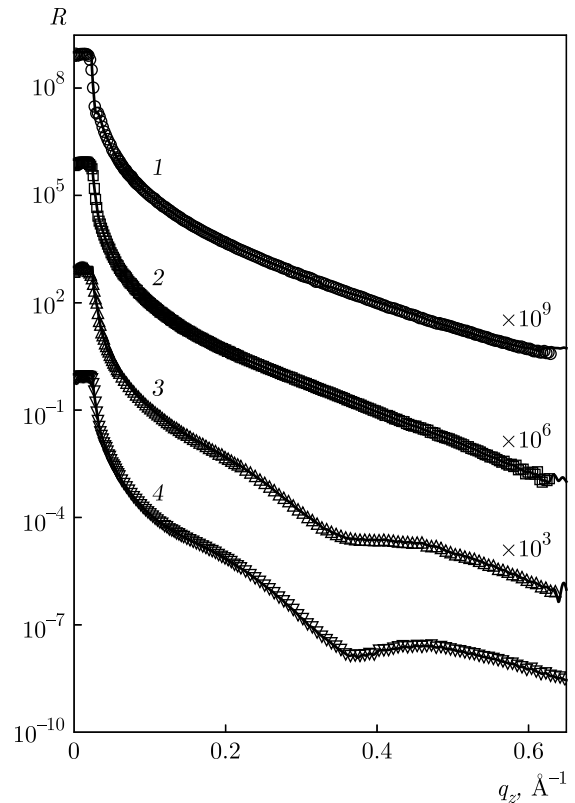


Рис. 6. Зависимости коэффициента отражения $R(q_z)$, полученные при нормальных условиях, для кремнезольей, стабилизированного NaOH (1) и обогащенных KOH (2), RbOH (3) и CsOH (4)

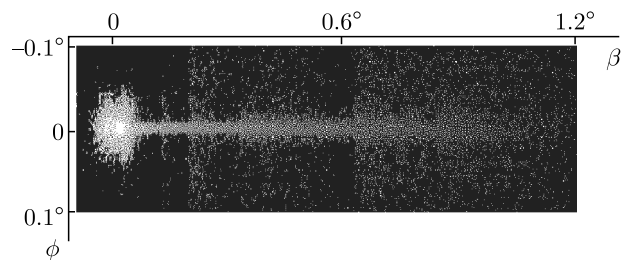


Рис. 7. Двумерная карта рассеяния при $\alpha \approx 0.012^\circ$ на поверхности кремнезоля 27-нанометровых частиц SiO_2 с объемной концентрацией Na $c_{\text{Na}^+} \approx 0.06$ моль/л

самый интенсивный пик соответствует зеркальному отражению при $\beta \approx 0.7\alpha_c$.

5. ТЕОРИЯ

В данной работе анализ кривых зеркального отражения проводился в рамках модельно-независимого метода, основанного на экстраполяции асимптотики угловой зависимости коэффициента зер-

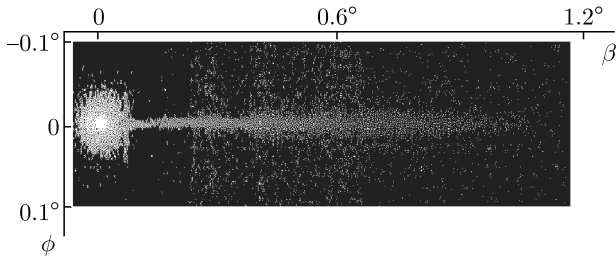


Рис. 8. Двумерная карта рассеяния при $\alpha \approx 0.012^\circ$ на поверхности кремнезоля с объемной концентрацией K $c_{K^+} \approx 0.8$ моль/л

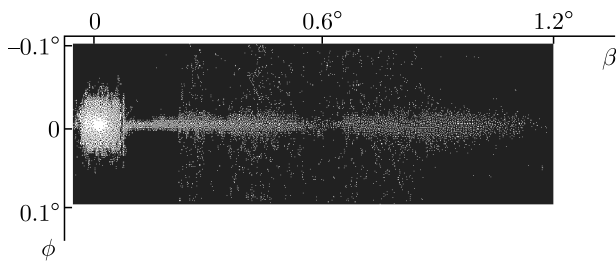


Рис. 9. Двумерная карта рассеяния при $\alpha \approx 0.012^\circ$ на поверхности кремнезоля с объемной концентрацией Rb $c_{Rb^+} \approx 1.2$ моль/л

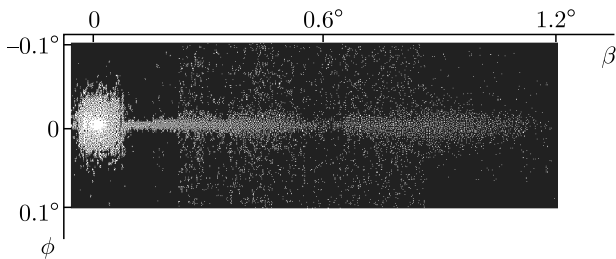


Рис. 10. Двумерная карта рассеяния при $\alpha \approx 0.012^\circ$ на поверхности кремнезоля с объемной концентрацией Cs $c_{Cs^+} \approx 1.2$ моль/л

кального отражения $R(q_z)$ в область больших q_z без использования каких-либо априорных предположений о структуре поверхности образца [64–66]. Ранее с помощью этого подхода нами были изучены структура и кинетика формирования макроскопически плоских липидных мультислоев на поверхности гидрозоля [55, 56, 67, 68], а также структура адсорбционных пленок на межфазной границе толуол–вода [69].

В жесткой части спектра связь диэлектрической проницаемости среды ϵ с ее поляризуемостью $\chi \ll 1$ задается соотношением $\epsilon \approx 1 - \chi$. Данный метод предполагает наличие в профиле поляризуемости вблизи поверхности $\chi(z)$ особых точек, в которых либо он, либо его n -я производная $\chi^{(n)}(z)$ меняется скачкообразно:

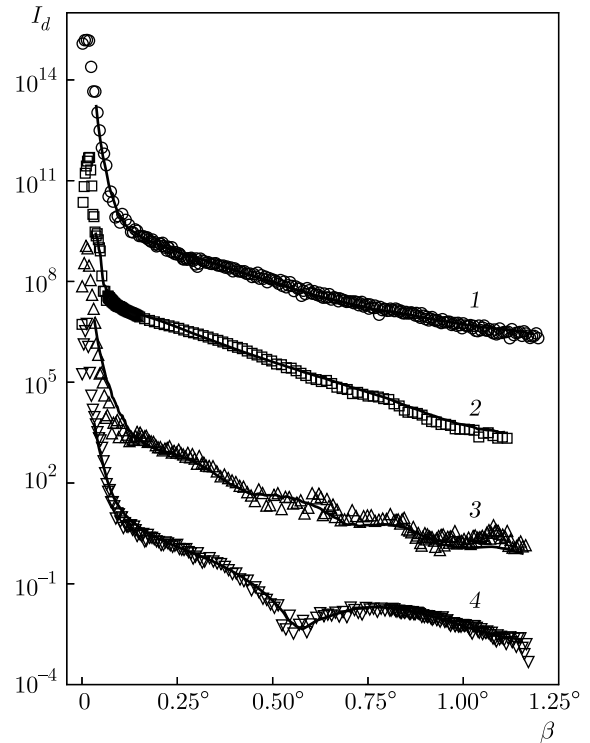


Рис. 11. Экспериментальная (точки) и расчетная (сплошные линии) интенсивности диффузного рассеяния $I_d(\beta)$ при фиксированном $\alpha \approx 0.012^\circ$ для поверхностей стабилизированного NaOH (1), обогащенных KOH (2), RbOH (3) и CsOH (4) золей. Для ясности каждая кривая смещена вдоль оси ординат относительно соседней

$$\Delta^{(n)}(z_j) \equiv \frac{d^n \chi}{dz^n}(z_j + 0) - \frac{d^n \chi}{dz^n}(z_j - 0), \quad (6)$$

где z_j — координата j -й точки разрыва. Сочетание таких особых точек однозначно определяет асимптотическое поведение амплитудного коэффициента отражения $r(k)$ при $k \equiv q_z/2 = k_0 \sin \alpha \rightarrow \infty$:

$$r_0(k \rightarrow \infty) \simeq -k_0^2 \left(\frac{i}{k}\right)^{n+2} \sum_{j=1}^m \Delta^{(n)}(z_j) e^{ikz_j}. \quad (7)$$

Как показано в работах [65, 70], в общем случае существуют всего два физически разумных распределения $\chi(z)$, одновременно удовлетворяющих как экспериментально измеренному значению квадрата модуля коэффициента отражения $R(k) = |r(k)|^2$ в конечном интервале k , так и заданному сочетанию из m особых точек $\chi^{(n)}(z_j)$, определяющих асимптотику $r_0(k \rightarrow \infty)$.

В свою очередь, порядок и расположение особых точек определяется путем модифицированного косинус-фурье-преобразования эксперименталь-

но измеренной части кривой отражения. Функция преобразования имеет следующий вид:

$$F(x) = \frac{2^{2n+4}}{k_0^4(k_{max} - k_{min})} \times \int_{k_{min}}^{k_{max}} [k^{2n+4}R(k) - C] \cos(2kx) dk, \quad (8)$$

$$C = \frac{1}{k_{max} - k_{min}} \int_{k_{min}}^{k_{max}} k^{2n+4}R(k) dk,$$

где интегрирование проводится по измеренному интервалу (k_{min}, k_{max}) значений k .

Функция $F(x)$ сильно осциллирует вблизи нуля, при этом положения экстремумов в общем случае зависят от границ интервала интегрирования. В то же время имеется набор стабильных экстремумов, фиксированные положения которых зависят от расстояний между парами особых точек $x_{ij} = z_j - z_i$ независимо от значений k_{min} и k_{max} , при этом значение функции в этих точках равно

$$F(x_{ij}) \approx \Delta^{(n)}(z_i)\Delta^{(n)}(z_j).$$

Таким образом, анализируя функцию $F(x)$ при различных сочетаниях экспериментальных k_{min} и k_{max} , возможно определить взаимные расстояния между особыми точками, а также знаки скачков $\Delta^{(n)}(z_i)$ в этих точках.

Далее искомым профилем поляризуемости параметризуется ступенчатым распределением

$$\chi(z_1, \dots, z_M) = \sum_{m=1}^M \Delta^n(z_m)H(z - z_m), \quad (9)$$

где $H(z)$ — функция Хэвисайда [71], с фиксированным положением особых точек $\Delta^1(z_j)$ и числом ступеней $M \sim 100$. Коэффициент отражения $R_c(k, \chi(z_1) \dots \chi(z_M))$ от такой структуры был рассчитан согласно рекуррентным соотношениям Парратта [72]. При этом расчетная кривая отражения R_c подгонялась к экспериментально измеренной R путем численной оптимизации расчетного профиля $\chi(z_1 \dots z_M)$, а целевая функция невязки имела следующий вид:

$$MF(\chi_1, \dots, \chi_M) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{R(q_i) - R_c(q_i)}{R(q_i)} \right]^2 + P_1 \sum_{j \neq j_1, \dots, j_m}^{M-1} (\chi_{j-1} + \chi_{j+1} - 2\chi_j)^2 + P_2 \sum_{j=j_1 \dots j_m}^m (\chi_{j+1} - \chi_j), \quad (10)$$

где N — число экспериментальных точек, $j_1 \dots j_m$ — положение особых точек, $P_{1,2} \approx 10^9$ — параметры, регулирующие точность подгонки.

Полученный таким образом профиль поляризуемости $\chi(z)$ однозначно задает распределение электронной концентрации $\rho(z)$ по оси z с помощью соотношения $\rho(z) \approx 2\pi\chi(z)/(r_0\lambda^2)$ [73].

Анализ диффузного рассеяния проводился в рамках теории возмущений по величине функции $\zeta(\mathbf{p}, z)$, описывающей рельеф поверхности (ее шероховатость) в плоскости границы раздела золь–воздух $\mathbf{p} = (x, y)$. Для конформных шероховатостей (функция ζ не зависит от распределения поляризуемости по оси z и $\langle \zeta(\mathbf{p}) \rangle = 0$) двумерное распределение интенсивности рассеяния от поверхности (индикатриса рассеяния) с точностью до членов порядка ζ^2 имеет вид [18, 64]

$$I_d(\mathbf{k}_{in}, \mathbf{k}_{sc}) = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2 \sin \alpha} \times \left| \int \psi_0(z, k_{in})\psi_0(z, k_{sc}) \frac{d\varepsilon}{dz} dz \right|^2 \bar{C}(\nu), \quad (11)$$

где $k_{in} = k_0 \sin \alpha$, а $k_{sc} = k_0 \sin \beta$.

Здесь $\bar{C}(\nu)$ — функция спектральной плотности мощности высот шероховатости (power spectral density function) [74], которая представляет собой фурье-образ (спектр) автокорреляционной функции рельефа:

$$\bar{C}(\nu) = \int \langle \zeta(0)\zeta(\mathbf{p}) \rangle \exp(2\pi i \nu \mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (12)$$

и зависит от модуля ν вектора пространственной частоты $\nu = 1/|\mathbf{p}| = q_y/(2\pi)$. При этом квадрат среднеквадратичной высоты шероховатости σ^2 может быть рассчитан следующим образом:

$$\sigma^2 = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \bar{C}(\nu) d\nu. \quad (13)$$

Пусть $\psi_0(z, k)$ — распределение комплексной амплитуды волны в образце, соответствующее решению одномерного волнового уравнения с граничными условиями

$$\psi_0(z, k) = \begin{cases} e^{ikz} + r(k)e^{-ikz}, & z \rightarrow -\infty, \\ t(k)e^{iQz}, & z \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (14)$$

где $r(k)$ и $t(k)$ — комплексные амплитудные коэффициенты отражения и пропускания структуры, а $Q = \sqrt{k^2 - k_0^2 \chi(z)}$ — значение волнового вектора в глубине подложки.

Для слоистого распределения $\chi(z)$, описываемого уравнением (9), функция ψ_0 может быть рассчитана численно как сумма амплитуд отражения \bar{R} и пропускания \bar{T} в слоях структуры согласно итерационным формулам [72, 75]

$$\bar{R}_{j+1} = \frac{1}{t_{j+1,j}} \left[\bar{T}_j r_{j+1,j} e^{-i(Q_{j+1}+Q_j)z_j} + \bar{R}_j e^{-i(Q_{j+1}-Q_j)z_j} \right], \quad (15)$$

$$\bar{T}_{j+1} = \frac{1}{t_{j+1,j}} \left[\bar{R}_j r_{j+1,j} e^{i(Q_{j+1}+Q_j)z_j} + \bar{T}_j e^{i(Q_{j+1}-Q_j)z_j} \right], \quad (16)$$

где $Q_j = \sqrt{k^2 - k_0^2 \chi(z_j)}$ — значение волнового вектора в j -м слое,

$$r_{ji} = \frac{Q_j - Q_i}{Q_j + Q_i}, \quad t_{ji} = \frac{2Q_i}{Q_j + Q_i}$$

— френелевские коэффициенты соответственно отражения и пропускания для границ раздела слоев.

Когда в анализируемой структуре присутствуют дополнительные границы раздела на глубине, меньшей характерной глубины проникновения излучения в области полного внешнего отражения $d_\lambda \approx \lambda/(2\pi\alpha_c) \approx 80 \text{ \AA}$ (см., например, [75]), в распределении I_d появляются дополнительные компоненты, связанные с интерференцией излучения, рассеянного на этих интерфейсах. В случае одиночной пленки толщиной h на подложке двумерная индикатриса рассеяния, следуя [66, 76], принимает вид

$$I_d(\mathbf{k}_{in}, \mathbf{k}_{sc}) = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2 \sin \alpha} \times \left[|A_0|^2 \bar{C}_0(\nu) + |A_h|^2 \bar{C}_h(\nu) + 2 \operatorname{Re} [A_0 A_h^*] \sqrt{\bar{C}_0(\nu) \bar{C}_h(\nu)} K(\mathbf{p}) \right], \quad (17)$$

где электродинамические факторы

$$A_{(0,h)} = \int_{(0,h)-\sigma}^{(0,h)+\sigma} \psi_0(z, k_{in}) \psi_0(z, k_{sc}) \frac{d\varepsilon}{dz} dz, \quad (18)$$

$\bar{C}_0(\nu)$ и $\bar{C}_h(\nu)$ — спектры высот шероховатости соответственно внешней и внутренней границ раздела,

$$K(\mathbf{p}) = \langle \zeta(\mathbf{p}, 0) \zeta(\mathbf{p}, h) \rangle \leq 1$$

— статистический коэффициент корреляции между их рельефами.

Таким образом, анализ шероховатости нескольких границ раздела сводится к одновременному численному поиску трех функций, \bar{C}_0 , \bar{C}_h , K , путем подгонки расчетного распределения рассеяния I_d к экспериментальному I . С математической точки зрения, оптимизация системы линейных алгебраических уравнений представляет собой плохо обусловленную задачу, т.е. наличие даже небольших экспериментальных погрешностей во входных данных приводит к существенным ошибкам решения. В случае твердотельных образцов, как было показано в работах [76, 77], возможно упростить эту процедуру. Например, можно независимо измерить шероховатость поверхности подложки \bar{C}_h перед нанесением пленки и затем провести несколько измерений при различных значениях углов α и β , при которых электродинамический фактор интерференционной компоненты $A_0 A_h^*$ обращается в нуль. Однако для нашего случая поверхности жидкости измерение «чистой подложки» неосуществимо, а множественные измерения распределений рассеяния, различающиеся только значением угла скольжения α , существенно осложняются стохастическими факторами (температурными флуктуациями на поверхности образца, нестабильностью зондирующего луча и т.д.).

Как следствие, для получения устойчивого решения необходимо дополнительно регуляризовать процедуру подгонки. Для этого мы в качестве искоемых функций использовали безмодельные распределения $f_{(a,b,c)}(\nu)$, такие что

$$\bar{C}_{(0,h)}(\nu) = \bar{C}_p \exp[f_{(a,b)}(\nu)],$$

где \bar{C}_p — начальное приближение, а коэффициент корреляции

$$K(\nu) = \exp(-f_c^2(\nu)).$$

В качестве начального приближения \bar{C}_p был использован теоретический спектр высот шероховатости, рассчитанный в рамках формализма капиллярных волн [78]. Также в качестве регуляризации было наложено дополнительное условие гладкости искоемых решений так, что целевая функция невязки имела вид

$$\begin{aligned}
MF(f_a, f_b, f_c) = & \\
= \sum_n \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{I(\alpha, \beta_i) - I_d(\alpha, \beta_i, f(a,b,c))}{I(\alpha, \beta_i)} \right]^2 \right] + & \\
+ P_3 \sum_{j=(0,h)}^{\nu_{max}} \int_{\nu_{min}} \left[\frac{d \lg \bar{C}_j(\nu)}{d \lg \nu} \right]^2 d\nu + & \\
+ P_4 \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \left[\frac{dK(\nu)}{d\nu} \right]^2 d\nu, & \quad (19)
\end{aligned}$$

где I и I_d — экспериментальные и рассчитанные по (17) кривые рассеяния при угле скольжения α , N — число экспериментальных точек для каждого измерения, $P_3, P_4 \approx 10^3$ — параметры, регулирующие точность подгонки.

С одной стороны, поскольку поверхность жидкости является изотропной, для расчета функции $\bar{C}(\nu)$ достаточно рассмотреть только индикатрису в плоскости отражения ($\phi = 0$). При этом не надо делать каких-либо априорных предположений о статистике распределения ее высот. Требуемая для этого информация о распределении $\chi(z)$ может быть получена из анализа угловой зависимости кривой отражения $R(k)$.

С другой стороны, в экспериментально регистрируемом коэффициенте отражения также присутствует вклад диффузного рассеяния на шероховатостях границ раздела. В рамках теории возмущений по высоте шероховатости с точностью до членов порядка ζ^2 этот вклад выражается следующим образом [18]:

$$\begin{aligned}
R(k) \approx R_0(k) + 2 \operatorname{Re} [r_0^*(k) (\Delta r_1 + \Delta r_2)]; & \\
\Delta r_1 = \frac{ik_0^2}{4k_{in}} \sum_{i=(0,h)} \left[\sigma_i^2 \int_{i-\sigma}^{i+\sigma} \psi_0(z, k_{in}) \frac{d^2 \varepsilon}{dz^2} dz \right], & \quad (20) \\
\Delta r_2 = -\frac{ik_0^4}{8\pi k_{in}} \sum_{i=(0,h)} \left[\int \left(\frac{d\varepsilon}{dz} \right)^2 \times \right. & \\
\left. \times \Psi(z, k_{in}, k_{sc}) \bar{C}_i(\nu) k_{sc} dk_{sc} dz \right], &
\end{aligned}$$

где $(0, h)$ — положение границ раздела,

$$\Psi(z, k_{in}, k_{sc}) = \psi_0^2(z, k_{in}) \frac{\psi_0(z, k_{sc}) \psi_1(z, k_{sc})}{W(k_{sc})}, \quad (21)$$

а $\psi_1(z, k)$ — амплитуда виртуальной волны, «падающей» на границу раздела из глубины образца (может быть рассчитана численно по аналогии с ψ_0 из выражений (15), (16)),

$$W = \psi_0 \psi_1' - \psi_0' \psi_1, \quad R_0(k) = |r_0(k)|^2$$

— коэффициент отражения от поверхности с профилем $\chi(z)$ в отсутствие шероховатости (т.е. $\zeta(\mathbf{p}) \equiv 0$ для любых \mathbf{p}).

Отметим, что в частном случае одиночной границы раздела с конформными шероховатостями, высоты которых распределены по нормальному закону (т.е. $\bar{C}(\nu) \propto 1/\nu^2$), поправка (20) может быть заменена существенно более простой формулой Неве – Кроса [79]:

$$R(k) = R_0(k) \exp \left(-4\sigma^2 k \sqrt{k^2 - k_0^2 \chi} \right), \quad (22)$$

где поляризуемость в объеме золя $\chi \approx 1.1 \cdot 10^{-7}$ для $\lambda \approx 0.17 \text{ \AA}$.

Следует также учесть, что точное значение среднеквадратичной высоты шероховатости σ , согласно (13), определяется в бесконечном диапазоне пространственных частот ν . Это требует проведения измерений индикатрисы диффузного рассеяния I_d при всех возможных значениях q_y . Однако экспериментальные распределения рассеяния всегда измеряются в конечном интервале углов β , что ограничивает доступный для анализа диапазон частот ν . При этом характерные частоты отсечек ν_{min} и ν_{max} определяются, с одной стороны, угловой шириной пика зеркально отраженного излучения, перекрывающего область малых углов $\beta_{min} = \alpha + \Delta\alpha$, и с другой стороны, максимальным значением β_{max} , при котором возможно разделить диффузное рассеяние на шероховатостях поверхности и фоновое рассеяние в объеме золя.

Для рассмотренных в настоящей работе кривых рассеяния интервал значимых углов β составил $0.08^\circ - 1.1^\circ$, что соответствует частотам отсечки $\nu \approx 10^{-5} - 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$. Значение σ , полученное интегрированием рассчитанного спектра $\bar{C}(\nu)$ в этих пределах, далее обозначим как «эффективную» высоту шероховатости.

Таким образом, для корректного анализа экспериментальных данных необходимо одновременно учитывать как рассеяние на шероховатостях в ходе восстановления поперечного профиля поляризуемости (электронной концентрации), так и профиль поляризуемости при расчете спектров шероховатости.

Для этого расчеты проводились согласно итерационному алгоритму, предложенному в работе [66]. На каждой итерации сначала проводился поиск особых точек в структуре и реконструкция профиля поляризуемости $\chi(z)$ поверхности на основе экспериментальной кривой отражения $R(k)$ согласно (10). Затем найденный профиль $\chi(z)$ использовался в расчете кривых диффузного рассеяния $I(\mathbf{k}_{in}, \mathbf{k}_{sc})$ согласно (17). Далее искомые спектры высот шероховатости $\bar{C}_{(0,h)}(\nu)$ находились численно согласно (19). После этого проводилась коррекция кривой отражения согласно (20). Наконец, скорректированная кривая отражения использовалась для новой реконструкции профиля поляризуемости на следующей итерации. Эта процедура повторялась до тех пор, пока профили $\chi(z)$ и спектры $\bar{C}(\nu)$, найденные в ходе последующей итерации, не совпадали с результатами предыдущей в пределах 1 %.

Все численные расчеты были реализованы в среде языка Python с использованием библиотек Scientific Python, реализующих стандартный алгоритм Левенберга–Марквардта [80]. Отметим, что для рассмотренных в настоящей работе данных стабильное решение возникает уже после трех-четырёх итераций.

На рис. 12 и 13 показаны рассчитанные спектры шероховатости $\bar{C}(\nu)$ для поверхности зольей 27-нанометровых частиц, обогащенных ионами M^+ , а также восстановленные профили электронной концентрации $\rho(z)$ ($\propto \chi(z)$), нормированные на электронную концентрацию в воде $\rho_w = 0.333 \text{ e}^-/\text{\AA}^3$.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Многие авторы проводят описание шероховатости и корреляционных свойств в приповерхностной структуре жидкости в рамках общепринятой теории капиллярных волн, обусловленных тепловыми флуктуациями на межфазной границе [78, 81–85]. Совместное использование данных рефлектометрии и диффузного рассеяния также применялось нами ранее для определения структур межфазных границ воздух–вода и углеводородная жидкость–вода в рамках модельного капиллярно-волнового подхода [86–89]. В этом случае автокорреляционная функция высот капиллярных волн в плоскости поверхности $G(\zeta_{xy})$ определяется силой поверхностного натяжения γ :

$$G(\zeta_{xy}) = \frac{k_B T}{2\pi\gamma} K_2(\zeta_{xy}\zeta_{||}), \quad (23)$$

$$\zeta_{xy} = \mathbf{r}(x, y), \quad \zeta_{||} = \sqrt{\frac{\rho g}{\gamma}},$$

где ρ — объемная плотность жидкости, $g = 9.81 \text{ м/с}^2$ — ускорение свободного падения, $K_2(x)$ — функция Макдональда [71, 83]. Применяв (12), несложно получить выражение для спектральной плотности мощности капиллярных шероховатостей:

$$\bar{C}_{cap}(\nu) = \frac{k_B T}{4\pi^2\gamma} \frac{1}{\nu^2 + \zeta_{||}^2}. \quad (24)$$

Модельный спектр высот капиллярных шероховатостей гидрозоля, рассчитанный для силы поверхностного натяжения $\gamma = 74 \pm 1 \text{ мН/м}$ при температуре $T = 298 \text{ К}$, представлен сплошными кривыми на рис. 12. Значение эффективной капиллярной высоты шероховатости, рассчитанное аналитически по (24) и (13) в интервале $\nu = 10^{-5} - 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, составляет $\sigma_{cap} \approx 3.0 \text{ \AA}$, что согласуется со значениями, приведенными ранее [52], и практически не зависит от ионного состава раствора.

Отметим, что интегрирование \bar{C}_{cap} в области $\nu > 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$ дает значение $\delta\sigma \approx 0.09 \text{ \AA}$, таким образом, оценочная погрешность в расчете эффективной высоты шероховатости, обусловленная потерей высокочастотной области спектра, составляет порядка 3%. Однако расчетные спектры шероховатостей внешней поверхности компактного слоя 1 $\bar{C}_0(\nu)$ и границы компактный слой–диффузный слой (слой 1–слой 2 на рис. 4) $\bar{C}_h(\nu)$ для золя, обогащенного Na^+ (соответственно штриховая и пунктирная линии на рис. 12а) существенно отклоняются от предсказания теории капиллярных волн (сплошная линия) [20, 78]. В случае скрытого интерфейса h это различие носит количественный характер и соответствует эффективному значению силы поверхностного натяжения, равному примерно 21 мН/м. Оно, предположительно, обусловлено тем, что различие в электронных концентрациях у слоя 1 и слоя 2 почти в 8 раз меньше, чем разность между концентрацией в слое 1 и внешней средой (воздух), и указывает, возможно, на наличие некоторой собственной структуры у скрытой границы раздела шириной в несколько ангстрем. Отметим, что ранее об отклонении интегральных характеристик σ спектров $\bar{C}(\nu)$ от расчетных значений теории капиллярных волн сообщалось для границ масло–вода, например, в работах [85, 90].

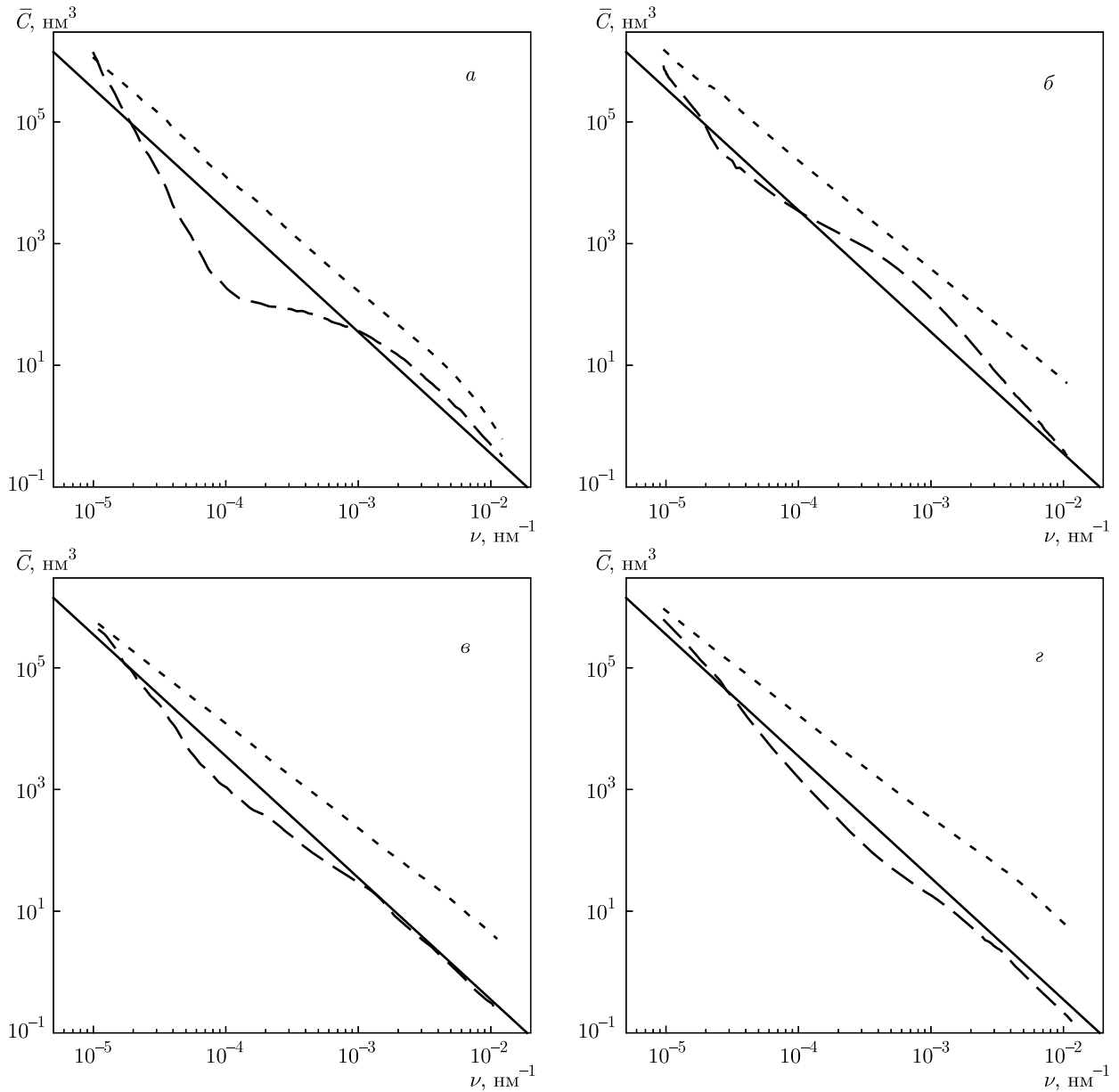


Рис. 12. Спектры шероховатости, рассчитанные для поверхности золей 27-нанометровых частиц стабилизированного NaOH (а), а также обогащенных KOH (б), RbOH (в) и CsOH (г). Сплошные линии — теоретический спектр капиллярных волн $\bar{C}_{cap}(\nu)$ [78], штриховые линии — спектры шероховатости границ раздела воздух–компактный слой $\bar{C}_0(\nu)$ и пунктирные линии — спектры границы компактный слой–диффузный слой $\bar{C}_h(\nu)$

При этом спектральные особенности $\bar{C}(\nu)$, обуславливающие это отклонение, в этих работах не уточняются, а интерпретация сводится к предположению о наличии некой собственной структуры.

В свою очередь, шероховатость внешней границы раздела $\bar{C}_0(\nu)$ качественно отличается от предсказания теории капиллярных волн в области пространственных частот $\nu < 10^{-3} \text{ nm}^{-1}$ и прибли-

жается к нему при $\nu > 10^{-3} \text{ nm}^{-1}$. Данный эффект наблюдается для всех золей, допированных ионами M^+ , хотя и в разной степени (рис. 12). При этом значения σ , рассчитанные в экспериментально доступном интервале пространственных частот $\nu = 10^{-5} - 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$, составили $3.4 \pm 0.2 \text{ \AA}$ для поверхности золя, стабилизированного Na^+ ; $3.5 \pm 0.2 \text{ \AA}$ для подложки, обогащенной K^+ ; $2.7 \pm 0.1 \text{ \AA}$

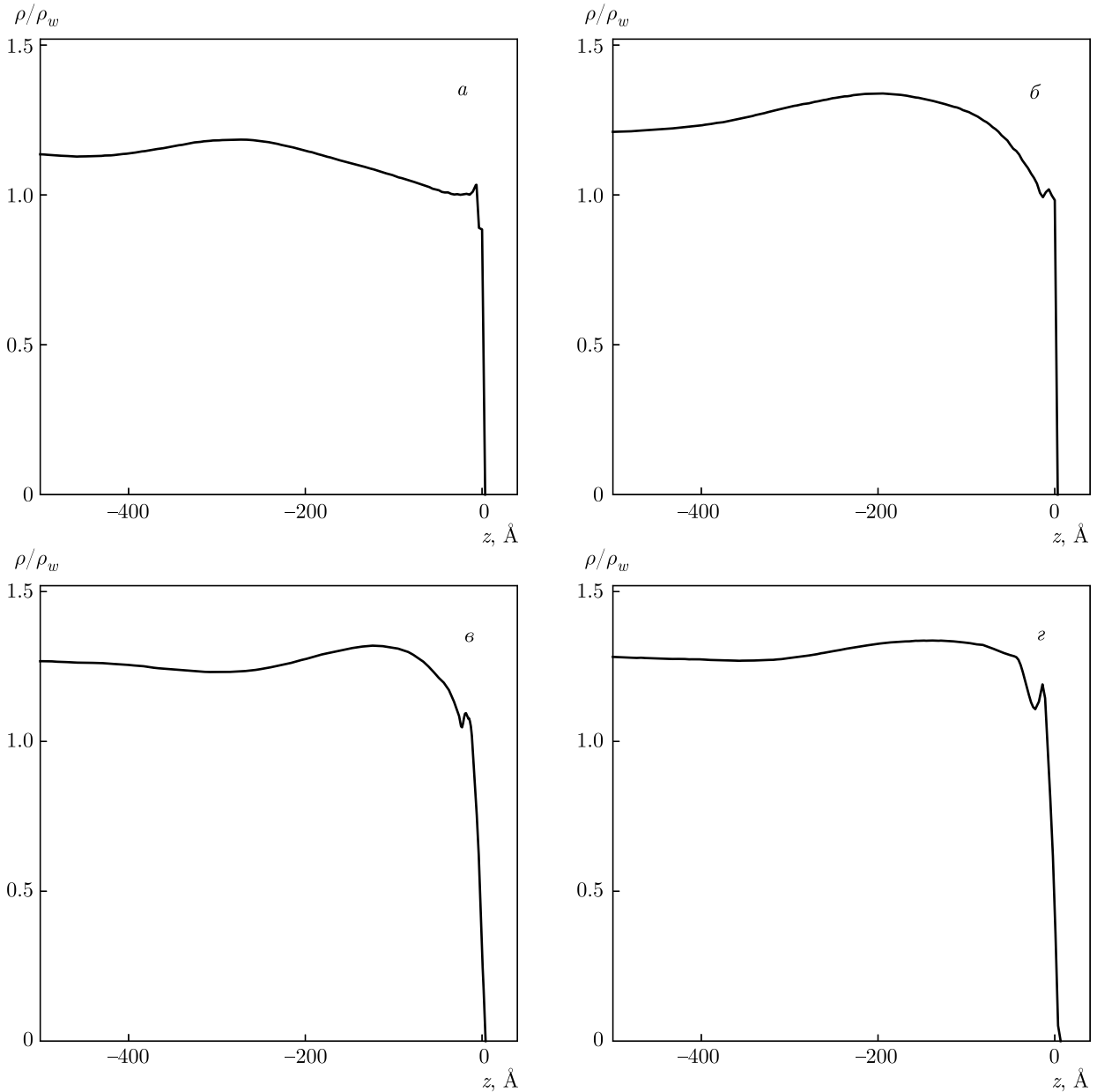


Рис. 13. Восстановленные профили распределений $\rho(z)$, нормированные на электронную концентрацию в воде $\rho_w = 0.333 \text{ e}^-/\text{\AA}^3$, для поверхности зольей 27-нанометровых частиц стабилизированного NaOH (а) и обогащенных KOH (б), RbOH (в) и CsOH (г)

и $3.2 \pm 0.2 \text{ \AA}$ для подложек соответственно с Rb^+ и Cs^+ .

В литературе аналогичные случаи, но применительно к твердым поверхностям, обсуждаются в рамках скейлинговой теории эволюции шероховатости при росте и травлении [91, 92]. В рамках этого подхода спектр высот шероховатости поверхности $\bar{C}(\nu)$ рассматривается как суперпозиция двух компонент с различными функциями распределе-

ния высот, где низкочастотная компонента соответствует шероховатости исходной подложки, а высокочастотная — «возмущающей» шероховатости, формируемой травлением либо напылением. Модельное описание такой поверхности представляет собой сумму нескольких корреляционных K -спектров [93]:

$$\bar{C}(\nu) = \frac{A(\sigma\xi)^2}{\pi(1 + (\xi\nu)^2)^{(1+H)}}, \quad (25)$$

Таблица. Параметры аппроксимации экспериментальных спектров шероховатости \bar{C}_0 суммой двух K -корреляционных спектров (25)

Допант	$\sigma, \text{Å}$	H_1	H_2	$A_2 \cdot 10^{-3}$	$\xi_2, \text{мкм}$
Na ⁺	3.4	0.81	0.11	2.1	1.1
K ⁺	3.5	0.34	0.28	5.5	1.7
Rb ⁺	2.7	0.34	0.09	1.6	1.8
Cs ⁺	3.2	0.33	0.1	0.9	0.8

Примечание. A_2 — коэффициент амплитудной отсечки при $\nu \rightarrow 0$, ξ_2 — критическая корреляционная длина, H_1, H_2 — статические экспоненты

где A — коэффициент амплитудной отсечки при $\nu \rightarrow 0$, ξ — критическая корреляционная длина, соответствующая «перегибу» на кривой \bar{C} , H — статическая экспонента, определяющая скорость убывания \bar{C} при $\nu \rightarrow \infty$.

Для оценки характерных статистических параметров шероховатости мы провели аппроксимацию спектров высот внешней поверхности золя \bar{C}_0 суммой двух аналитических кривых вида (25)

$$\bar{C}_1(\nu, A_1, \xi_1, H_1) + \bar{C}_2(\nu, A_2, \xi_2, H_2),$$

где в качестве параметра σ была принята эффективная шероховатость, рассчитанная по экспериментальным спектрам. Функции C_1 и C_2 показаны на рис. 14 соответственно штриховыми и пунктирными линиями. Значения подгоночных параметров для этих кривых приведены в таблице. Отметим, что для компоненты \bar{C}_1 (штриховые линии на рис. 14), описывающей область низких пространственных частот ($\nu < 10^{-4} \text{ нм}^{-1}$), корреляционная длина лежит заведомо вне экспериментального интервала частот ($1/\xi_1 \ll \nu_{min}$). По этой причине A_1 и ξ_1 не могут быть однозначно определены из имеющихся данных и выступают в качестве «свободных параметров» (например, A_1 может варьироваться в интервале 10^3 –1 при $\xi_1 \sim 1000 \text{ мкм}$).

Оценочное значение статической экспоненты в области низких частот H_1 для ионов Na⁺ составляет примерно 0.81, что существенно превышает такую для ионов Rb⁺, K⁺ и Cs⁺ (около 0.34). В свою очередь, в области высоких частот ($\nu > 10^{-4} \text{ нм}^{-1}$) статическая экспонента H_2 и критическая корреляционная длина ξ_2 существенно отличаются для золь допированных K⁺ и Rb⁺, но почти совпадают для золь допированных Na⁺ и Cs⁺. Таким образом, шероховатость компактного слоя на поверхности кремнезоля можно охарактеризовать как супер-

позицию исходной шероховатости ионного слоя, статистическое распределение высот которой отклоняется от строгого нормального закона, и возмущающей стохастической шероховатости, подчиняющейся модели капиллярных волн, при этом вклад капиллярной составляющей выше в присутствии более тяжелых ионов.

На всех восстановленных профилях электронной плотности (рис. 13) присутствует пик толщиной $d = 12$ –20 Å вблизи поверхности, соответствующий слою адсорбированных ионов (слои 1 и 2 на рис. 4). Оценка поверхностной концентрации ионов Na⁺ и OH[−] составляет $\Theta = \Phi/n_e \sim 10^{19} \text{ м}^{-2}$, где

$$\Phi = \int_{-d}^0 \rho(z) dz$$

— интегральная электронная концентрация, а $n_e \approx 10$ — число электронов на ион (катион Na⁺ и молекула H₂O содержат по 10 электронов, а в анионе OH[−] их 8). При обогащении золя гидроксидами тяжелых металлов наблюдается увеличение Φ в приповерхностном слое, которое соответствует $\delta\Theta = (5 \pm 1) \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2}$ для Rb⁺ ($n_e = 36$) или Cs⁺ ($n_e = 54$). Эти величины хорошо согласуются с полученными ранее в рамках капиллярно-волновых моделей [46, 51, 52].

Итак, данные рефлектометрии указывают на то, что поверхность гидрозоль в интервале pH от 9 до 12 заряжена положительно в отличие от границы водного раствора щелочи или соли, которая согласно молекулярно-динамическим расчетам заряжена отрицательно [94–96]. Замещение большими щелочными ионами катионов Na⁺ с меньшим радиусом находится в качественном согласии с зависимостью одноионной электростатической свободной энергии от ионного радиуса (4), полученной ранее Харкацем и Улstrupом [32, 33]. Среднее расстояние между ионами в компактном слое (см. рис. 4) составляет порядка 5–6 Å, что меньше, чем радиус Бьерума для одновалентных ионов в водной среде, равный примерно 7 Å [97]. В такой системе, в принципе, возможна реализация классического кулоновского кристалла Вигнера [98, 99]. В действительности, многие авторы считают, что адсорбированные с такой высокой плотностью ионы, например, на поверхности заряженных частиц (макроионов) в коллоидном растворе, образуют сильнокоррелированную двумерную жидкость, в которой ближний порядок близок к классическому вигнеровскому кристаллу [100–102]. Отметим также, что трехмерные и двумерные кулоновские кристаллы из классических

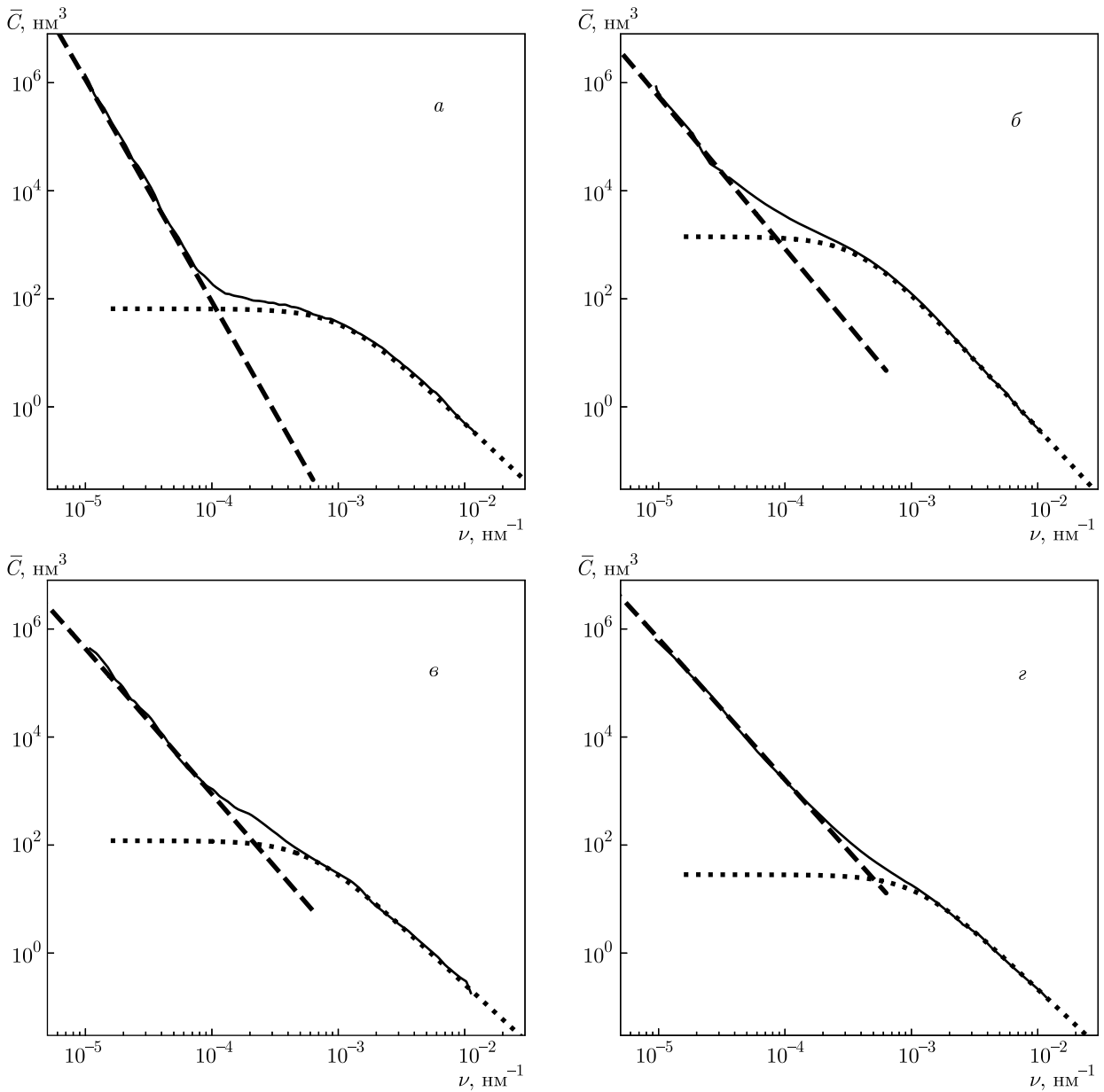


Рис. 14. Аппроксимация шероховатости поверхности золей 27-нанометровых частиц стабилизированного NaOH (а), а также обогащенных KOH (б), RbOH (в) и CsOH (г). Сплошные линии — экспериментальные спектры $\bar{C}_0(\nu)$, штриховые линии — модельные спектры в области низких частот \bar{C}_1 , а пунктирные линии — модельные спектры в области высоких частот \bar{C}_2

частиц также наблюдаются экспериментально в пылевой плазме, в системе микросфер и кластерах, например, ионов Be^+ в ловушке Пеннинга [103–105].

Согласно имеющимся данным по скользящей дифракции, трансляционная длина корреляции между ионами Na^+ на поверхности стабилизированного NaOH золя составляет менее 30 \AA [51]. Это указывает, скорее, на кластеризацию адсорбированных катионов, например, в слое 1, чем на формирова-

ние протяженной кристаллической структуры. Возможная картина образования и структура двумерных кластеров — островов Вигнера обсуждается, например, в работе [106]. Наблюдаемая особенность в спектре высот шероховатости, по нашему мнению, может свидетельствовать о дроблении слоя 1 на двумерные ионные кластеры с характерным линейным размером намного меньше ξ_2 . При этом остается не до конца ясным вопрос о пространственном распре-

делении анионов OH^- в приповерхностной структуре золя. Возможно, дальнейшие эксперименты по малоугловому скользющему рассеянию и вычисления молекулярной динамики применительно к этой системе смогут прояснить этот вопрос.

Таким образом, по данным рефлектометрии и диффузного рассеяния, собранным в условиях полного внешнего отражения, получена информация о статистических свойствах поверхности жидкости без использования какой-либо априорной информации о ее структуре. Наше систематическое исследование демонстрирует пример принципиального отличия корреляционных свойств межслойных границ в приповерхностной структуре жидкости от предсказаний общепринятой теории капиллярных волн [20]. С применением самосогласованного подхода восстановлены профили электронной концентрации и получены спектры корреляционной функции высот шероховатости. Согласно этому анализу величина плотности катионов щелочных металлов на поверхности золя, равная примерно $5 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2}$ хорошо соответствует данным работы с использованием капиллярно-волнового подхода [52]. Однако установленные из эксперимента спектры высот принципиально отклоняются от предсказаний теории капиллярных волн в области низких пространственных частот $\nu < 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$. Аппроксимация спектров высот шероховатости суммой двух K -корреляционных распределений указывает на переход от собственного спектра шероховатости слоя ионов щелочных металлов к капиллярной шероховатости поверхности жидкости в области корреляционной длины, равной примерно 1 мкм. Наблюдаемая особенность в спектрах и данные скользящей дифракции [51] в совокупности свидетельствуют о дроблении компактного слоя щелочных ионов на двумерные кластеры — острова Вигнера.

Благодарности. Авторы благодарны Е. Изерн (Helena Iern), Т. Бусласу (Thomas Buslaps) и Ф. Русселло (Florian Russello) (ESRF) за помощь в подготовке экспериментов, а также Х. Райхерту (Harald Reichert), И. В. Кожевникову и Ю. А. Ермакову за искренний интерес и полезные обсуждения результатов экспериментов.

Финансирование. Эксперименты на станции ID31 проводились в рамках исследовательских проектов SC-4246, SC-4461 и SC-4845 Европейского источника синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция. Работа выполнена при поддержке

Министерства науки и высшего образования в рамках государственных заданий для институтов Российской академии наук. Теоретическая часть работы выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-12-00108).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Becher, *Emulsions: Theory and Practice*; 3rd ed., American Chemical Society and Oxford University Press, Washington, D.C. (2001).
2. C. M. Starks, C. L. Liotta, and M. Halpern, *Phase Transfer Catalysis*, Chapman & Hall: New York (1994).
3. E. Bitto, M. Li, A. M. Tikhonov, M. L. Schlossman, and W. Cho, *Biochemistry* **39**, 13469 (2000).
4. Ю. А. Ермаков, В. А. Асадчиков, Ю. В. Волков, А. Д. Нуждин, Б. С. Рощин, В. Хонкимаки, А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ **109**, 340 (2019).
5. I. Benjamin, *Chem. Rev.* **96**, 1449 (1996).
6. Yu. B. Vysotsky, E. S. Kartashynska, E. A. Belyaeva, V. B. Fainerman, D. Vollhardt and R. Miller, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 28901 (2015).
7. A. Moghimikheirabadi, L. M. Sagis, and P. Ilg, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 16238 (2018).
8. P. S. Pershan and M. L. Schlossman, *Liquid Surfaces and Interfaces: Synchrotron X-ray Methods*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, England (2012).
9. J. Als-Nielsen, *Synchrotron Radiation News* **12**(2), 5 (1999).
10. Yu. A. Ermakov, V. E. Asadchikov, B. S. Roschin, Yu. O. Volkov, D. A. Khomich, A. M. Nesterenko, and A. M. Tikhonov, *Langmuir* **35**, 12326 (2019).
11. V. M. Kaganer, H. Mohwald, and P. Dutta, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 779 (1999).
12. M. L. Schlossman and A. M. Tikhonov, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **59**, 153 (2008).
13. А. М. Тихонов, ЖЭТФ **137**, 1209 (2010).
14. M. F. Toney, J. N. Howard, J. Richer, G. L. Borges, J. G. Gordon, O. R. Melroy, D. G. Wiesler, D. Yee, and L. B. Sorensen, *Nature (London)* **444**, 368 (1994).

15. M. J. Regan, P. S. Pershan, O. M. Magnussen, B. M. Ocko, M. Deutsch, and L. E. Berman, *Phys. Rev. B* **55**, 15874 (1997).
16. P. Dutta, J. B. Peng, B. Lin, J. B. Ketterson, M. Prakash, P. Georgopoulos, and S. Ehrlich, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2228 (1987).
17. T. Graham, *Trans. Roy. Soc. (London)* **151**, 183 (1861).
18. И. В. Кожевников, *Кристаллография* **57**, 558 (2012).
19. А. М. Тихонов, В. Е. Асадчиков, Ю. О. Волков, Б. С. Рошин, В. Хонкимаки, М. Бланко, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 394 (2018).
20. F. P. Buff, R. A. Lovett, and F. H. Stillinger, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 621 (1965).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики т. VIII, Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
22. C. Wagner, *Phys. Z.* **25**, 474 (1924).
23. L. Onsager and N. N. T. Samaras, *J. Chem. Phys.* **2**, 528 (1934).
24. G. Gouy, *J. Phys.* **9**, 457 (1910).
25. D. L. Chapman, *Phil. Mag.* **25**, 475 (1913).
26. E. J. W. Verwey, and K. F. Nielsen, *Phil. Mag.* **28**, 435 (1935).
27. O. Stern, *Z. Elektrochem.* **30**, 508 (1924).
28. A. G. Volkov, D. W. Dreame, D. L. Tanelli, and V. S. Markin, *Progr. Surf. Sci.* **53**, 1 (1996).
29. A. N. Frumkin, *Z. Phys. Chem.* **34**, 109 (1924).
30. А. Н. Фрумкин, *Сборник работ по чистой и прикладной химии, НХТИ, Петроград* (1924), стр. 106.
31. V. S. Markin and A. G. Volkov, *J. Phys. Chem. B* **106**, 11810 (2002).
32. Y. I. Kharkats and J. Ulstrup, *J. Electroanal. Chem.* **308**, 17 (1991).
33. J. Ulstrup and Yu. I. Kharkats, *Russ. J. Electrochem.* **29**, 299 (1993).
34. B. S. Gourary and F. S. Adrian, *Sol. St. Phys.* **10**, 127 (1960).
35. J. E. Huheey, E. A. Keiter, and R. L. Keiter, *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*, 4th ed., Harper Collins, New York, USA (1993).
36. K. Wu, M. J. Iedema, G. K. Schenter, and J. P. Cowin, *J. Phys. Chem. B* **105**, 2483 (2001).
37. B. S. Gourary and F. S. Adrian, *Sol. St. Phys.* **10**, 127 (1960).
38. E. Sloutskin, J. Baumert, B. M. Ocko, I. Kuzmenko, A. Checco, L. Tamam, E. Ofer, T. Gog, and M. Deutsch, *J. Chem. Phys.* **126**, 054704 (2007).
39. J. W. Ryznar, *Colloidal Chemistry: Theoretical and Applied*, Vol. VI, ed. by J. B. Alexander, Reinhold Publishing Corporation, New York, USA (1946).
40. R. K. Iler, *The Chemistry of Silica*, Wiley-Interscience, New York (1979).
41. A. M. Tikhonov, *J. Phys. Chem. B* **110**, 2746 (2006).
42. G. A. Parks, *Chem. Rev.* **65**, 177 (1965).
43. R. H. Yoon, T. Salman, and G. Donnay, *J. Colloid Interface Sci.* **70**, 483 (1979).
44. F. Dumont, J. Warlus, and A. Watillon, *J. Colloid Interface Sci.* **138**, 543 (1990).
45. A. M. Tikhonov, *J. Chem. Phys.* **124**, 164704 (2006).
46. A. M. Tikhonov, *J. Phys. Chem. C* **111**, 930 (2007).
47. V. S. Pingali, T. Takiue, G. Guangming, A. M. Tikhonov, N Ikeda, M. Aratono, and M. L. Schlossman, *J. Disper. Scie. Techn.* **27**, 715 (2006).
48. A. M. Tikhonov and M. L. Schlossman, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 375101 (2007).
49. E. S. Wu and W. W. Webb, *Phys. Rev. A* **8**, 2065 (1973).
50. J. D. Weeks, *J. Chem. Phys.* **67**, 3106 (1977).
51. A. M. Tikhonov, *J. Chem. Phys.* **126**, 171102 (2007).
52. A. M. Tikhonov, *J. Chem. Phys.* **130**, 024512 (2009).
53. В. С. Эдельман, *УФН* **130**, 675 (1980).
54. A. Madsen, O. Konovalov, A. Robert, and G. Grubel, *Phys. Rev. E* **64**, 061406 (2001).
55. А. М. Тихонов, В. Е. Асадчиков, Ю. О. Волков, Б. С. Рошин, И. С. Монахов, И. С. Смирнов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 880 (2016).
56. В. Е. Асадчиков, В. В. Волков, Ю. О. Волков, К. А. Дембо, И. В. Кожевников, Б. С. Рошин, Д. А. Фролов, А. М. Тихонов, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 625 (2011).
57. А. Е. Крюкова, А. С. Козлова, П. В. Конарев, В. В. Волков, В. Е. Асадчиков, *Кристаллография* **63**, 524 (2018).

58. L. H. Allen and E. Matijevic, *J. Colloid Interface Sci.* **31**, 287 (1969).
59. J. Depasse and A. Watillon, *J. Colloid Interface Sci.* **33**, 430 (1970).
60. A. C. J. H. Johnson, P. Greenwood, M. Hagstrom, Z. Abbas, and S. Wall, *Langmuir* **24**, 12798 (2008).
61. В. В. Волков, частное сообщение.
62. V. Honkimäki, H. Reichert, J. Okasinski, and H. Dosch, *J. Synchrotron Rad.* **13**, 426 (2006).
63. C. Ponchut, J. Rigal, J. Clément, E. Papillon, A. Homs, and S. Petitdemange, *J. Instrumentation* **6**, C01069 (2011).
64. I. V. Kozhevnikov and M. V. Pyatakhin, *J. X-ray Sci. Technol.* **8**, 253 (2000).
65. I. V. Kozhevnikov, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **508**, 519 (2003).
66. I. V. Kozhevnikov, L. Peverini, and E. Ziegler, *Phys. Rev. B* **85**, 125439 (2012).
67. А. М. Тихонов, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 394 (2010).
68. А. М. Тихонов, В. Е. Асадчиков, Ю. О. Волков, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 536 (2015).
69. А. М. Тихонов, Ю. О. Волков, *ЖЭТФ* **156**, 440 (2019).
70. И. В. Кожевников, *Теория дифракции рентгеновского излучения от неоднородных слоистых сред*, Дис. док. физ. мат. наук, ИК РАН (2013).
71. R. Kanwal, *Generalized Functions: Theory and Technique*, 2nd ed., Birkhäuser (1998).
72. L. G. Parratt, *Phys. Rev.* **95**, 359 (1954).
73. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **54**, 181 (1993).
74. J. C. Stover, *Optical Scattering: Measurement and Analysis*, 3rd ed., SPIE Press (2012).
75. А. В. Виноградов, И. А. Брытов, А. Я. Грудский, *Зеркальная рентгеновская оптика*, Машиностроение, Ленинград (1989).
76. А. Yu. Karabekov and I. V. Kozhevnikov, *J. X-ray Sci. Technol.* **4**, 37 (1993).
77. А. Yu. Karabekov and I. V. Kozhevnikov, *Proc. SPIE* **2453**, 176 (1995).
78. A. Braslau, P. S. Pershan, G. Swislow, B. M. Ocko, and J. Als-Nielsen, *Phys. Rev. A* **38**, 2457 (1988).
79. L. Nevot and P. Croce, *Rev. Phys. Appl.* **15**, 761 (1980).
80. J. Nocedal and S. Wright, *Numerical Optimization*, 2nd ed., Springer, New York (2006).
81. D. K. Schwartz, M. L. Schlossman, E. H. Kawamoto, G. J. Kellogg, P. S. Pershan, and B. M. Ocko, *Phys. Rev. A* **41**, 5687 (1990).
82. M. Sanyal, S. Sinha, K. Huang, and B. Ocko, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 628 (1991).
83. B. R. McClain, D. D. Lee, B. L. Carvalho, S. G. J. Mochrie, S. H. Chen, and J. D. Litster, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 246 (1994).
84. P. S. Pershan, *Synchrotron Radiation News* **12**, #2, 17 (1999).
85. D. M. Mitrinovic, A. M. Tikhonov, M. Li, Z. Huang, and M. L. Schlossman, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 582 (2000).
86. M. Li, D. J. Chaiko, A. M. Tikhonov, and M. L. Schlossman, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5934 (2001).
87. M. Li, A. M. Tikhonov, and M. L. Schlossman, *Europhys. Lett.* **58**, 80 (2002).
88. A. M. Tikhonov, M. Li, and M. L. Schlossman, *J. Phys. Chem. B* **105**, 8065 (2001).
89. А. М. Тихонов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 318 (2016).
90. А. М. Тихонов, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 743 (2017).
91. F. Family and T. Vicsek, *J. Phys. A* **18**, L75 (1985).
92. A.-L. Barabasi and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
93. G. Palasantzas, *Phys. Rev. B* **48**, 14472 (1993).
94. P. Jungwirth and D. J. Tobias, *J. Phys. Chem. B* **106**, 6361 (2002).
95. C. D. Wick and L. X. Dang, *J. Chem. Phys.* **133**, 024705 (2010).
96. M. Manciu and E. Ruckenstein, *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* **404**, 93 (2012).
97. М. А. Воротынцева, С. Н. Иванов, *ЖЭТФ* **88**, 1729 (1985).
98. E. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).

- 99.** E. Wigner, Transactions of the Faraday Society **34**, 678 (1938).
- 100.** I. Rouzina and V. A. Bloomfield, J. Phys. Chem. **100**, 9977 (1996).
- 101.** N. Gronbech-Jensen, R. J. Mashl, R. F. Bruinsma, and W. M. Gelbart, Phys. Rev. Lett. **78**, 2477 (1997).
- 102.** B. I. Shklovskii, Phys. Rev. Lett. **82**, 3268 (1999).
- 103.** J. H. Chu and I. Lin, Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
- 104.** A. Melzer, Phys. Rev. E **67**, 016411 (2003).
- 105.** J. N. Tan, J. J. Bollinger, B. Jelenkovic, and D. J. Wineland, Phys. Rev. Lett. **75**, 4198 (1995).
- 106.** J. M. Saint, C. Even, and C. Guthmann, Europhys. Lett. **55**, 45 (2001).

ОСОБЕННОСТИ БЕЗДИССИПАТИВНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ ДВИЖУЩИХСЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ОКОЛО ПРОВОДНИКА С ТОКОМ

*В. И. Высоцкий**, *М. В. Высоцкий*

*Киевский национальный университет им. Т. Шевченко
01601, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 28 июня 2020 г.,

после переработки 28 июня 2020 г.

Принята к публикации 2 августа 2020 г.

Рассмотрены особенности свободного (вне объема проводника) движения заряженных частиц в поле векторного потенциала, образуемого при прохождении постоянного тока вдоль цилиндрического или плоского проводника. Показано, что при движении частиц с отрицательным зарядом вдоль направления тока (а также при движении положительно заряженных частиц против этого направления) процесс взаимодействия зарядов с векторным потенциалом тока соответствует наличию очень глубокой потенциальной ямы, минимум которой находится за пределами проводника. Такое положение минимума потенциальной ямы соответствует протеканию тока, сила которого не превышает нескольких килоампер для электронов и позитронов и нескольких десятков килоампер для протонов. При превышении этих величин минимум смещается в объем проводника. При уменьшении тока или увеличении продольной энергии частицы положение минимума изменяется в интервале от области около поверхности проводника до величин, которые во много десятков раз превышают толщину (диаметр) проводника. Глубина потенциальной ямы возрастает с увеличением энергии частицы и даже для нерелятивистских частиц может достигать десятков и сотен килоэлектронвольт. Структура потенциальной ямы около поверхности плоского проводника с током соответствует гармоническому осциллятору, частота которого зависит от силы тока, толщины плоского проводника и энергии частицы. Наличие таких особенностей позволяет реализовать режим бездиссипативного каналирования за пределами проводника и транспортировку частиц на большое расстояние.

DOI: 10.31857/S0044451021010028

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема оптимальной транспортировки, фокусировки и управления параметрами пучков ускоренных заряженных частиц имеет длинную предысторию и много вариантов решений. Ее несомненная актуальность связана как с необходимостью рассмотрения конкретных фундаментальных и прикладных задач, решаемых с помощью пучков частиц, так и с целью изучения и использования ряда аномальных свойств самих пучков как нового типа материальной среды, отличного от таких традиционных систем, как твердое тело, жидкость, газ или неподвижная плазма. Традиционные и хорошо известные методы такого управления используют сложные системы сильных магнитных и электрических полей, форми-

руемых специальными электромагнитами или высоковольтными фокусирующими системами, что связано с очень большими технологическими проблемами и затратами энергии. В последние десятилетия было много попыток альтернативного решения этой проблемы (начиная с ранних работ [1–3]) с помощью эффекта каналирования при использовании сильных упорядоченных электрических полей, существующих в объеме кристаллов.

Традиционная схема каналирования заряженных частиц соответствует их движению в сильных электрических полях ядер и электронов, локализованных в пределах конкретных осей или плоскостей кристалла. Напряженность таких внутрикристаллических полей, как правило, существенно превосходит параметры полей, создаваемых в приборах стандартной пучковой оптики. Это, в частности, позволяет изменять направление пучков частиц с помо-

* E-mail: vivysotskii@gmail.com

щью слабоизогнутых кристаллов [4]. С другой стороны, очевидно, что наличие сильного рассеяния и тепловых флуктуаций в кристаллической решетке приводит к малой длине деканализирования и невозможности использования процесса каналирования для транспортировки частиц на большие расстояния. Корректные расчеты и вся практика работы с пучками ускоренных заряженных частиц показывает, что даже в максимально оптимизированных режимах каналирования (в частности, при движении позитронов и протонов в межплоскостном пространстве кристаллов) взаимодействие с элементами кристаллической структуры приводит к очень малой длине деканализирования, которая не превышает нескольких миллиметров. Кроме того, наличие сильного внутриобъемного взаимодействия движущихся частиц с кристаллом приводит к его деградации и разрушению.

Вследствие этих обстоятельств режим внутрикристаллического каналирования не может быть использован как для транспортировки частиц на большое расстояние, так и для их эффективной фокусировки при относительно малой энергии частиц.

В работе рассмотрен принципиально другой метод реализации управляемого ориентационного движения заряженных частиц с импульсом $\mathbf{p} = \mathbf{e}_p p$ в вакууме за счет использования векторного потенциала, формируемого за пределами одиночного прямолинейного проводника с током $\mathbf{J} = \mathbf{e}_z J_z$.

Следует отметить, что при очень упрощенном (и некорректном) представлении этого процесса кажется, что его особенности должны соответствовать классической задаче о взаимодействии двух параллельных токов, которые, в зависимости от их взаимных направлений, могут либо притягиваться, либо отталкиваться, не образуя устойчивого положения равновесия. Более детальный анализ показывает, что учет специфики взаимодействия, связанного даже с очень слабыми релятивистскими эффектами, приводит к возможности реализации режима ориентационного движения, соответствующего устойчивому каналированию движущихся частиц в перестраиваемой глубокой потенциальной яме, находящейся далеко за пределами объема проводника с током. Особенности такого движения в некотором смысле объединяют положительные стороны классического и сложного по организации управления пучками в свободном пространстве с помощью пучковой оптики (движение без диссипации) и просто, но малоэффективного (из-за сильного торможения и рассеяния) управления этими же пучками за счет процесса внутриобъемного каналирования.

2. ОСОБЕННОСТИ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПОЛЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

2.1. «Внеобъемное» каналирование заряженных частиц в поле цилиндрического проводника с током

Движение быстрых заряженных частиц в электромагнитном поле без учета влияния спина описывает уравнение Клейна – Гордона

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi(\mathbf{r}) \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\left(i\hbar \nabla + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

которое характеризует их состояние во всех инерционных системах отсчета.

Энергия взаимодействия частицы, движущейся в направлении оси z в объеме проводника и за его пределами, характеризуется как «стандартным» скалярным потенциалом вещества проводника $V(\mathbf{r}) = q\varphi(\mathbf{r})$, так и векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_z A_z(\mathbf{r})$ электрического тока $\mathbf{J} = \mathbf{e}_z J_z$, протекающего по проводнику.

Для анализа движения частиц с импульсом $\mathbf{p} = \mathbf{e}_p p$ и зарядом q вдоль оси кристалла z уравнение (1) можно преобразовать, если сделать замену

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_\perp) \exp\left(-i \frac{\varepsilon t - p_z z}{\hbar}\right), \quad (2)$$

$$\varepsilon = \sqrt{p_z^2 c^2 + m^2 c^4} + E \equiv \gamma m c^2 + E.$$

В итоге приходим к релятивистскому аналогу уравнения Шредингера в лабораторной системе координат:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \Delta_\perp}{2\gamma m} + U(r) \right] \tilde{\Psi} = E_{eff} \tilde{\Psi}, \quad (3)$$

$$U(r) = U_A(r) + U_V(r), \quad E_{eff} = E + \frac{E^2}{2\gamma m c^2}.$$

Состояние движущейся заряженной частицы в поле цилиндрического проводника радиусом R характеризуется суммарной потенциальной энергией $U(r)$, зависящей как от вклада $U_V(r)$ усредненного скалярного потенциала $V(\mathbf{r}) = q\langle\varphi(\mathbf{r})\rangle$ конкретного материала проводника (аналогичного случаю «стандартного» каналирования частиц в объеме кристалла), так и от «векторной» компоненты $U_A(r)$, определяемой векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r})$,

$$U_A(r) = -q\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_p \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2} + \frac{q^2 A^2}{2\gamma m c^2}}, \quad (4)$$

$$U_V(r) = V(r) - \frac{V^2(r)}{2\gamma m c^2}.$$

В случае однородного цилиндрического проводника в форме цилиндра радиусом R векторный потен-

циал, формируемый электрическим током J , имеет вид

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}_z A_z = \begin{cases} -\mathbf{e}_z J r^2 / c R^2, & r \leq R, \\ -\mathbf{e}_z (J/c) \{1 + \ln(r^2/R^2)\}, & r \geq R. \end{cases} \quad (5)$$

Сначала рассмотрим пространственную структуру векторной части (части, связанной с векторным потенциалом) потенциальной энергии $U_A(r)$

движущейся заряженной частицы с учетом явного вида векторного потенциала (5):

$$U_A(r) = \begin{cases} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_p) \frac{qJ(r/R)^2 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma c} + \frac{q^2 J^2 (r/R)^4}{2\gamma m c^4}, & r \leq R, \\ (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_p) \frac{qJ \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma c} \left\{1 + 2 \ln \frac{r}{R}\right\} + \frac{q^2 J^2}{2\gamma m c^4} \left\{1 + 2 \ln \frac{r}{R}\right\}^2, & r \geq R. \end{cases} \quad (6)$$

Свободному движению частиц с отрицательным зарядом $q = -e$ вдоль направления тока (а также движению положительно заряженных частиц с $q = e$ против этого направления) соответствует условие $q(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_p) < 0$. Только при таком условии в данной системе будет существовать удаленный от оси проводника устойчивый аксиально-симметричный минимум энергии частицы. При дополнительном условии

$$J < J^{(cr)} \equiv \frac{m c^3 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{|q|} \quad (7)$$

этот минимум в форме аксиальной (кольцевой) потенциальной ямы будет находиться за пределами объема проводника в области радиусом

$$\begin{aligned} r_{min} &= R \exp \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{J^{(cr)}}{J} - 1 \right) \right\} \equiv \\ &\equiv R \exp \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{m c^3 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{|q| J} - 1 \right) \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

относительно оси проводника с током.

Соответственно, при $J > J^{(cr)}$ минимум векторной части $U_A(r)$ общей потенциальной энергии $U(r)$ будет находиться внутри проводника, что сразу приводит к необходимости учета очень сильного торможения и рассеивания движущихся частиц.

Для электронов и позитронов с произвольной энергией критический ток равен

$$J^{(cr)} [\text{kA}] \approx 20 \sqrt{\gamma^2 - 1}. \quad (9)$$

Для всех типов нерелятивистских частиц с кинетической энергией продольного движения T_z величина этого тока определяется формулой

$$J^{(cr)} \approx \sqrt{2mT_z} \frac{c^2}{|q|} = \frac{m v_z c^2}{|q|}. \quad (10)$$

В частности, для протонов с энергией $T_z = 5$ кэВ критический ток равен $J^{(cr)} \approx 120$ кА и быстро возрастает с увеличением энергии. Отсюда следует, что при протекании в проводнике любого реального (умеренного) тока $J < 120$ кА центр потенциальной ямы для тяжелых частиц будет находиться за пределами проводника. При формальном условии $J \rightarrow 0$ имеем $r_{min} \rightarrow \infty$.

Глубина потенциальной ямы для движущейся заряженной частицы равна

$$U_A(r = r_{min}) = -\frac{m c^2 (\gamma^2 - 1)}{2\gamma}. \quad (11)$$

Для нерелятивистских частиц глубина ямы не зависит от их массы и численно равна кинетической энергии их продольного движения,

$$U_A(r = r_{min}) \approx -T_z. \quad (12)$$

На рис. 1 представлена радиальная структура векторной части $U_A(r)$ потенциальной ямы для электрона с различной энергией продольного движения T_z , движущегося вдоль цилиндрического проводника в направлении тока \mathbf{J} , или позитрона, движущегося против направления этого же тока.

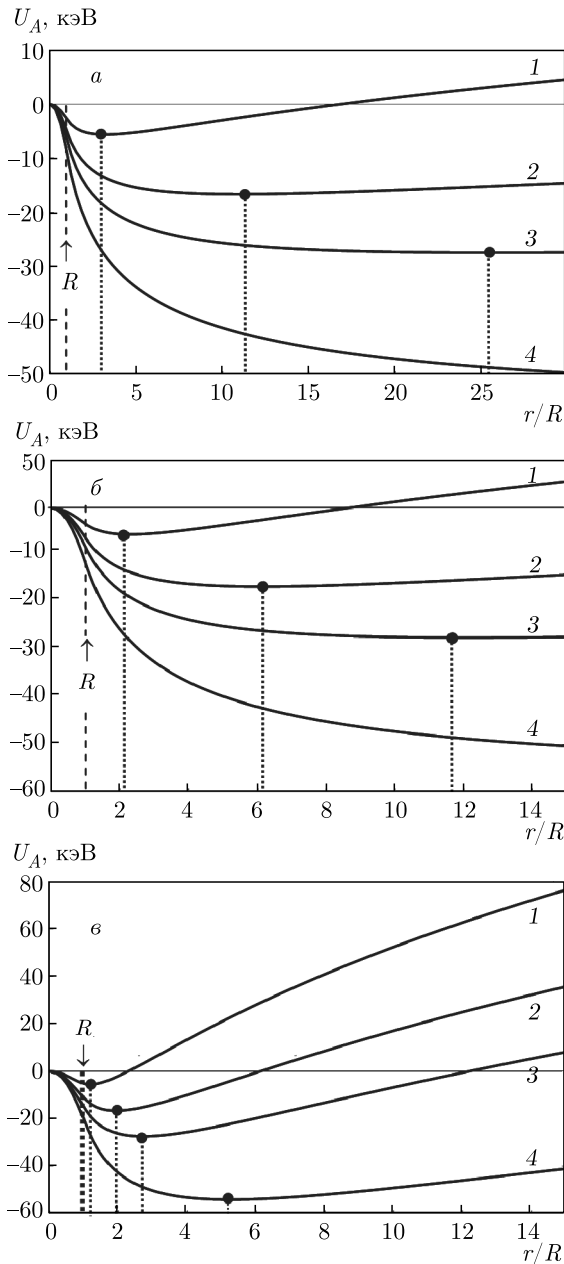


Рис. 1. Структура потенциальной ямы $U_A(r)$ для электронов с энергией продольного движения T_z [кэВ] = 5 (кривая 1), 15 (2), 25 (3), 50 (4) при протекании тока J [А] = 800 (а), 1000 (б), 2000 (в) вдоль цилиндрического проводника. Вертикальные штриховые линии показывают смещение положения минимума векторной части потенциальной энергии $U_A(r)$ электрона или позитрона в поле проводника с током относительно радиуса проводника R

Из полученных зависимостей видно, что при уменьшении силы тока минимум векторной части $U_A(r)$ потенциальной энергии очень существенно удаляется от проводника. Глубина образующейся

аксиально-симметричной потенциальной ямы, в полном соответствии с выражениями (11), (12), резко возрастает с увеличением продольной кинетической энергии электрона T_z , увеличиваясь от величины, совпадающей с T_z для сравнительно медленных электронов, до десятков и сотен килоэлектронвольт при увеличении этой энергии. Для релятивистских частиц с $\gamma \gg 1$ глубина ямы возрастает пропорционально лоренц-фактору γ .

Радиус положения минимума аксиальной потенциальной ямы r_{min} может изменяться в очень широких пределах в зависимости от соотношения $\sqrt{\gamma^2 - 1}/J$.

Исходя из этих результатов очевидно, что при выполнении условия «внеобъемного» каналирования (7) влияние намного более слабого (и усредненного по направлению продольного движения частицы) скалярного потенциала атомов вещества проводника, соответствующего «обычному» каналированию и не превышающего 50–200 эВ, на состояние частиц в суммарных потенциальных ямах является несущественным и может не учитываться. Такое игнорирование тем более обоснованно тем, что преимущественная локализация частиц, продольно движущихся в области минимума векторной части потенциальной энергии, далеко отстоит от границы проводника.

Аналогичным образом легко убедиться, что чисто электростатическое взаимодействие движущегося над поверхностью проводника заряда с его изображением, формируемым в объеме проводника, будет очень мало по сравнению с энергией взаимодействия $U_A(r)$, связанной с векторным потенциалом, формируемым сравнительно большим током в проводнике, величина которого хоть и меньше, но вполне сопоставима с $J^{(cr)}$. Максимальная энергия такого взаимодействия для неподвижного электрона или позитрона, даже если рассматривать ее на минимально допустимом расстоянии $r^{(cr)} \approx 1$ нм, при котором обосновано представление о металле как сплошной проводящей среде, не превышает 2–3 эВ, что несопоставимо меньше, чем полученные выше характеристики потенциальной ямы. Для больших расстояний (в области, близкой к минимуму потенциальной ямы) и для движущихся частиц это взаимодействие будет еще меньше.

Также легко убедиться, что наличие спина у рассматриваемых частиц не оказывает существенного влияния на структуру потенциальной ямы и особенности режима каналирования. Наличие векторного потенциала $\mathbf{A}(r)$ (5) приводит к появлению магнитного поля

$$\mathbf{H}(r) = \nabla \times \mathbf{A}(r) = -\mathbf{e}_\varphi \frac{\partial A_z(r)}{\partial r}, \quad (13)$$

содержащего только одну азимутальную компоненту

$$H_\varphi = \begin{cases} 2Jr/cR^2, & r \leq R, \\ 2J/cr, & r \geq R. \end{cases} \quad (14)$$

Если учесть, что минимальное сечение проводника, через который может протекать ток величиной в сотни и тысячи ампер, не может быть меньше нескольких квадратных миллиметров, то минимальный радиус, на котором может находиться аксиально-симметричный минимум потенциальной энергии, не может быть меньше 3–5 мм. Исходя из этих данных легко показать, что максимальная напряженность магнитного поля в такой системе не будет превышать величину $H_\varphi^{(max)} \approx 1000$ Э. Соответственно, энергия взаимодействия спинового магнитного момента μ_B (магнетона Бора) электрона или позитрона с таким полем будет очень малой и не будет превышать $U_{\mu_B \mathbf{H}} = -(\mathbf{H}^{(max)} \cdot \mu_B) \approx 10^{-5}$ эВ, что дает очень малую поправку к структуре рассмотренной выше векторной части потенциальной энергии $U_A(r)$.

Таким образом, векторная часть $U_A(r)$ потенциальной энергии взаимодействия практически полностью характеризует движение заряженных частиц в поле проводника с током.

2.2. Особенности каналирования заряженных частиц в поле плоского проводника с током

Альтернативная геометрия околоповерхностного каналирования может быть связана с движением заряженных частиц в поле плоского проводника с током. Для плоского проводника в форме пластины шириной L и толщиной $2a \ll L$, центральная плоскость которой расположена при $x = 0$, векторный потенциал $\mathbf{A}(x) = \mathbf{e}_z A_z(x)$ электрического тока $\mathbf{J} = \mathbf{e}_z J_z$ определяется выражением

$$A_z = \begin{cases} -\pi x^2 J / caL, & |x| \leq a, \\ -(\pi a J / cL) \{ (2|x|/a) - 1 \}, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (15)$$

Соответствующая этому потенциалу векторная часть $U_A(x)$ общей потенциальной энергии частицы (4) имеет вид

$$U_A(x) = -q(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_p) A \sqrt{1 - 1/\gamma^2} + \frac{q^2 A^2}{2\gamma m c^2} = \begin{cases} -\frac{\pi q x^2 J \sqrt{\gamma^2 - 1}}{caL\gamma} + \left(\frac{\pi q x^2 J}{caL} \right)^2 \frac{1}{2\gamma m c^2}, & |x| \leq a, \\ -\frac{\pi q a J \{ (2|x|/a) - 1 \} \sqrt{\gamma^2 - 1}}{cL\gamma} + \left(\frac{\pi q a J \left[\frac{2|x|}{a} - 1 \right]}{cL} \right)^2 \frac{1}{2\gamma m c^2}, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (16)$$

Полученную формулу для $U_A(x)$ можно преобразовать к виду, удобному для сопоставления с рассмотренным выше случаем цилиндрического проводника. Для этого общий ток в проводнике J можно представить как совокупность $N = L/2a \gg 1$ параллельных парциальных токов $J_a = J/N$, располо-

женных в пределах пластины проводника. Каждый из этих токов протекает по сечению, соответствующему квадрату со стороной $2a$, и является приближенным аналогом тока в цилиндрическом проводнике диаметром $2R$. В таком случае выражение (16) принимает вид

$$U_A(x) = \begin{cases} -\frac{\pi |q| J_a (x/a)^2 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{2c\gamma} + \left(\frac{\pi q (x/a)^2 J_a}{2c} \right)^2 \frac{1}{2\gamma m c^2}, & |x| \leq a, \\ -\frac{\pi |q| J_a \sqrt{\gamma^2 - 1}}{2c\gamma} \left[\frac{2|x|}{a} - 1 \right] + \left(\frac{\pi q J_a \left[\frac{2|x|}{a} - 1 \right]}{2c} \right)^2 \frac{1}{2\gamma m c^2}, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (17)$$

В формулах (16) и (17), как и в рассмотренном выше режиме движения частицы в поле цилиндрического проводника, свободному движению частиц с отрицательным зарядом $q = -e$ вдоль направления тока (а положительно заряженных частиц с $q =$

e против этого направления) соответствует условие $q(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_p) < 0$, которое является обязательным требованием существования удаленного от поверхности проводника (при $|x| > a$) минимума векторной части потенциальной энергии частицы.

Выражение (17) для векторной части потенциальной энергии можно преобразовать к форме, соответствующей параболической потенциальной яме, т. е. к виду

$$U_A(x \geq a) = \frac{\pi^2 q^2 J_a^2}{2\gamma m c^4 a^2} \Delta x^2 - \frac{m c^2 (\gamma^2 - 1)}{2\gamma},$$

$$\Delta x = a \left(\frac{1}{2} + \frac{m c^3 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\pi |q| J_a} \right) - |x| \equiv |x_{min}| - |x|, \quad (18)$$

аналогичному потенциальной энергии гармонического осциллятора в потенциальной яме с центром при $|x_{min}|$. Два минимума этой потенциальной ямы,

$$U_A(x_{min}) = -m c^2 (\gamma^2 - 1) / 2\gamma, \quad (19)$$

находятся по обеим сторонам плоского проводника на расстоянии

$$x_{min} = \pm a \left(\frac{m c^3 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\pi |q| J_a} + \frac{1}{2} \right) \quad (20)$$

от его центральной плоскости с координатой $x = 0$. Это расстояние возрастает при уменьшении силы тока.

Для нерелятивистских частиц глубина (19) этой ямы, как и в случае цилиндрического проводника с током (12), не зависит от массы заряженных частиц и численно равна кинетической энергии их продольного движения T_z . Для локализации этого минимума за пределами проводника необходимо выполнение условия

$$J_a < J_a^{(cr)} = \frac{2m c^3 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\pi |q|}, \quad (21)$$

которое аналогично соответствующему требованию (7) «внеобъемного» каналирования в случае цилиндрического проводника для каналирования электронов и позитронов и отличается от него коэффициентом $2/\pi$, отражающим небольшую разницу в выборе базового элемента тока (проводник с сечением в виде окружности диаметром $2R$ или в виде квадрата со стороной $2a$). Соответственно, при $J_a > J_a^{(cr)}$ минимум потенциальной ямы будет находиться внутри проводника.

Для электронов и позитронов величина критического парциального тока для плоского проводника равна

$$J_a^{(cr)} \text{ [кА]} \approx 6 \sqrt{\gamma^2 - 1}. \quad (22)$$

Для нерелятивистских частиц с кинетической энергией продольного движения T_z величина этого тока определяется формулой

$$J_a^{(cr)} \approx \sqrt{2m T_z} \frac{c^2}{\pi |q|} = \frac{m v_z c^2}{\pi |q|}. \quad (23)$$

В частности, для медленных протонов с энергией 100–400 эВ критический ток равен $J_a^{(cr)} \approx 5\text{--}10$ кА.

Из сопоставления величин (8) и (20) следует наиболее важное отличие ориентационного движения в поле плоского тока от случая цилиндрического проводника с током — расстояние от центра проводника до минимума потенциальной ямы с уменьшением тока в случае плоского проводника возрастает намного медленнее (по закону $|x_{min}| \propto 1/J_a$) по сравнению с экспоненциальным законом в случае цилиндрического проводника.

На рис. 2 представлены результаты расчета структуры векторной части потенциальной энергии для электронов и позитронов с различной энергией продольного движения T_z , движущихся в поле плоского проводника, по которому протекает парциальный ток $J_a = J(2a/N)$.

На рис. 3 представлено пространственное изменение положения потенциальной ямы для движущегося электрона или протона с энергией 50 кэВ в поле плоского проводника при уменьшении парциального тока. Их этих данных видно, что расстояние от проводника с током до центра потенциальной ямы, формируемой при взаимодействии движущегося заряда с векторным потенциалом тока, возрастет при уменьшении силы тока и может во много раз (и даже на много порядков при относительно малом токе) превосходить толщину плоского проводника.

При этом следует учесть, что такое очень большое удаление центра потенциальной ямы от проводника предполагает, что ширина L проводника существенно превышает это расстояние и $|x_{min}| \ll L$. При нарушении этого условия (и особенно в случае $|x_{min}| \gg L$) формулы (15)–(23) становятся некорректными и задачу о структуре векторной части потенциальной энергии необходимо решать с учетом решения уравнений Максвелла для векторного потенциала в проводнике с конкретной геометрией.

Состояние движущейся заряженной частицы в потенциальной яме около плоского проводника при выполнении условия $|x_{min}| < L$ соответствует гармоническому осциллятору с эквидистантным спектром $E_n = \hbar \omega_0 (n + 1/2)$ и очень большим числом уровней $N = U_A(x_{min}) / \hbar \omega_0$. Характерную частоту ω_0 этого осциллятора,

$$\omega_0 = \frac{\pi |q| J_a}{\gamma m c^2 a}, \quad (24)$$

можно определить, если сопоставить формулу (18) со стандартным выражением $U_A(x) = \gamma m \omega_0^2 (x - x_{min})^2 / 2$ для потенциальной энергии одномерного гармонического осциллятора, соот-

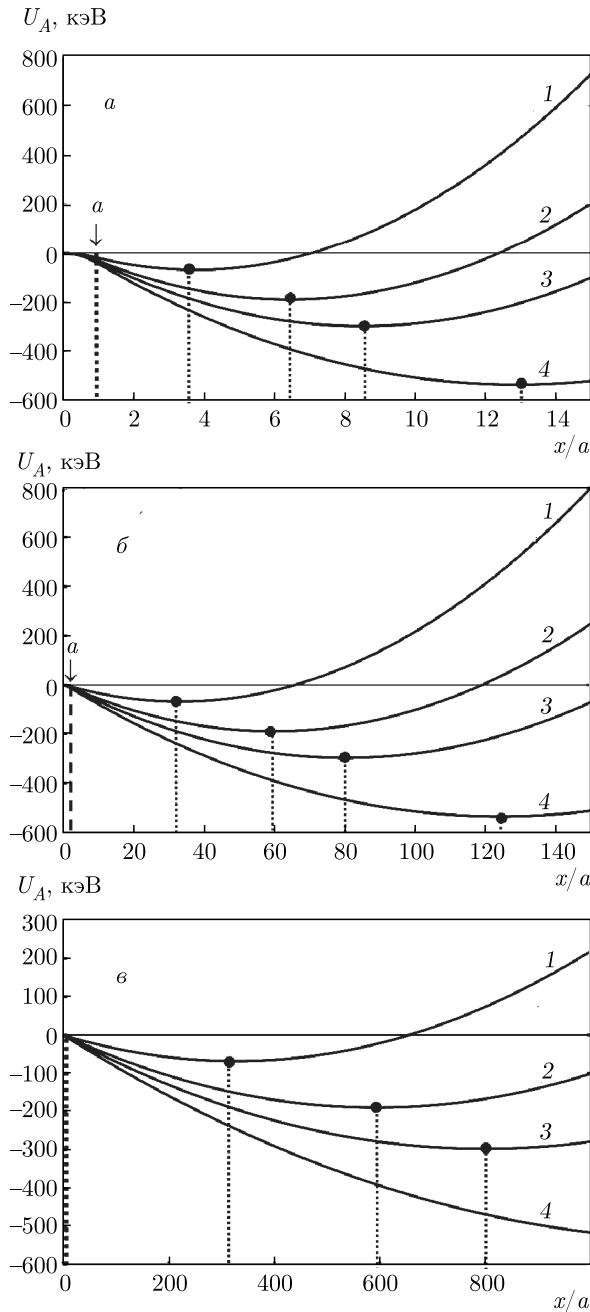


Рис. 2. Структура потенциальной ямы $U_A(x)$ для электронов с энергией продольного движения T_z [кэВ] = 5 (кривая 1), 15 (2), 25 (3), 50 (4) в зависимости от величины протекающего по плоскому проводнику частичного тока J_a [A] = $J(2a/N)$ = 2000 (а), 1000 (б), 800 (в)

ветствующего движущейся частице с массой γm в лабораторной системе. При спонтанном переходе между этими квантовыми уровнями энергии генерируется излучение. Для электронов или позитронов частота радиационного перехода между

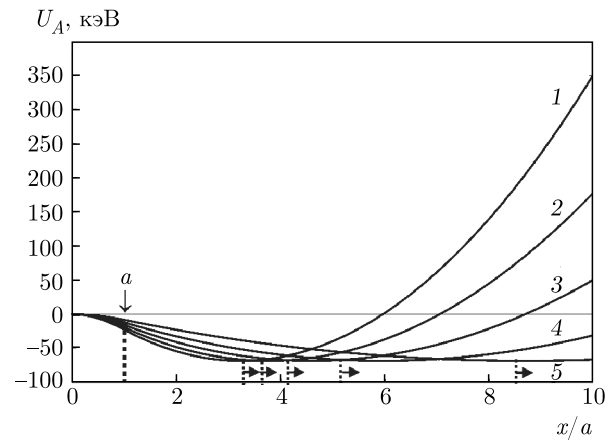


Рис. 3. Смещение минимума потенциальной ямы для заряженной частицы в поле плоского проводника при движении электрона с энергией 50 кэВ при изменении частичного тока J_a [кА] = 1.2 (1), 1.0 (2), 0.8 (3), 0.6 (4), 0.4 (5) или протона с той же энергией 50 кэВ при соответствующем изменении (в другом интервале) частичного тока J_a [кА] = 52 (1), 43 (2), 34 (3), 26 (4), 17 (5)

соседними уровнями в лабораторной системе равна

$$\omega_0 \text{ [МГц]} = 3 \frac{J_a \text{ [A]}}{\gamma a \text{ [см]}}. \quad (25)$$

Для рассмотренных примеров частичного тока $J_a \approx 10\text{--}1000$ А и при использовании плоского проводника толщиной $2a \approx 2\text{--}5$ мм эта частота для нерелятивистских электронов примерно совпадает с частотой излучения и соответствует интервалу $\omega_0 \approx 100$ МГц–30 ГГц. Для релятивистских электронов частота излучения за счет эффекта Доплера может на несколько порядков превысить величину (25) и соответствовать терагерцевому диапазону.

Для медленных протонов с $(\gamma - 1) \ll 1$ характерная частота гармонического осциллятора равна

$$\omega_0 \text{ [ГГц]} = 1.5 \frac{J_a \text{ [A]}}{a \text{ [см]}}. \quad (26)$$

При токе $J_a \approx 0.1\text{--}10$ кА и в случае плоских проводников толщиной $2a \approx 2$ мм пучок медленных протонов может быть источником перестраиваемого излучения в диапазоне $\omega_0 \approx 1.5\text{--}150$ ТГц.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные особенности структуры потенциальной энергии, определяющей движение заряженных частиц в поле постоянного электрического тока, протекающего в проводниках разной конфигу-

рации, принципиально отличаются как от фокусирующих и управляющих полей очень сложных магнитных и электростатических систем, используемых для «стандартного» управления движением потоков заряженных частиц, так и от режима «стандартного» каналирования в объеме монокристаллов, жестко привязанного к конкретным осям или плоскостям кристаллов.

Имеется несколько очень существенных особенностей, характеризующих это движение.

Первая из них относится к очень простой возможности изменения положения удаленной от поверхности проводника глубокой потенциальной ямы с помощью изменения силы тока в проводнике, что позволяет реализовать бездиссипативное движение и транспортировку заряженных частиц на большое расстояние. Такая система может быть реализована, например, в удаленной от проводника вакуумированной макроскопической пустотелой трубке, изготовленной из немагнитного материала, а в случае цилиндрического проводника — в пространстве между двумя коаксиальными трубками радиусами $R_1 < r_{min}$ и $R_2 > r_{min}$, охватывающими этот проводник в области около r_{min} .

Вторая особенность связана с аномально большой глубиной этой удаленной потенциальной ямы, которая может достигать единиц, десятков и сотен килоэлектронвольт, что на несколько порядков превышает параметры потенциальных ям при каналировании в объеме кристаллов. Это важное обстоятельство позволяет обеспечить управляемую транспортировку пучков с большой угловой дисперсией полного импульса частиц.

Еще одна особенность связана с предельной простотой реализации управляемой транспортировки частиц по заданной траектории за счет использования изгибов обычного проводника с током. При этом очень большая глубина «управляющей потенциальной ямы» позволяет удерживать частицы на заданной траектории даже при резком изменении направления транспортировки. Такой метод намного проще и удобнее по сравнению с использованием громоздких и энергозатратных магнитных систем.

Дополнительным фактором применения побочных эффектов такой бездиссипативной транспортировки является возможность использования электромагнитного излучения, генерируемого при радиационных переходах между уровнями энергии движущейся частицы в формируемой удаленной потенциальной яме. Частота этого излучения для нерелятивистских протонов и релятивистских электронов соответствует терагерцевому диапазону, в рам-

ках которого, как известно, практически отсутствуют доступные источники перестраиваемого излучения.

Следует отметить еще одно важное обстоятельство. Выше было показано, что особенности движения частиц в поле плоского проводника с током полностью аналогичны гармоническому осциллятору с эквидистантным спектром и очень большим количеством разрешенных уровней энергии. При модуляции тока состояние движущихся в его поле частиц соответствует нестационарному гармоническому осциллятору. В работах [5–12] было показано, что в такой системе из-за когерентного «перемешивания» квантовых состояний происходит формирование когерентных коррелированных состояний (ККС) этих частиц.

Особенность таких состояний состоит в том, что в результате конструктивной интерференции большого количества собственных волновых функций имеет место периодическая генерация гигантских флуктуаций поперечного импульса и кинетической энергии, величина которых зависит от коэффициента корреляции и может достигать очень больших величин при малой средней энергии.

Связь среднеквадратичных флуктуаций динамических переменных, определяющих состояние такой системы (в частности поперечной координаты и импульса), задается соотношением неопределенностей Шредингера – Робертсона для этих величин:

$$\delta q \delta p \geq \frac{\hbar^*}{2}, \quad \hbar^* = \frac{\hbar}{\sqrt{1-r^2}} \equiv G\hbar, \quad (27)$$

$$r = \frac{\langle qp + pq \rangle / 2 - \langle q \rangle \langle p \rangle}{\sqrt{\langle q^2 \rangle \langle p^2 \rangle}}.$$

Базовыми величинами в этих соотношениях является коэффициент корреляции r , который задан в интервале $-1 < r < 1$ и определяется с помощью антикорреляторов для операторов соответствующих динамических переменных, а также коэффициент эффективности корреляции $G = 1/\sqrt{1-r^2}$, который изменяется в интервале $1 \leq G < \infty$ и наиболее наглядно демонстрирует преимущества использования ККС для оптимизации, например, ядерных процессов при малой энергии частиц.

Наиболее эффективным методом формирования ККС является периодическая модуляция параметров параболической потенциальной ямы (ее ширины или глубины [9–13]), в которой находится рассматриваемая частица, на частоте параметрического резонанса $\Omega = 2\omega_0$, где ω_0 — характерная частота колебаний разных заряженных частиц в стационарном гармоническом осцилляторе (25), (26).

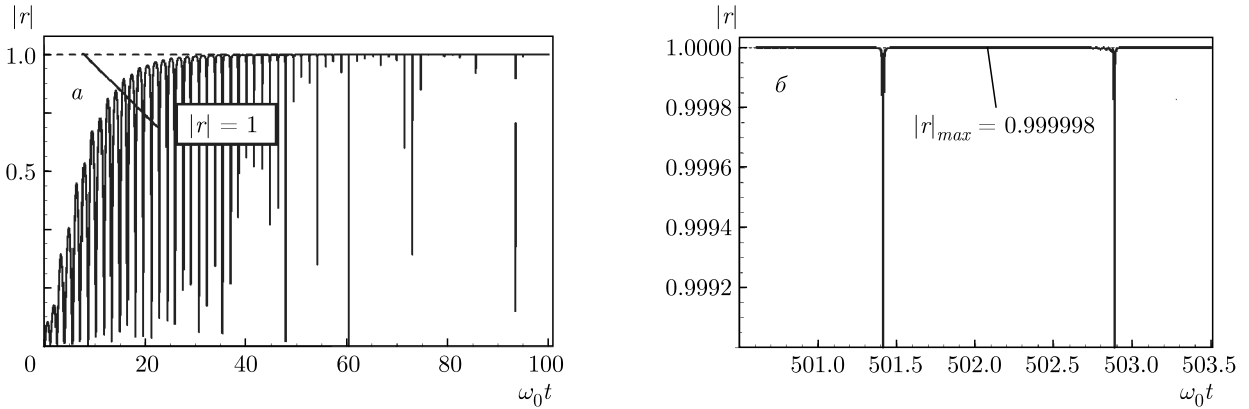


Рис. 4. Возрастание коэффициента корреляции при периодической модуляции параметров нестационарного гармонического осциллятора с индексом модуляции $g = 0.1$ в зависимости от длительности модуляции: a — в интервале $0 \leq t \leq 100/\omega_0$; b — при $t \approx 500/\omega_0$

При такой модуляции происходит нарастающее во времени формирование взаимно фазированного суперпозиционного состояния каждой из частиц в многоуровневой потенциальной яме, что через некоторое время приводит к полной синхронизации флуктуаций поперечного импульса и, соответственно, поперечной энергии на всех уровнях. Оптимальные условия для такого взаимодействия подробно рассмотрены в работе [13].

В работе [14] такая модуляция (и соответствующий максимум генерации энергии ядерного синтеза) осуществлялась при воздействии на кристалл PdD перестраиваемым когерентным излучением с частотами в диапазоне 10–20 ТГц, соответствующими условию параметрического резонанса $\Omega = 2\omega_0$ для колебаний ядер дейтерия, внедренных в решетку палладия. В работах [15–17] такая модуляция и эффективная генерация альфа-частиц обеспечивались при упорядоченном движении протонов с энергией около 500 эВ в межплоскостной потенциальной яме в решетке лития за счет взаимодействия протонов с периодически расположенными атомами.

В рассматриваемой системе такая модуляция может быть эффективно реализована при протекании слабомодулированного тока по проводнику,

$$J(t) = J_0\{1 + g \cos(2\omega_0 t)\}, \quad |g| < 1, \quad (28)$$

чему соответствует изменение характерной частоты собственных колебаний заряженной частицы в поле векторного потенциала:

$$\omega(t) = \omega_0\{1 + g \cos(2\omega_0 t)\}, \quad |g| < 1. \quad (29)$$

На рис. 4 представлена динамика формирования коэффициента корреляции электронов в такой системе при малом коэффициенте модуляции тока $g = 0.1$ [9].

Коэффициенту корреляции $|r|_{max} = 0.999998$, который достигается при $t \approx 500/\omega_0$, соответствует коэффициент эффективности корреляции $G = 500$. При увеличении коэффициента корреляции до $|r|_{max} = 0.9999999$, что имеет место при $t \approx 1000/\omega_0$, коэффициент эффективности достигает очень большой величины $G_{max} = 3000$. Для одного из приведенных выше (см. выражение (25)) значений $\omega_0 \approx 30$ ГГц длительность формирования такого сильнокоррелированного состояния равна $\Delta t \approx 3 \cdot 10^{-8}$ с, что при энергии продольного движения частицы 15 кэВ соответствует продольному интервалу движения в таком поле $\Delta z \approx 2$ м.

При увеличении индекса модуляции g процесс формирования коррелированного состояния частиц ускоряется. Такие большие величины коэффициента эффективности корреляции приводят к синхронным с величинами $|r|_{max}$ и G_{max} гигантским флуктуациям кинетической энергии поперечного движения заряженной частицы в рассматриваемой нестационарной параболической потенциальной яме. Амплитуда этих флуктуаций может на много порядков превосходить кинетическую энергию продольного движения частицы. Упрощенная оценка эффективности этих флуктуаций может быть проведена при использовании замены $\hbar \rightarrow \hbar^* \approx G\hbar$ в соответствующих квантовых уравнениях. Методика и примеры таких расчетов приведены в работе [13].

ЛИТЕРАТУРА

1. Й. Линдхард, УФН **99**, 249 (1969).
2. D. S. Gemmel, Rev. Mod. Phys. **46**, 129 (1974).
3. Е. Х. Оцуки, *Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами*, Мир, Москва (1985).
4. В. М. Бирюков, В. И. Котов, Ю. А. Чесноков, УФН **164**, 1017 (1994).
5. E. Schrodinger, Ber. Kgl. Akad. Wiss. **24**, 296 (1930).
6. H. P. Robertson, Phys. Rev. A **35**, 667 (1930).
7. В. В. Додонов, В. И. Манько, Труды ФИАН **183**, 71 (1987).
8. В. В. Додонов, А. В. Климов, В. И. Манько, Труды ФИАН **200**, 56 (1991).
9. V. I. Vysotskii and M. V. Vysotskyu, Eur. Phys. J. A **49**, 99 (2013).
10. V. I. Vysotskii, S. V. Adamenko, and M. V. Vysotskyu, Ann. Nucl. Energy **62**, 618 (2013).
11. В. И. Высоцкий, М. В. Высоцкий, ЖЭТФ **118**, 534 (2014).
12. В. И. Высоцкий, М. В. Высоцкий, ЖЭТФ **120**, 246 (2015).
13. В. И. Высоцкий, М. В. Высоцкий, ЖЭТФ **155**, 1009 (2019).
14. D. Letts, D. Cravens, and P. Hagelstein, in *Low-Energy Nuclear Reactions Sourcebook*, Vol. 2, Amer. Chem. Soc., Washington, DC (2009), p. 81.
15. S. Lipinski and H. Lipinski, Intern. patent WO 2014/189799 A9 (2014).
16. В. И. Высоцкий, М. В. Высоцкий, С. Барталуччи, ЖЭТФ **154**, 560 (2018).
17. S. Bartalucci, V. I. Vysotskii, and M. V. Vysotskyu, Phys. Rev. Accel. Beams. **22**, 054503 (2019).

ЭЛЕМЕНТАРНЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ НА ГРАНИЦЕ ПЛОСКОСЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

А. Б. Петрин*

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

Поступила в редакцию 13 июля 2020 г.,
после переработки 30 июля 2020 г.
Принята к публикации 2 августа 2020 г.

Рассмотрена строгая теория излучения элементарного диполя, расположенного на границе или внутри плоскостойкой структуры. Для частного случая излучения диполя, расположенного на свободной границе одной пленки, продемонстрирован метод аналитического упрощения решения. Предложенный метод позволил привести выражения для излучаемых полей к одномерным интегралам, что существенно упростило анализ задачи и ускорило численные расчеты. В качестве конкретного технического приложения теории были получены диаграммы направленности точечных излучателей (молекул, наноструктур), расположенных на свободной поверхности металлической пленки в схеме Кречмана и имеющих индуцированный дипольный момент, направленный перпендикулярно поверхности пленки. Обсуждается влияние поверхностной волны на направленные свойства поверхностных излучателей.

DOI: 10.31857/S004445102101003X

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время сохраняется значительный интерес к физическим явлениям, которые сопровождают возбуждение поверхностной плазмонной волны на поверхности металлической пленки по схеме Кречмана [1] (см. рис. 1). Поверхностная плазмонная волна распространяется вдоль поверхности металла и локализуется вблизи его поверхности [2,3], поэтому даже ничтожные изменения показателя преломления в приповерхностной области сильно влияют на характер ее распространения. На этом основывается широкое использование схемы Кречмана для создания различного рода высокочувствительных датчиков, реагирующих на изменение показателя преломления тонкого (олиго- или мономолекулярного) поверхностного слоя [4].

Исследования показали [5], что амплитуда поверхностной волны на свободной границе пленки в схеме Кречмана более чем на порядок выше амплитуды падающей волны. Поскольку в свободном пространстве над пленкой не возбуждаются распространяющиеся волны, это дает возможность, поме-

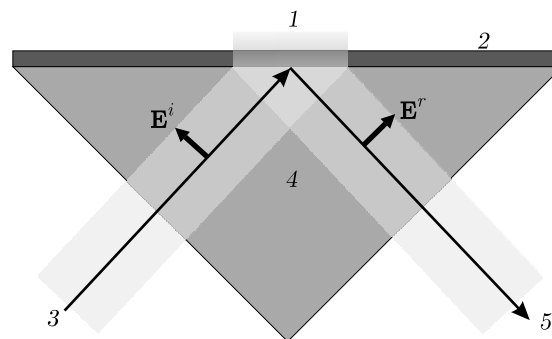


Рис. 1. Возбуждение поверхностной плазмонной волны 1 на поверхности металлической пленки 2 по схеме Кречмана. Падающая поляризованная волна 3 со стороны призмы 4 порождает на свободной границе поверхностную плазмонную 1 и отраженную 5 волны

щая на свободную поверхность наночастицы или отдельные молекулы, наблюдать именно их излучение, направленное в сторону свободного полупространства. Это излучение порождается наведенными электрическими дипольными моментами наночастиц, которые индуцируются поверхностной волной. Важно, что только точечные объекты будут излучать распространяющиеся волны в свободное пространство и исключительно это излучение можно будет наблюдать с помощью микроскопа, при этом

* E-mail: a_petrin@mail.ru

можно полностью быть уверенным, что наблюдаемый в микроскоп свет исходит именно из точечных источников на поверхности. В связи с этим возникает фундаментальный вопрос о том, как влияет металлическая пленка (или в общем случае многопленочная структура) в схеме Кречмана на пространственное излучение в свободное пространство над пленкой от точечного излучателя, расположенного на поверхности.

Теоретические методы нахождения излучения от элементарного точечного электрического диполя, расположенного на плоской границе двух сред, были развиты на заре эры использования электромагнитных волн для передачи сигналов вдоль земной поверхности [6]. В дальнейшем эти методы получили развитие в связи с возникающими новыми задачами радиосвязи [7, 8]. Развитие антенной техники привело к развитию теории излучения элементарного диполя, расположенного на границе плоскостойкой среды, и теории излучения микрополосковых антенн [9–11], которые являются наилучшими конструкциями с точки зрения их совместимости с микрополосковыми интегральными схемами. Такие антенны играют особую роль в современной технике, так как они могут быть изготовлены из фольгированных материалов высокопроизводительными методами печати и травления.

Существующие теоретические методы расчета излучения антенн, расположенных на границе слоистых структур, сложны и описываются, например, в терминах диадных функций Грина [12]. Кроме того, сама теория распространения волн в слоистых структурах содержит много тонких моментов, таких как необходимость правильного выбора ветвей аналитических функций при записи волн в слоях, которые могут приводить к чудесам вроде суперразрешения [13]. Поэтому в данной работе предложен вариант строгой электромагнитной теории излучения элементарного диполя, расположенного на границе или внутри плоскостойкой структуры. Для случая излучения диполя, расположенного на свободной границе одной пленки, ниже продемонстрирован метод аналитического упрощения решения, имеющий, как кажется, потенциально общетеоретическое значение. Этот метод позволил привести формулы для излучаемых полей к одномерным интегралам, что существенно упростило анализ задачи и ускорило численные расчеты.

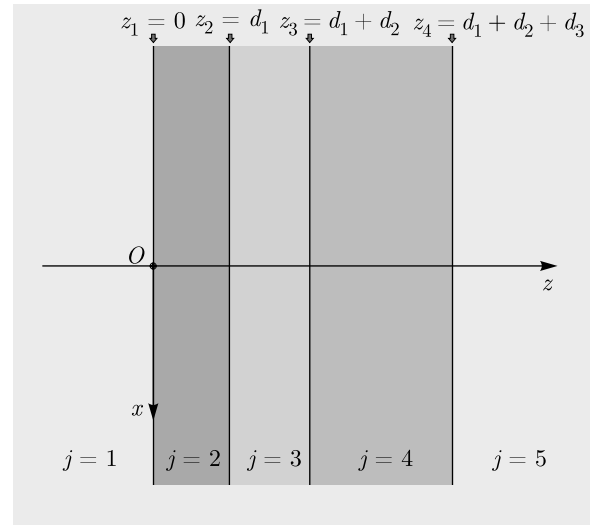


Рис. 2. Геометрия плоскостойкой структуры, состоящей из трех пленок

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО ВНУТРИ ПЛОСКОСЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Рассмотрим задачу излучения электромагнитной волны точечным источником тока единичной амплитуды, изменяющимся во времени гармонически с циклической частотой ω . Пусть этот источник расположен в плоской слоистой структуре, состоящей из нескольких пленок и из окружающих слоистую структуру двух полупространств. Для определенности сначала будем считать, что источник расположен в одной из пленок, а затем обобщим эту задачу на случай, когда источник расположен на их границе.

Пусть общее число пленок равно N_f , толщина m -й пленки равна d_m и полная толщина слоистой структуры $d_{tot} = \sum_{m=1}^{N_f} d_m$. Общее число границ между пленками обозначим как $N = N_f + 1$. Пронумеруем области пространства $j = 1, \dots, N + 1$ (на рис. 2 показана для примера задача с $N = 4$ и $N_f = 3$). Предположим, что пленки имеют абсолютные комплексные диэлектрические и магнитные проницаемости равные ϵ_j и μ_j на рассматриваемой частоте ω , а перед и за слоистой структурой находятся однородные полупространства с проницаемостями ϵ_1, μ_1 и $\epsilon_{N+1}, \mu_{N+1}$ (свободное пространство). Обозначим также через z_j координаты N границ пленок по оси z следующим образом: $z_1 = 0, z_j = \sum_{m=1}^{j-1} d_m$ при

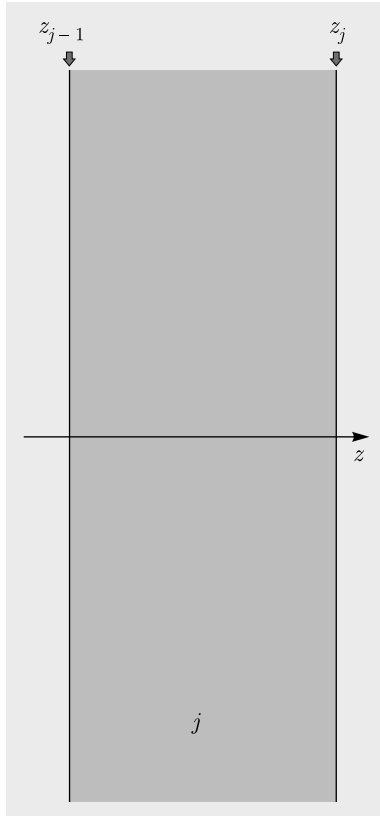


Рис. 3. Пленка с номером j , расположенная между границами z_{j-1} и z_j

$j = 2, \dots, N$. Уравнения Максвелла для области с номером j можно записать в виде

$$\text{rot } \mathbf{E}_j = i\omega \mathbf{B}_j, \tag{1}$$

$$\text{rot } \mathbf{B}_j = \mu_j (-i\omega \varepsilon_j \mathbf{E}_j + \mathbf{J}_j), \tag{2}$$

где \mathbf{E}_j , \mathbf{B}_j и \mathbf{J}_j — векторы напряженности электрического поля, индукция магнитного поля и плотность стороннего (известного) тока в области с номером j (если источник тока отсутствует в области j , то $\mathbf{J}_j = 0$). Предполагается комплексное временное представление в виде $e^{-i\omega t}$.

Решая уравнения Максвелла в каждой области с учетом граничных условий, найдем электромагнитное поле во всех областях. Рассмотрим сначала следующую вспомогательную задачу.

3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В СЛОЕ, СВОБОДНОЙ ОТ СТОРОННИХ ТОКОВ

Пусть в области с номером j нет сторонних токов между границами z_{j-1} и z_j (см. рис. 3). Диэлектрическая и магнитная проницаемости среды в этой

пленке равны соответственно ε_j и μ_j . Тогда, учитывая, что в этой области справедливо уравнение $\text{div } \mathbf{D}_j = 0$, из уравнений (1) и (2) получаем уравнения для электромагнитных полей в виде

$$\text{rot rot } \mathbf{E}_j - \omega^2 \varepsilon_j \mu_j \mathbf{E}_j = 0, \tag{3}$$

$$\text{rot rot } \mathbf{B}_j - \omega^2 \varepsilon_j \mu_j \mathbf{B}_j = 0. \tag{4}$$

В рассматриваемой области $\text{div } \mathbf{E}_j = 0$ и $\text{div } \mathbf{B}_j = 0$. Учитывая векторное тождество $\text{rot rot } \mathbf{F} = \text{grad div } \mathbf{F} - \Delta \mathbf{F}$, где $\Delta = \partial_{xx}^2 + \partial_{yy}^2 + \partial_{zz}^2$ — оператор Лапласа, из (3) и (4) получим

$$\Delta \mathbf{E}_j + \omega^2 \varepsilon_j \mu_j \mathbf{E}_j = 0, \tag{5}$$

$$\Delta \mathbf{B}_j + \omega^2 \varepsilon_j \mu_j \mathbf{B}_j = 0. \tag{6}$$

Подставим в полученные выше уравнения компоненты полей в виде фурье-разложений. Например, представление для x -компоненты электрического поля примет вид

$$E_{j,x}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{E}_{j,x}(\xi, \eta, z) e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta,$$

где фурье-образы определяются выражением

$$\tilde{E}_{j,x}(\xi, \eta, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} E_{j,x}(x, y, z) e^{-i(\xi x + \eta y)} dx dy.$$

Для остальных компонент полей будем использовать аналогичные представления и соответствующие символы.

В компонентах полей уравнения (5) и (6) имеют вид

$$\partial_{xx}^2 E_{j,x} + \partial_{yy}^2 E_{j,x} + \partial_{zz}^2 E_{j,x} + \omega^2 \mu_j \varepsilon_j E_{j,x} = 0,$$

и аналогичные уравнения для $E_{j,y}$, $E_{j,z}$ и составляющих магнитного поля, которые выписывать не будем. Переходя к фурье-образам, получаем из (5) уравнения

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{E}_{j,x}}{dz^2} + \gamma_j^2 \tilde{E}_{j,x} &= 0, \\ \frac{d^2 \tilde{E}_{j,y}}{dz^2} + \gamma_j^2 \tilde{E}_{j,y} &= 0, \\ \frac{d^2 \tilde{E}_{j,z}}{dz^2} + \gamma_j^2 \tilde{E}_{j,z} &= 0, \end{aligned} \tag{7}$$

где $\gamma_j = \sqrt{k_j^2 - \xi^2 - \eta^2}$, $k_j = \omega \sqrt{\mu_j \varepsilon_j}$.

Решения уравнений (7) для направлений распространения волн вдоль (+) и против (−) оси z , можно записать в виде

$$\mathbf{E}_j^\pm(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^\pm \\ \hat{E}_{j,y}^\pm \\ \hat{E}_{j,z}^\pm \end{pmatrix} e^{\pm i\gamma_j z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (8)$$

В рассматриваемом случае $\text{div } \mathbf{E}_j = 0$ и, следовательно, $\xi \hat{E}_{j,x}^\pm + \eta \hat{E}_{j,y}^\pm \pm \gamma_j \hat{E}_{j,z}^\pm = 0$. Тогда (8) можно переписать как

$$\mathbf{E}_j^\pm(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \mp \xi/\gamma_j & \mp \eta/\gamma_j \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^\pm \\ \hat{E}_{j,y}^\pm \end{pmatrix} e^{\pm i\gamma_j z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (9)$$

Поэтому общее решение уравнений (7) в области $[z_{j-1}, z_j]$ можно записать в виде

$$\mathbf{E}_j(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\xi/\gamma_j & -\eta/\gamma_j \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^+ \\ \hat{E}_{j,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_j(z-z_{j-1})} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \xi/\gamma_j & \eta/\gamma_j \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^- \\ \hat{E}_{j,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_j(z-z_j)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (10)$$

Обратим внимание на отличие в форме записи (9) и (10). Формально эти уравнения переходят одно в другое, они описывают волны, распространяющиеся в противоположных направлениях по оси z . Однако формулы содержат функции $\gamma_j = \sqrt{k_j^2 - \xi^2 - \eta^2}$. Для однозначного определения вида записи решений необходимо выбрать аналитическую ветвь функции комплексного переменного $\gamma_j(\lambda)$, где $\lambda^2 = \xi^2 + \eta^2$.

Обычно для сред без поглощения используют ветвь [8]

$$\gamma_j(\lambda) = \begin{cases} \sqrt{k_j^2 - \lambda^2}, & \lambda^2 \leq k_j^2, \\ i\sqrt{\lambda^2 - k_j^2}, & \lambda^2 \geq k_j^2. \end{cases} \quad (11)$$

Если взять вместо (11) другую аналитическую ветвь, с отрицательной мнимой зависимостью, то волны с большими λ будут экспоненциально возрастать с увеличением z при удалении от источников полей, что противоречит принципу причинности.

Более строго, в случае поглощающей среды существует две точки ветвления функции $\gamma_j(\lambda)$: точка $k_{j,1} = \omega \sqrt{|\varepsilon_j| |\mu_j|} \exp(i(\arg(\varepsilon_j) + \arg(\mu_j))/2)$ и точка $k_{j,2} = e^{i\pi} k_{j,1}$. Аналитическую ветвь функции $\gamma_j(\lambda)$, пригодную в том числе для описания материалов с отрицательным преломлением [14] и переходящую в (11) при бесконечно малом поглощении среды, можно определить как

$$\gamma_j(\lambda) = \sqrt{|k_{j,1} - \lambda|} \exp\left(\frac{i \arg(k_{j,1} - \lambda)}{2}\right) \times \sqrt{|k_{j,2} - \lambda|} \exp\left(\frac{i \arg(\lambda - k_{j,2})}{2}\right), \quad (12)$$

где функции $|\xi|$ и $\arg(\xi)$ — модуль и аргумент комплексной переменной ξ .

Кроме того, в представлении полей (10) при любых z и правильном выборе аналитической ветви (12) будет обеспечена сходимость интегралов. При этом не будут возникать экспоненциально усиливающиеся гармоники при больших значениях ξ и η .

Из уравнения $\text{rot } \mathbf{E}_j = i\omega \mathbf{B}_j$ найдем x - и y -компоненты магнитного поля. Для соответствующих фурье-компонент имеем

$$\hat{\mathbf{B}}_j^+ = \mathbf{e}_x \left(\frac{\eta}{\omega} \hat{E}_{j,z}^+ - \frac{\gamma_j}{\omega} \hat{E}_{j,y}^+ \right) - \mathbf{e}_y \left(\frac{\xi}{\omega} \hat{E}_{j,z}^+ - \frac{\gamma_j}{\omega} \hat{E}_{j,x}^+ \right) + \mathbf{e}_z \left(\frac{\xi}{\omega} \hat{E}_{j,y}^+ - \frac{\eta}{\omega} \hat{E}_{j,x}^+ \right),$$

где \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z — единичные орты координатных осей. Из выражения $\text{div } \mathbf{E}_j = 0$ следует $\hat{E}_{j,z}^+ = -\xi \hat{E}_{j,x}^+ / \gamma_j - \eta \hat{E}_{j,y}^+ / \gamma_j$, тогда

$$\hat{\mathbf{B}}_j^+ = \mathbf{e}_x \left(-\frac{\xi \eta}{\omega \gamma_j} \hat{E}_{j,x}^+ - \frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega \gamma_j} \hat{E}_{j,y}^+ \right) + \mathbf{e}_y \left(\frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega \gamma_j} \hat{E}_{j,x}^+ + \frac{\xi \eta}{\omega \gamma_j} \hat{E}_{j,y}^+ \right) + \mathbf{e}_z \left(\frac{\xi}{\omega} \hat{E}_{j,y}^+ - \frac{\eta}{\omega} \hat{E}_{j,x}^+ \right),$$

или в матричном виде —

$$\begin{pmatrix} \hat{B}_{j,x}^+ \\ \hat{B}_{j,y}^+ \\ \hat{B}_{j,z}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\xi\eta/\omega\gamma_j & -(\gamma_j^2 + \eta^2)/\omega\gamma_j \\ (\gamma_j^2 + \xi^2)/\omega\gamma_j & \xi\eta/\omega\gamma_j \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^+ \\ \hat{E}_{j,y}^+ \end{pmatrix}.$$

Аналогично, для $\hat{\mathbf{B}}_j^-$ найдем

$$\begin{pmatrix} \hat{B}_{j,x}^- \\ \hat{B}_{j,y}^- \\ \hat{B}_{j,z}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi\eta/\omega\gamma_j & (\gamma_j^2 + \eta^2)/\omega\gamma_j \\ -(\gamma_j^2 + \xi^2)/\omega\gamma_j & -\xi\eta/\omega\gamma_j \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^- \\ \hat{E}_{j,y}^- \end{pmatrix}.$$

Тогда общее решение для магнитного поля в рассматриваемой области с номером j (пленке с номером $j - 1$) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_j(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} -\xi\eta/\omega\gamma_j & -(\gamma_j^2 + \eta^2)/\omega\gamma_j \\ (\gamma_j^2 + \xi^2)/\omega\gamma_j & \xi\eta/\omega\gamma_j \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^+ \\ \hat{E}_{j,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_j(z-z_{j-1})} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \xi\eta/\omega\gamma_j & (\gamma_j^2 + \eta^2)/\omega\gamma_j \\ -(\gamma_j^2 + \xi^2)/\omega\gamma_j & -\xi\eta/\omega\gamma_j \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^- \\ \hat{E}_{j,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_j(z-z_j)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \end{aligned} \quad (13)$$

Из (10) и (13) найдем тангенциальные составляющие фурье-образов полей на границах области j в виде

$$\begin{aligned} \left. \begin{pmatrix} \tilde{E}_{j,x} \\ \tilde{E}_{j,y} \\ \tilde{B}_{j,x}/\mu_j \\ \tilde{B}_{j,y}/\mu_j \end{pmatrix} \right|_{z=z_{j-1}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & e^{i\gamma_j d_{j-1}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & e^{i\gamma_j d_{j-1}} \\ -\frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} & -\frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega\mu_j\gamma_j} & \frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & \frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} \\ \frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega\mu_j\gamma_j} & \frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} & -\frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & -\frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^+ \\ \hat{E}_{j,y}^+ \\ \hat{E}_{j,x}^- \\ \hat{E}_{j,y}^- \end{pmatrix}, \\ \left. \begin{pmatrix} \tilde{E}_{j,x} \\ \tilde{E}_{j,y} \\ \tilde{B}_{j,x}/\mu_j \\ \tilde{B}_{j,y}/\mu_j \end{pmatrix} \right|_{z=z_j} &= \begin{pmatrix} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & e^{i\gamma_j d_{j-1}} & 0 & 1 \\ -\frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & -\frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & \frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} & \frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega\mu_j\gamma_j} \\ \frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & \frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} e^{i\gamma_j d_{j-1}} & -\frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega\mu_j\gamma_j} & -\frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{j,x}^+ \\ \hat{E}_{j,y}^+ \\ \hat{E}_{j,x}^- \\ \hat{E}_{j,y}^- \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $d_{j-1} = z_j - z_{j-1}$.

Вводя вектор-столбец $\hat{\phi}_j = (\hat{E}_{j,x}^+; \hat{E}_{j,y}^+; \hat{E}_{j,x}^-; \hat{E}_{j,y}^-)^T$, запишем полученные выражения в матричном виде:

$$\left. \begin{pmatrix} \tilde{E}_{j,x} \\ \tilde{E}_{j,y} \\ \tilde{B}_{j,x}/\mu_j \\ \tilde{B}_{j,y}/\mu_j \end{pmatrix} \right|_{z=z_{j-1}} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_j & -e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{G}_j \end{pmatrix} \hat{\phi}_j, \quad (14)$$

$$\left(\begin{array}{c} \tilde{E}_{j,x} \\ \tilde{E}_{j,y} \\ \tilde{B}_{j,x}/\mu_j \\ \tilde{B}_{j,y}/\mu_j \end{array} \right) \Big|_{z=z_j} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{G}_j & -\mathbf{G}_j \end{pmatrix} \hat{\phi}_j, \quad (15)$$

где \mathbf{I} — единичная 2×2 -матрица, а матрица \mathbf{G}_j представляется как

$$\mathbf{G}_j = \begin{pmatrix} -\frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} & -\frac{\gamma_j^2 + \eta^2}{\omega\mu_j\gamma_j} \\ \frac{\gamma_j^2 + \xi^2}{\omega\mu_j\gamma_j} & \frac{\xi\eta}{\omega\mu_j\gamma_j} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

4. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ, СВОБОДНОЙ ОТ СТОРОННИХ ТОКОВ

Рассмотрим теперь многослойную структуру, внутри которой нет сторонних токов. Рассмотрим границу $z = z_j$ между областями с номерами j и $j+1$. Непрерывность тангенциальных компонент напряженностей электрического и магнитного полей на этой границе можно записать в виде

$$E_{j,x}(x, y, z_j) - E_{j+1,x}(x, y, z_j) = 0,$$

$$E_{j,y}(x, y, z_j) - E_{j+1,y}(x, y, z_j) = 0,$$

$$\frac{B_{j,x}(x, y, z_j)}{\mu_j} - \frac{B_{j+1,x}(x, y, z_j)}{\mu_{j+1}} = 0,$$

$$\frac{B_{j,y}(x, y, z_j)}{\mu_j} - \frac{B_{j+1,y}(x, y, z_j)}{\mu_{j+1}} = 0,$$

где электрические и магнитные поля в области $j+1$ выражаются формулами (10) и (13), в которых проведена замена индексов $j \rightarrow j+1$. Так как уравнения Максвелла являются линейными, то граничные условия должны выполняться для каждого члена фурье-разложения, т. е. граничные условия выполняются для фурье-образов полей:

$$\tilde{E}_{j,x}(\xi, \eta, z_j) - \tilde{E}_{j+1,x}(\xi, \eta, z_j) = 0, \quad (17)$$

$$\tilde{E}_{j,y}(\xi, \eta, z_j) - \tilde{E}_{j+1,y}(\xi, \eta, z_j) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\tilde{B}_{j,x}(\xi, \eta, z_j)}{\mu_j} - \frac{\tilde{B}_{j+1,x}(\xi, \eta, z_j)}{\mu_{j+1}} = 0, \quad (19)$$

$$\frac{\tilde{B}_{j,y}(\xi, \eta, z_j)}{\mu_j} - \frac{\tilde{B}_{j+1,y}(\xi, \eta, z_j)}{\mu_{j+1}} = 0. \quad (20)$$

Записывая граничные условия (17)–(20) с помощью выражений (14) и (15), получим матричное уравнение на границе $z = z_j$:

$$\begin{pmatrix} e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_j d_{j-1}} \mathbf{G}_j & -\mathbf{G}_j \end{pmatrix} \hat{\phi}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_{j+1} d_j} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{j+1} & -e^{i\gamma_{j+1} d_j} \mathbf{G}_{j+1} \end{pmatrix} \hat{\phi}_{j+1}, \quad (21)$$

где $d_{j-1} = z_j - z_{j-1}$, $d_j = z_{j+1} - z_j$.

Уравнение (21) можно записать для $j = 2, \dots, N-1$, где $N+1$ — общее число областей, N — число границ, т. е. для всех границ, исключая первую ($j = 1$) и последнюю ($j = N$) границы. То есть исключаются границы

$$z_1 = 0, \quad z_N = d_{tot} = \sum_{m=1}^{N-1} d_m,$$

где d_{tot} — общая толщина слоистой структуры (сумма толщин пленок, составляющих рассматриваемую структуру).

Общее решение для электрического и магнитного полей в области $j = 1$, т. е. в интервале $(-\infty, z_1]$, где $z_1 = 0$, запишем в виде

$$\mathbf{E}_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\xi/\gamma_1 & -\eta/\gamma_1 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^+ \\ \hat{E}_{1,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \xi/\gamma_1 & \eta/\gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} \times \\ \times e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_1(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} -\xi\eta/\omega\gamma_1 & -(\gamma_1^2 + \eta^2)/\omega\gamma_1 \\ (\gamma_1^2 + \xi^2)/\omega\gamma_1 & \xi\eta/\omega\gamma_1 \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^+ \\ \hat{E}_{1,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \xi\eta/\omega\gamma_1 & (\gamma_1^2 + \eta^2)/\omega\gamma_1 \\ -(\gamma_1^2 + \xi^2)/\omega\gamma_1 & -\xi\eta/\omega\gamma_1 \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (23) \end{aligned}$$

Тогда, записывая условия на границе $z_1 = 0$, получим

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix} \hat{\phi}_1 &= \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_2 & -e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{G}_2 \end{pmatrix} \hat{\phi}_2. \quad (24) \end{aligned}$$

Аналогично, общее решение для электрического и магнитного полей в области $j = N + 1$, т.е. в интервале $[z_N, +\infty)$, запишем в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{N+1}(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\xi/\gamma_{N+1} & -\eta/\gamma_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \xi/\gamma_{N+1} & \eta/\gamma_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^- \\ \hat{E}_{N+1,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (25) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{N+1}(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} -\xi\eta/\omega\gamma_{N+1} & -(\gamma_{N+1}^2 + \eta^2)/\omega\gamma_{N+1} \\ (\gamma_{N+1}^2 + \xi^2)/\omega\gamma_{N+1} & \xi\eta/\omega\gamma_{N+1} \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \xi\eta/\omega\gamma_{N+1} & (\gamma_{N+1}^2 + \eta^2)/\omega\gamma_{N+1} \\ -(\gamma_{N+1}^2 + \xi^2)/\omega\gamma_{N+1} & -\xi\eta/\omega\gamma_{N+1} \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^- \\ \hat{E}_{N+1,y}^- \end{pmatrix} \times \\ &\times e^{-i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (26) \end{aligned}$$

Тогда получим граничные условия на границе z_N в виде

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{G}_N & -\mathbf{G}_N \end{pmatrix} \hat{\phi}_N &= \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{N+1} & -\mathbf{G}_{N+1} \end{pmatrix} \hat{\phi}_{N+1}. \quad (27) \end{aligned}$$

Граничные условия (21), (24) и (27) позволяют связать вектор-столбцы электрического поля в первой и последней областях задачи (т.е. в полупространствах, вне плоскостной структуры):

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_1 &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_2 & -e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{G}_2 \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{G}_2 & -\mathbf{G}_2 \end{pmatrix}^{-1} \times \dots \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_N & -e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{G}_N \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{G}_N & -\mathbf{G}_N \end{pmatrix}^{-1} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{N+1} & -\mathbf{G}_{N+1} \end{pmatrix} \hat{\phi}_{N+1}, \end{aligned}$$

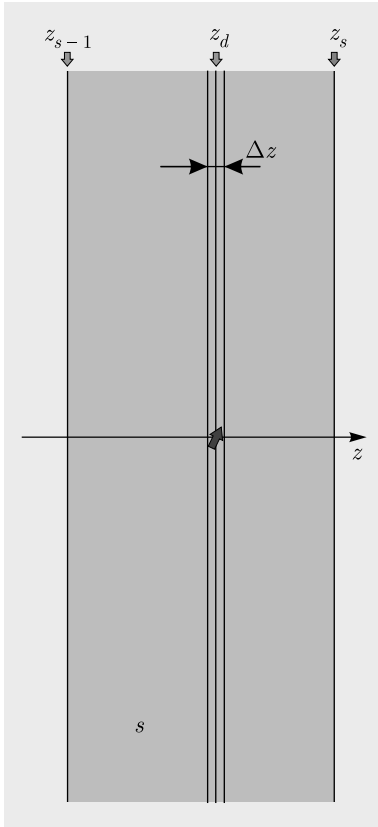


Рис. 4. Точечный излучатель, расположенный в точке $(0, 0, z_d)$ в области с номером s

или

$$\hat{\varphi}_1 = \mathbf{M} \times \hat{\varphi}_{N+1}. \quad (28)$$

Матрица \mathbf{M} имеет вид $\mathbf{M} = \mathbf{T}_1 \times \left(\prod_{m=2}^N \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_{N+1}$, где

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix}^{-1},$$

$$\mathbf{T}_m = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_m & -e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{G}_m \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{G}_m & -\mathbf{G}_m \end{pmatrix}^{-1},$$

$$\mathbf{T}_{N+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{N+1} & -\mathbf{G}_{N+1} \end{pmatrix}.$$

Если нам известна, например, падающая на плоскостойкую структуру волна, а значит, компоненты $\hat{E}_{1,x}^+$ и $\hat{E}_{1,y}^+$ вектор-столбца $\hat{\varphi}_1$, то из уравнения (28) можно найти компоненты $\hat{E}_{1,x}^-$ и $\hat{E}_{1,y}^-$ и саму отраженную волну по формулам (22), (23), а также

компоненты $\hat{E}_{N+1,x}^+$ и $\hat{E}_{N+1,y}^+$ вектор-столбца $\hat{\varphi}_{N+1}$ и прошедшую волну по формулам (25), (26). Подробности решения таких задач для пространственно-ограниченных падающих пучков можно найти, например, в работах [15–17].

5. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ, ОТ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ИСТОЧНИКА СТОРОННЕГО ТОКА

Пусть имеется точечный излучатель, расположенный в точке $(0, 0, z_d)$ в области с номером s (см. рис. 4). Пусть этот излучатель определяется плотностью стороннего тока (в комплексном представлении $e^{-i\omega t}$):

$$\mathbf{J}(x, y, z) = (n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z) \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_d),$$

где n_x, n_y, n_z — направляющие косинусы вектора тока вдоль осей координат, причем $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Тогда фурье-образы составляющих этого тока определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \tilde{J}_{s,x}(\xi, \eta, z) &= \\ &= n_x \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_d) e^{-i(\xi x + \eta y)} dx dy = \\ &= n_x \delta(z - z_d), \end{aligned}$$

и аналогично

$$\tilde{J}_{s,y}(\xi, \eta, z) = n_y \delta(z - z_d),$$

$$\tilde{J}_{s,z}(\xi, \eta, z) = n_z \delta(z - z_d).$$

Пусть этот элементарный источник тока находится в бесконечно тонком слое $(z_d - \Delta z/2, z_d + \Delta z/2)$. Тогда уравнения Максвелла (1) и (2) для фурье-образов полей можно записать (при $\Delta z \rightarrow 0$) в виде

$$\begin{cases} i\eta \tilde{E}_{s,z} - \frac{\Delta \tilde{E}_{s,y}}{\Delta z} = i\omega \tilde{B}_{s,x}, \\ \frac{\Delta \tilde{E}_{s,x}}{\Delta z} - i\xi \tilde{E}_{s,z} = i\omega \tilde{B}_{s,y}, \\ i\xi \tilde{E}_{s,y} - i\eta \tilde{E}_{s,x} = i\omega \tilde{B}_{s,z}, \end{cases} \quad (29)$$

$$\begin{cases} i\eta\tilde{B}_{s,z} - \frac{\Delta\tilde{B}_{j,y}}{\Delta z} = \mu_s \left(-i\omega\varepsilon_s\tilde{E}_{s,x} + n_x\delta(z-z_d) \right), \\ \frac{\Delta\tilde{B}_{s,x}}{\Delta z} - i\xi\tilde{B}_{s,z} = \mu_s \left(-i\omega\varepsilon_s\tilde{E}_{s,y} + n_y\delta(z-z_d) \right), \\ i\xi\tilde{B}_{s,y} - i\eta\tilde{B}_{s,x} = \mu_s \left(-i\omega\varepsilon_s\tilde{E}_{s,z} + n_z\delta(z-z_d) \right). \end{cases} \quad (30)$$

Поскольку z -компоненты полей из уравнений (29) и (30) можно выразить через x - и y -компоненты по формулам

$$\tilde{B}_{s,z} = \frac{\xi}{\omega}\tilde{E}_{s,y} - \frac{\eta}{\omega}\tilde{E}_{s,x},$$

$$\tilde{E}_{s,z} = -\frac{\xi}{\omega\varepsilon_s\mu_s}\tilde{B}_{s,y} + \frac{\eta}{\omega\varepsilon_s\mu_s}\tilde{B}_{s,x} + \frac{1}{i\omega\varepsilon_s}\tilde{J}_{s,z},$$

для x - и y -компонент напряженностей электрического и магнитного полей получим

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{E}_{s,x} &= \left(\frac{i\xi\eta}{\omega\varepsilon_s\mu_s}\tilde{B}_{s,x} + i \left(\omega - \frac{\xi^2}{\omega\varepsilon_s\mu_s} \right) \tilde{B}_{s,y} + \frac{\xi}{\omega\varepsilon_s}n_z\delta(z-z_d) \right) \Delta z, \\ \Delta\tilde{E}_{s,y} &= \left(i \left(\frac{\eta^2}{\omega\varepsilon_s\mu_s} - \omega \right) \tilde{B}_{s,x} - \frac{i\xi\eta}{\omega\varepsilon_s\mu_s}\tilde{B}_{s,y} + \frac{\eta}{\omega\varepsilon_s}n_z\delta(z-z_d) \right) \Delta z, \\ \frac{\Delta\tilde{B}_{s,x}}{\mu_s} &= \left(-\frac{i\xi\eta}{\omega\mu_s}\tilde{E}_{s,x} + i \left(\frac{\xi^2}{\omega\mu_s} - \omega\varepsilon_s \right) \tilde{E}_{s,y} + n_y\delta(z-z_d) \right) \Delta z, \\ \frac{\Delta\tilde{B}_{s,y}}{\mu_s} &= \left(i \left(\omega\varepsilon_s - \frac{\eta^2}{\omega\mu_s} \right) \tilde{E}_{s,x} + \frac{i\xi\eta}{\omega\mu_s}\tilde{E}_{s,y} - n_x\delta(z-z_d) \right) \Delta z. \end{aligned}$$

Тогда в пределе $\Delta z \rightarrow 0$ скачок тангенциальных компонент напряженностей электрического и магнитного полей при переходе через бесконечно тонкий слой с током имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{E}_{s,x} &\rightarrow n_z\xi/\omega\varepsilon_s, \\ \Delta\tilde{E}_{s,y} &\rightarrow n_z\eta/\omega\varepsilon_s, \\ \Delta\tilde{B}_{s,x}/\mu_s &\rightarrow n_y, \\ \Delta\tilde{B}_{s,y}/\mu_s &\rightarrow -n_x. \end{aligned}$$

В матричном виде уравнения, связывающие тангенциальные компоненты полей с двух сторон бесконечно тонкого слоя с током, можно записать в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{s,x} \\ \tilde{E}_{s,y} \\ \tilde{B}_{s,x}/\mu_s \\ \tilde{B}_{s,y}/\mu_s \end{pmatrix} \Big|_{z=z_d+0} - \begin{pmatrix} \tilde{E}_{s,x} \\ \tilde{E}_{s,y} \\ \tilde{B}_{s,x}/\mu_s \\ \tilde{B}_{s,y}/\mu_s \end{pmatrix} \Big|_{z=z_d-0} = \begin{pmatrix} n_z\xi/\omega\varepsilon_s \\ n_z\eta/\omega\varepsilon_s \\ n_y \\ -n_x \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Особо отметим, что скачок электрических полей при переходе через рассматриваемый бесконечно тонкий слой (при $\Delta z \rightarrow 0$), вообще говоря, зависит от диэлектрической проницаемости среды ε_s , в которой расположен рассматриваемый источник тока. Но излучение источников, у которых есть только составляющие тока вдоль границы, не зависит в явном виде от диэлектрических свойств среды, в которой они расположены.

Выразим теперь левую часть граничного условия (31) через вектор-столбцы $\hat{\phi}_1$ и $\hat{\phi}_{N+1}$ полупространств снаружи плоскостной структуры. Для этого разобьем область с номером s на две области и обозначим их индексами l и r (левая и правая, если смотреть на рис. 4). Введем вектор-столбцы $\hat{\phi}_l$ и $\hat{\phi}_r$ в этих областях. Тогда тангенциальные компоненты напряженностей полей в (31) можно выразить как

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{s,x} \\ \tilde{E}_{s,y} \\ \tilde{B}_{s,x}/\mu_s \\ \tilde{B}_{s,y}/\mu_s \end{pmatrix} \Big|_{z=z_d-0} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{G}_s & -\mathbf{G}_s \end{pmatrix} \hat{\phi}_l, \quad (32)$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{s,x} \\ \tilde{E}_{s,y} \\ \tilde{B}_{s,x}/\mu_s \\ \tilde{B}_{s,y}/\mu_s \end{pmatrix} \Big|_{z=z_d+0} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{I} \\ \mathbf{G}_s & -e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{G}_s \end{pmatrix} \hat{\phi}_r. \quad (33)$$

Кроме того, из (28) следует, что

$$\hat{\phi}_1 = \mathbf{Q}_L \hat{\phi}_l, \quad (34)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_L &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_2 & -e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{G}_2 \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_2 d_1} \mathbf{G}_2 & -\mathbf{G}_2 \end{pmatrix}^{-1} \times \dots \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_{s-1} d_{s-2}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{s-1} & -e^{i\gamma_{s-1} d_{s-2}} \mathbf{G}_{s-1} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_{s-1} d_{s-2}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_{s-1} d_{s-2}} \mathbf{G}_{s-1} & -\mathbf{G}_{s-1} \end{pmatrix}^{-1} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_s & -e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})} \mathbf{G}_s \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

а также

$$\hat{\phi}_r = \mathbf{Q}_R \hat{\phi}_{N+1}, \quad (35)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R &= \begin{pmatrix} e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{G}_s & -\mathbf{G}_s \end{pmatrix}^{-1} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_{s+1} d_s} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{s+1} & -e^{i\gamma_{s+1} d_s} \mathbf{G}_{s+1} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_{s+1} d_s} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_{s+1} d_s} \mathbf{G}_{s+1} & -\mathbf{G}_{s+1} \end{pmatrix}^{-1} \times \dots \\ &\times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_N & -e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{G}_N \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_N d_{N-1}} \mathbf{G}_N & -\mathbf{G}_N \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_{N+1} & -\mathbf{G}_{N+1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Подставляя (34), (35) в (32), (33) и затем полученные выражения в (31), получаем

$$\mathbf{H}_R \times \hat{\phi}_{N+1} = \mathbf{H}_L \times \hat{\phi}_1 + \mathbf{V}, \quad (36)$$

где $\mathbf{V} = \begin{pmatrix} n_z \xi / \omega \varepsilon_s; n_z \eta / \omega \varepsilon_s; n_y; -n_x \end{pmatrix}^T$ – вектор-столбец, характеризующий возбуждающее воздействие на систему стороннего элементарного тока, а матрицы \mathbf{H}_R и \mathbf{H}_L характеризуют отклик на внешнее возбуждение слоистой структуры справа и слева излучателя и выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_R &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{I} \\ \mathbf{G}_s & -e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{G}_s \end{pmatrix} \mathbf{Q}_R = \\ &= \mathbf{T}_R \times \left(\prod_{m=s+1}^N \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_{N+1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_L &= \begin{pmatrix} e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{G}_s & -\mathbf{G}_s \end{pmatrix} (\mathbf{Q}_L)^{-1} = \\ &= \left(\mathbf{T}_1 \times \left(\prod_{m=2}^{s-1} \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_L \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Здесь матрицы \mathbf{T}_m при $m \neq s$ имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_m &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_m & -e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{G}_m \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_m d_{m-1}} \mathbf{G}_m & -\mathbf{G}_m \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned}$$

а матрицы \mathbf{T}_L и \mathbf{T}_R –

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_L &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{I} \\ \mathbf{G}_s & -e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{G}_s \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_s(z_d-z_{s-1})}\mathbf{G}_s & -\mathbf{G}_s \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_R &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{I} \\ \mathbf{G}_s & -e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{G}_s \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_s(z_s-z_d)}\mathbf{G}_s & -\mathbf{G}_s \end{pmatrix}^{-1}. \end{aligned}$$

В приведенных выше формулах матрицы \mathbf{G}_s выражаются по формуле (16).

Далее, в рассматриваемой задаче источники полей находятся исключительно внутри плоскострой структуры. Поэтому в столбцах $\hat{\phi}_1$ и $\hat{\phi}_{N+1}$ есть только компоненты волн, идущие от плоскострой структуры. Эти столбцы имеют вид

$$\hat{\phi}_1 = \begin{pmatrix} 0; 0; \hat{E}_{1,x}^-; \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix}^T,$$

$$\hat{\phi}_{N+1} = \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+; \hat{E}_{N+1,y}^+; 0; 0 \end{pmatrix}^T.$$

Чтобы получить оставшиеся, отличные от нуля, компоненты $\hat{\phi}_1$ и $\hat{\phi}_{N+1}$, разобьем каждую из матриц

\mathbf{H}_R и \mathbf{H}_L на четыре 2×2 -подматрицы \mathbf{H}_{RA} , \mathbf{H}_{RB} , \mathbf{H}_{RC} , \mathbf{H}_{RD} и \mathbf{H}_{LA} , \mathbf{H}_{LB} , \mathbf{H}_{LC} , \mathbf{H}_{LD} следующим образом:

$$\mathbf{H}_R = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{RA} & \mathbf{H}_{RB} \\ \mathbf{H}_{RC} & \mathbf{H}_{RD} \end{pmatrix},$$

и

$$\mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{LA} & \mathbf{H}_{LB} \\ \mathbf{H}_{LC} & \mathbf{H}_{LD} \end{pmatrix}.$$

Тогда уравнение (36) примет вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{RA} & \mathbf{H}_{RB} \\ \mathbf{H}_{RC} & \mathbf{H}_{RD} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{LA} & \mathbf{H}_{LB} \\ \mathbf{H}_{LC} & \mathbf{H}_{LD} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} + \mathbf{V}. \quad (37)$$

Если еще разбить вектор

$$\mathbf{V} = (V_1; V_2; V_3; V_4)^T$$

на $\mathbf{V}_A = (V_1, V_2)^T$ и $\mathbf{V}_B = (V_3, V_4)^T$, то уравнение (37) можно представить следующей системой из двух матричных уравнений:

$$\mathbf{H}_{RA} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} = \mathbf{H}_{LB} \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} + \mathbf{V}_A,$$

$$\mathbf{H}_{RC} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} = \mathbf{H}_{LD} \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} + \mathbf{V}_B.$$

Полученные уравнения можно снова объединить в одно матричное 4×4 -уравнение:

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{H}_{LB} & \mathbf{H}_{RA} \\ -\mathbf{H}_{LD} & \mathbf{H}_{RC} \end{pmatrix} \hat{\phi}_{out} = \mathbf{V}, \quad (38)$$

где введен вектор-столбец

$$\hat{\phi}_{out} = (\hat{E}_{1,x}^-; \hat{E}_{1,y}^-; \hat{E}_{N+1,x}^+; \hat{E}_{N+1,y}^+)^T.$$

Решая это уравнение, найдем $\hat{E}_{1,x}^-$, $\hat{E}_{1,y}^-$ и $\hat{E}_{N+1,x}^+$, $\hat{E}_{N+1,y}^+$, а значит, уходящую из плоскостной структуры влево волну (в направлении $z \rightarrow -\infty$) по формулам

$$\mathbf{E}_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (39)$$

$$\mathbf{B}_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \xi\eta/\omega\gamma_1 & (\gamma_1^2 + \eta^2)/\omega\gamma_1 \\ -(\gamma_1^2 + \xi^2)/\omega\gamma_1 & -\xi\eta/\omega\gamma_1 \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{1,x}^- \\ \hat{E}_{1,y}^- \end{pmatrix} e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta \quad (40)$$

и волну, уходящую вправо от плоскостной структуры (в направлении $z \rightarrow +\infty$):

$$\mathbf{E}_{N+1}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\xi/\gamma_{N+1} & -\eta/\gamma_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} \times e^{i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (41)$$

$$\mathbf{B}_{N+1}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} -\xi\eta/\omega\gamma_{N+1} & -(\gamma_{N+1}^2 + \eta^2)/\omega\gamma_{N+1} \\ (\gamma_{N+1}^2 + \xi^2)/\omega\gamma_{N+1} & \xi\eta/\omega\gamma_{N+1} \\ -\eta/\omega & \xi/\omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{E}_{N+1,x}^+ \\ \hat{E}_{N+1,y}^+ \end{pmatrix} e^{i\gamma_{N+1}(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (42)$$

Наконец, при необходимости, зная $\hat{\phi}_1$ и $\hat{\phi}_{N+1}$, можно найти вектор-столбцы поля в любой внутренней области $\hat{\phi}_j$, так как они однозначно определяются граничными условиями. После этого электромагнитные поля в любой из этих областей могут быть найдены по формулам (10), (13). Таким образом, электромагнитные поля будут определены во всем пространстве.

6. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ДИПОЛЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ, НАНЕСЕННОЙ НА ПОВЕРХНОСТЬ ПРИЗМЫ

Рассмотрим теперь задачу излучения элементарного горизонтального источника, расположенного на свободной границе пленки (см. рис. 5а) в схеме Кречмана. Поляризация источника — вдоль оси x ($n_x = 1, n_y = 0, n_z = 0$). Толщина пленки равна d . Индекс 1 соответствует полупространству материала призмы, 2 — пленке, 3 — свободному полупространству над пленкой. Тогда $N = 2, z_d = z_2 = d, \mathbf{H}_R = \mathbf{T}_3, \mathbf{H}_L = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1}$ и уравнение (36) примет вид

$$\mathbf{T}_3 \times \hat{\phi}_3 = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} \times \hat{\phi}_1 + \mathbf{V}, \quad (43)$$

где матрицы выражаются следующими формулами:

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix}^{-1},$$

$$\mathbf{T}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_2 d} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_2 & -e^{i\gamma_2 d} \mathbf{G}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\gamma_2 d} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_2 d} \mathbf{G}_2 & -\mathbf{G}_2 \end{pmatrix}^{-1},$$

$$\mathbf{T}_3 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_3 & -\mathbf{G}_3 \end{pmatrix},$$

а вектор-столбец стороннего тока равен $\mathbf{V} = (0; 0; 0; -1)^T$.

Учитывая, что $(\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} = \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1}$, получим

$$\mathbf{H}_L = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} = \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_2 d} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ e^{i\gamma_2 d} \mathbf{G}_2 & -\mathbf{G}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & e^{i\gamma_2 d} \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_2 & -e^{i\gamma_2 d} \mathbf{G}_2 \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{G}_1 & -\mathbf{G}_1 \end{pmatrix}.$$

Вводя вектор-столбец $\hat{\phi}_{out} = (\hat{E}_{1,x}^-; \hat{E}_{1,y}^-; \hat{E}_{3,x}^+; \hat{E}_{3,y}^+)^T$, уравнение (38) для данной задачи можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{H}_{LB} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{H}_{LD} & \mathbf{G}_3 \end{pmatrix} \times \hat{\phi}_{out} = \mathbf{V}. \quad (44)$$

Решая линейное уравнение (44), найдем $\hat{E}_{1,x}^-$, $\hat{E}_{1,y}^-$ и $\hat{E}_{3,x}^+$, $\hat{E}_{3,y}^+$, и затем по формулам (39)–(42) при $N = 2$ получим уходящую волну из плоскостной структуры в призму (в область 1) и свободное пространство (область 3) над пленкой (в направлениях $z \rightarrow \pm\infty$ от границ пленки).

Снова будем считать, что среды немагнитные и $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu_0$. Тогда, учитывая $k_j^2 = \varepsilon_j \mu_0 \omega^2$, выражения для подматриц \mathbf{H}_{LB} и \mathbf{H}_{LD} можно получить в явном виде:

$$\mathbf{H}_{LB} = \begin{pmatrix} \cos(\gamma_2 d) + i \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{\xi^2}{\gamma_1} - \gamma_1 \right) \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_2} & i \xi \eta \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_1 \gamma_2} \\ i \xi \eta \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_1 \gamma_2} & \cos(\gamma_2 d) + i \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{\eta^2}{\gamma_1} - \gamma_1 \right) \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_2} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_{LD} = \begin{pmatrix} \frac{\xi \eta}{\mu_0 \omega} \left(\frac{\cos(\gamma_2 d)}{\gamma_1} - i \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_2} \right) & \frac{\gamma_1^2 + \eta^2}{\gamma_1 \mu_0 \omega} \cos(\gamma_2 d) - i \frac{\gamma_2^2 + \eta^2}{\gamma_2 \mu_0 \omega} \sin(\gamma_2 d) \\ -\frac{\gamma_1^2 + \xi^2}{\gamma_1 \mu_0 \omega} \cos(\gamma_2 d) + i \frac{\gamma_2^2 + \xi^2}{\gamma_2 \mu_0 \omega} \sin(\gamma_2 d) & -\frac{\xi \eta}{\mu_0 \omega} \left(\frac{\cos(\gamma_2 d)}{\gamma_1} - i \frac{\sin(\gamma_2 d)}{\gamma_2} \right) \end{pmatrix}.$$

Решив уравнение (44), найдем следующие аналитические выражения для $\hat{E}_{1,x}^-$, $\hat{E}_{1,y}^-$, $\hat{E}_{1,z}^-$:

$$\hat{E}_{1,x}^- = \frac{a_{1x} + d_{1x} \eta^2}{\omega \mu_0 D} \cos(\gamma_2 d) + i \frac{b_{1x} + e_{1x} \eta^2}{\omega \mu_0 D} \sin(\gamma_2 d), \quad (45)$$

$$\hat{E}_{1,y}^- = \frac{\xi \eta}{\omega \mu_0 D} (a_{1y} \cos(\gamma_2 d) + i b_{1y} \sin(\gamma_2 d)), \quad (46)$$

$$\hat{E}_{1,z}^- = \xi \hat{E}_{1,x}^- / \gamma_1 + \eta \hat{E}_{1,y}^- / \gamma_1, \quad (47)$$

и выражения для $\hat{E}_{3,x}^+$, $\hat{E}_{3,y}^+$, $\hat{E}_{3,z}^+$:

$$\hat{E}_{3,x}^+ = \frac{a_{3x} + d_{3x}\eta^2}{\omega\mu_0 D} \cos^2(\gamma_2 d) + \frac{b_{3x} + e_{3x}\eta^2}{\omega\mu_0 D} \sin^2(\gamma_2 d) + i \frac{c_{3x} + f_{3x}\eta^2}{\omega\mu_0 D} \times \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d), \quad (48)$$

$$\hat{E}_{3,y}^+ = \frac{\xi\eta}{\omega\mu_0 D} (a_{3y} \cos^2(\gamma_2 d) + b_{3y} \sin^2(\gamma_2 d) + ic_{3y} \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d)), \quad (49)$$

$$\hat{E}_{3,z}^+ = -\xi \hat{E}_{3,x}^+ / \gamma_3 - \eta \hat{E}_{3,y}^+ / \gamma_3. \quad (50)$$

В формулах (45)–(50) коэффициенты a , b , c , d , e , f являются функциями γ_1 , γ_2 и γ_3 . Выражения для этих коэффициентов представлены в Приложении А. Кроме того, функция $D(\xi, \eta)$ есть детерминант матрицы уравнения (44). Оказалось, что $D(\xi, \eta) = D(\lambda)$ есть функция $\lambda = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$ и записывается в виде аналитического выражения:

$$D(\lambda) = \Delta_1 \cos^2(\gamma_2 d) + \Delta_2 \sin^2(\gamma_2 d) + \Delta_3 \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d),$$

где

$$\Delta_1 = \frac{1}{\omega^2 \mu_0^2} \frac{(\gamma_1 + \gamma_3)^2 (\gamma_1 \gamma_3 + \lambda^2)}{\gamma_1 \gamma_3},$$

$$\Delta_2 = -\frac{1}{\omega^2 \mu_0^2} \frac{(\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2)^2}{\gamma_1 \gamma_3 \gamma_2^2 k_2^2} \times \left(\lambda^4 + \frac{\gamma_2^2 (\gamma_1 + \gamma_3)^2}{\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2} \lambda^2 + \gamma_1 \gamma_2^2 \gamma_3 \right),$$

$$\Delta_3 = -\frac{i(\gamma_1 + \gamma_3)}{\omega^2 \mu_0^2 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 k_2^2} \left\{ 2(\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2) (\gamma_1 \gamma_3 \gamma_2^2 + \lambda^4) + (\gamma_1^2 \gamma_3^2 + \gamma_1^2 \gamma_2^2 + 4\gamma_1 \gamma_3 \gamma_2^2 + \gamma_3^2 \gamma_2^2 + \gamma_2^4) \lambda^2 \right\}.$$

Естественно, что полученные выражения (45)–(50) переходят в соответствующие выражения для диполя на границе двух полупространств, когда толщина пленки d стремится к нулю, при этом полученные выражения можно точно свести к известным формулам [8].

Аналитические выражения (45)–(50) имеют первостепенное значение, так как позволяют получить выражения для электрических полей в полупространствах через одномерные интегралы, что значительно ускоряет счет и повышает точность вычислений. Действительно, если перейти к полярным координатам в плоскостях (x, y) и (ξ, η) по формулам

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi, & y &= \rho \sin \varphi, \\ \xi &= \lambda \cos \vartheta, & \eta &= \lambda \sin \vartheta \end{aligned} \quad (51)$$

получим, что величины $\gamma_1 = \sqrt{k_1^2 - \lambda^2}$, $\gamma_2 = \sqrt{k_2^2 - \lambda^2}$, $\gamma_3 = \sqrt{k_3^2 - \lambda^2}$, зависящие от них множители и детерминант $D(\lambda) = D(\lambda \cos \vartheta, \lambda \sin \vartheta)$ являются функциями только λ и не зависят от ϑ . Поэтому выражения для соответствующих полей, как будет показано ниже, можно привести к одномерным интегралам.

Рассмотрим электрические поля в полупространствах (в областях с номерами $j = 1$ и $j = 3$). Сначала рассмотрим (см. представление (39)) в полупространстве с $j = 1$:

$$E_{1,x}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{1,x}^- e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Подставим выражение (45) для $\hat{E}_{1,x}^-$, перейдем к полярным координатам (51) и получим

$$\begin{aligned} E_{1,x}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} (Q_{1x}(\gamma) + R_{1x}(\gamma) \lambda^2 \sin^2 \vartheta) e^{-i\gamma_1 z} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi - \vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} (Q_{1x}(\gamma) + R_{1x}(\gamma) \lambda^2) \lambda e^{-i\gamma_1 z} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi - \vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda - \\ &\quad - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} R_{1x}(\gamma) \lambda^3 e^{-i\gamma_1 z} \left(\int_0^{2\pi} \cos^2 \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi - \vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda, \quad (52) \end{aligned}$$

где введены следующие (зависящие только от λ) функции:

$$Q_{1x}(\gamma) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (a_{1x} \cos(\gamma_2 d) + ib_{1x} \sin(\gamma_2 d)),$$

$$R_{1x}(\gamma) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (d_{1x} \cos(\gamma_2 d) + ie_{1x} \sin(\gamma_2 d)).$$

Интегралы в скобках в (52) могут быть выражены через функции Бесселя, если использовать их интегральное представление,

$$J_n(\rho\lambda) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos\theta} e^{in\theta} d\theta. \quad (53)$$

В частности, нетрудно показать, что из (53) следует следующий ряд тождеств:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta &= 2\pi J_0(\rho\lambda), \\ \int_0^{2\pi} \cos\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta &= 2\pi i \cos\varphi J_1(\rho\lambda), \\ \int_0^{2\pi} \cos^2\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta &= \pi (J_0(\rho\lambda) - \\ &- J_2(\rho\lambda) \cos 2\varphi), \\ \int_0^{2\pi} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta &= \\ &= \pi \sin 2\varphi \left(J_0(\rho\lambda) - \frac{2}{\rho\lambda} J_1(\rho\lambda) \right), \\ \int_0^{2\pi} \cos\vartheta \sin^2\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta &= i2\pi \times \\ &\times \cos\varphi \left(\sin^2\varphi J_1(\rho\lambda) + (1-4\sin^2\varphi) \frac{J_2(\rho\lambda)}{\rho\lambda} \right). \end{aligned} \quad (54)$$

Подставляя соответствующие выражения (54) интегралов по ϑ в (52), получим

$$\begin{aligned} E_{1,x}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} (2Q_{1x}(\gamma) + R_{1x}(\gamma) \lambda^2) \times \\ &\times \lambda e^{-i\gamma_1 z} J_0(\rho\lambda) d\lambda + \\ &+ \frac{\cos 2\varphi}{4\pi} \int_0^{+\infty} R_{1x}(\gamma) \lambda^3 J_2(\rho\lambda) e^{-i\gamma_1 z} d\lambda. \end{aligned} \quad (55)$$

Аналогичное рассмотрение проведем для y -компоненты. Из (39) и (46) получим

$$E_{1,y}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{1,y}^- e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Подставляя выражение (46) для $\hat{E}_{1,y}^-$, после перехода к полярным координатам (51), получим

$$\begin{aligned} E_{1,y}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} Q_{1y}(\gamma) \lambda^2 \cos\vartheta \sin\vartheta \times \right. \\ &\times \left. e^{-i\gamma_1 z} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda^3 Q_{1y}(\gamma) e^{-i\gamma_1 z} \times \\ &\times \left(\int_0^{2\pi} \cos\vartheta \sin\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda, \end{aligned}$$

где введена функция от λ :

$$Q_{1y}(\gamma) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (a_{1y} \cos(\gamma_2 d) + ib_{1y} \sin(\gamma_2 d)).$$

Учитывая соответствующее интегральное представление (54) интеграла по ϑ , получим для $E_{1,y}$ выражение

$$\begin{aligned} E_{1,y}(\rho, \varphi, z) &= \frac{\sin 2\varphi}{4\pi} \int_0^{+\infty} \lambda^3 Q_{1y}(\gamma) \times \\ &\times \left(J_0(\rho\lambda) - \frac{2}{\rho\lambda} J_1(\rho\lambda) \right) e^{-i\gamma_1 z} d\lambda. \end{aligned} \quad (56)$$

Оставшуюся компоненту $E_{1,z}$ в первом полупространстве из (39) запишем в виде

$$\begin{aligned} E_{1,z}(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\xi \hat{E}_{1,x}^-}{\gamma_1} + \frac{\eta \hat{E}_{1,y}^-}{\gamma_1} \right) e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \end{aligned}$$

и, подставляя выражения для $\hat{E}_{1,x}^-$ и $\hat{E}_{1,y}^-$ по формулам (45) и (46), после перехода к полярным координатам получим

$$\begin{aligned}
 E_{1,z}(\rho, \varphi, z) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{Q_{1x}(\gamma) \lambda^2 e^{i\gamma_1 z}}{\gamma_1} \times \\
 & \times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda + \\
 & + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{(R_{1x}(\gamma) + Q_{1y}(\gamma)) \lambda^4}{\gamma_1} e^{i\gamma_1 z} \times \\
 & \times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \int_0^{+\infty} \frac{(R_{1x}(\gamma) + Q_{1y}(\gamma)) \lambda^4 J_1(\rho\lambda)}{\gamma_1} e^{-i\gamma_1 z} d\lambda + \\
 & + \frac{i \cos \varphi (1 - 4 \sin^2 \varphi)}{2\pi} \times \\
 & \times \int_0^{+\infty} \frac{(R_{1x}(\gamma) + Q_{1y}(\gamma)) \lambda^3 J_2(\rho\lambda)}{\rho\gamma_1} e^{-i\gamma_1 z} d\lambda. \quad (57)
 \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим электрическое поле в полупространстве (с номером $j = 3$). Составляющую по оси x получим из (41) в виде

Используя соответствующие интегральные представления (54) для интегралов по ϑ , получим

$$\begin{aligned}
 E_{1,z}(\rho, \varphi, z) = & \frac{i \cos \varphi}{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{Q_{1x}(\gamma) \lambda^2 e^{-i\gamma_1 z}}{\gamma_1} J_1(\rho\lambda) d\lambda + \\
 & + \frac{i \cos \varphi \sin^2 \varphi}{2\pi} \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_{3,x}(x, y, z) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{3,x}^+ e^{i\gamma_3(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.
 \end{aligned}$$

Преобразуя выражение (48) и переходя к полярным координатам (51), $E_{3,x}$ можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 E_{3,x}(\rho, \varphi, z) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} (Q_{3x}(\gamma) + R_{3x}(\gamma) \lambda^2 \sin^2 \vartheta) e^{i\gamma_3(z-d)} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\
 = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} (Q_{3x}(\gamma) + \lambda^2 R_{3x}(\gamma)) e^{i\gamma_3(z-d)} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda - \\
 & - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda^2 R_{3x}(\gamma) e^{i\gamma_3(z-d)} \left(\int_0^{2\pi} \cos^2 \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda,
 \end{aligned}$$

где введены следующие зависящие только от λ функции:

$$\begin{aligned}
 Q_{3x}(\gamma) = & \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (a_{3x} \cos^2(\gamma_2 d) + b_{3x} \sin^2(\gamma_2 d) + \\
 & + ic_{3x} \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{3x}(\gamma) = & \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (d_{3x} \cos^2(\gamma_2 d) + \\
 & + e_{3x} \sin^2(\gamma_2 d) + if_{3x} \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d)).
 \end{aligned}$$

Используя соответствующие интегральные представления (54) для интегралов по ϑ , получим

$$\begin{aligned}
 E_{3,x}(\rho, \varphi, z) = & \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} (2Q_{3x}(\gamma) + \lambda^2 R_{3x}(\gamma)) \times \\
 & \times J_0(\rho\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \lambda d\lambda + \frac{\cos 2\varphi}{4\pi} \times \\
 & \times \int_0^{+\infty} \lambda^3 R_{3x}(\gamma) J_2(\rho\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} d\lambda. \quad (58)
 \end{aligned}$$

Аналогично, в представлении

$$\begin{aligned}
 E_{3,y}(x, y, z) = & \\
 = & (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{3,y}^+ e^{i\gamma_3(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta
 \end{aligned}$$

запишем $\hat{E}_{3,y}^+$ в виде (49) и перейдем к полярным координатам:

$$\begin{aligned}
 E_{3,y}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\
 &\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} Q_{3y}(\gamma) \lambda^2 \cos \vartheta \sin \vartheta e^{i\gamma_3(z-d)} \times \right. \\
 &\quad \left. \times e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda^3 Q_{3y}(\gamma) e^{i\gamma_3(z-d)} \times \\
 &\quad \times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda,
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 Q_{3y}(\gamma) &= \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (a_{3y} \cos^2(\gamma_2 d) + \\
 &\quad + b_{3y} \sin^2(\gamma_2 d) + ic_{3y} \cos(\gamma_2 d) \sin(\gamma_2 d)).
 \end{aligned}$$

Учитывая соответствующее интегральное представление (54), получим

$$\begin{aligned}
 E_{3,y}(\rho, \varphi, z) &= \frac{\sin 2\varphi}{4\pi} \int_0^{+\infty} \lambda^3 Q_{3y}(\gamma) \times \\
 &\quad \times \left(J_0(\rho\lambda) - \frac{2}{\rho\lambda} J_1(\rho\lambda) \right) e^{i\gamma_3(z-d)} d\lambda. \quad (59)
 \end{aligned}$$

Наконец, для составляющей $E_{3,z}$, учитывая (50), получим аналогично

$$\begin{aligned}
 E_{3,z}(x, y, z) &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\xi \hat{E}_{3,x}^+}{\gamma_3} + \frac{\eta \hat{E}_{3,y}^+}{\gamma_3} \right) \times \\
 &\quad \times e^{i\gamma_3(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.
 \end{aligned}$$

Переходя к полярным координатам, запишем следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 E_{3,z}(\rho, \varphi, z) &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{Q_{3x}(\gamma) \lambda^2 e^{i\gamma_3(z-d)}}{\gamma_3} \times \\
 &\quad \times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda - \\
 &\quad - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{(R_{3x}(\gamma) + Q_{3y}(\gamma)) \lambda^4}{\gamma_3} e^{i\gamma_3(z-d)} \times \\
 &\quad \times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) d\lambda.
 \end{aligned}$$

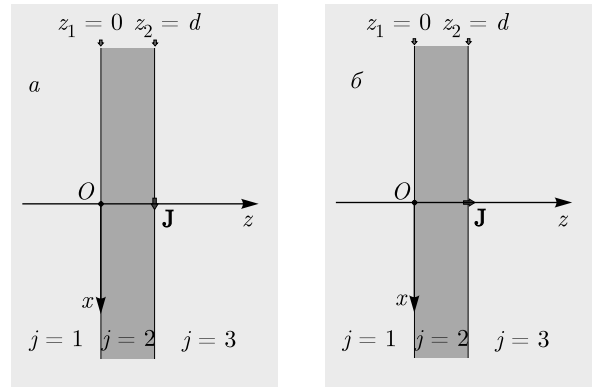


Рис. 5. Геометрия задачи излучения элементарного источника тока, расположенного на свободной границе пленки в схеме Кречмана при ориентации дипольного момента параллельно (а) и перпендикулярно (б) границе

Учитывая (54), получим

$$\begin{aligned}
 E_{3,z}(\rho, \varphi, z) &= -\frac{i \cos \varphi}{2\pi} \times \\
 &\quad \times \int_0^{+\infty} \frac{Q_{3x}(\gamma) \lambda^2 J_1(\rho\lambda)}{\gamma_3} e^{i\gamma_3(z-d)} d\lambda - \\
 &\quad - \frac{i \cos \varphi \sin^2 \varphi}{2\pi} \times \\
 &\quad \times \int_0^{+\infty} \frac{(R_{3x}(\gamma) + Q_{3y}(\gamma)) \lambda^4 J_1(\rho\lambda)}{\gamma_3} e^{i\gamma_3(z-d)} d\lambda - \\
 &\quad - \frac{i \cos \varphi (1 - 4 \sin^2 \varphi)}{2\pi} \times \\
 &\quad \times \int_0^{+\infty} \frac{(R_{3x}(\gamma) + Q_{3y}(\gamma)) \lambda^3 J_2(\rho\lambda)}{\rho\gamma_3} e^{i\gamma_3(z-d)} d\lambda. \quad (60)
 \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили точные аналитические выражения для электрических полей в полупространствах, окружающих пленку.

7. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ВЕРТИКАЛЬНОГО ДИПОЛЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ, НАНЕСЕННОЙ НА ПОВЕРХНОСТЬ ПРИЗМЫ

Рассмотрим задачу излучения элементарного вертикального излучателя, расположенного на свободной границе пленки (см. рис. 5б) в схеме Кречмана. Будем считать, что излучатель находится в свободном полупространстве, в области 3,

бесконечно близко к границе. Поляризация источника — вдоль оси z ($n_x = 0, n_y = 0, n_z = 1$). Применяя те же рассуждения, что и для горизонтального диполя, получим для фурье-образов полей $\hat{E}_{1,x}^-, \hat{E}_{1,y}^-$ и $\hat{E}_{3,x}^+, \hat{E}_{3,y}^+$ уравнение (44), в котором вектор-столбец правой части равен

$$\mathbf{V} = \left(\xi/\omega\varepsilon_3; \eta/\omega\varepsilon_3; 0; 0 \right)^T.$$

Решая уравнение (44), найдем $\hat{E}_{1,x}^-, \hat{E}_{1,y}^-$ и $\hat{E}_{3,x}^+, \hat{E}_{3,y}^+$ и далее по формулам (39)–(42) при $N = 2, z_d = z_2 = d$ получим уходящую волну из плоскостной структуры в призму (в область 1) и свободное пространство (область 3) над пленкой (в направлениях $z \rightarrow \pm\infty$ от границ пленки).

Снова будем считать, что среды немагнитные и $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu_0$. Выражения для подматриц \mathbf{H}_{LB} и \mathbf{H}_{LD} те же, что и приведенные выше выражения для горизонтального диполя.

Решив уравнение (44) для вертикального диполя и учитывая, что $k_3^2 = \varepsilon_3\mu_0\omega^2$, найдем следующие аналитические выражения для $\hat{E}_{1,x}^-, \hat{E}_{1,y}^-, \hat{E}_{1,z}^-$:

$$\hat{E}_{1,x}^- = \frac{\xi}{\omega\mu_0 D} (u_{1x} \cos(\gamma_2 d) + iv_{1x} \sin(\gamma_2 d)), \quad (61)$$

$$\hat{E}_{1,y}^- = \frac{\eta}{\omega\mu_0 D} (u_{1y} \cos(\gamma_2 d) + iv_{1y} \sin(\gamma_2 d)), \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_{1,z}^- &= \frac{\xi \hat{E}_{1,x}^-}{\gamma_1} + \frac{\eta \hat{E}_{1,y}^-}{\gamma_1} = \\ &= \frac{\xi^2 + \eta^2}{\omega\mu_0 D} (u_{1z} \cos(\gamma_2 d) + iv_{1z} \sin(\gamma_2 d)). \end{aligned} \quad (63)$$

Аналогично найдем $\hat{E}_{3,x}^+, \hat{E}_{3,y}^+$ и $\hat{E}_{3,z}^+$:

$$\begin{aligned} \hat{E}_{3,x}^+ &= \frac{\xi}{\omega\mu_0 D} (u_{3x} \cos^2(\gamma_2 d) + v_{3x} \sin^2(\gamma_2 d) + \\ &+ iw_{3x} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d)), \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_{3,y}^+ &= \frac{\eta}{\omega\mu_0 D} (u_{3y} \cos^2(\gamma_2 d) + v_{3y} \sin^2(\gamma_2 d) + \\ &+ iw_{3y} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d)), \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_{3,z}^+ &= -\frac{\xi \hat{E}_{3,x}^+}{\gamma_3} - \frac{\eta \hat{E}_{3,y}^+}{\gamma_3} = \frac{\xi^2 + \eta^2}{\omega\mu_0 D} \times \\ &\times (u_{3z} \cos^2(\gamma_2 d) + v_{3z} \sin^2(\gamma_2 d) + \\ &+ iw_{3z} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d)). \end{aligned} \quad (66)$$

В формулах (61)–(66) коэффициенты u, v, w являются функциями γ_1, γ_2 и γ_3 . Выражения для этих коэффициентов представлены в Приложении В.

Найдем теперь поля в полупространствах.

Полупространство $j = 1$. Составляющая $E_{1,x}$ определяется формулой

$$E_{1,x}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{1,x}^- e^{-i\gamma_1 z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Подставим выражение (61) для $\hat{E}_{1,x}^-$ и перейдем к полярным координатам. Учитывая тождества (54), получим

$$\begin{aligned} E_{1,x}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda S_{1,x}(\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \times \\ &\times \left(\int_0^{2\pi} \cos \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi - \vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ &= \frac{i \cos \varphi}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{1,x}(\lambda) J_1(\rho\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \lambda^2 d\lambda, \end{aligned} \quad (67)$$

где

$$S_{1,x}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{1x} \cos(\gamma_2 d) + iv_{1x} \sin(\gamma_2 d))$$

— функция только от λ .

Аналогично для составляющей $E_{1,y}$, учитывая тождества (54), получим

$$\begin{aligned} E_{1,y}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda S_{1,y}(\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \times \\ &\times \left(\int_0^{2\pi} \sin \vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi - \vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ &= \frac{i \sin \varphi}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{1,y}(\lambda) J_1(\rho\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \lambda^2 d\lambda, \end{aligned} \quad (68)$$

где

$$S_{1,y}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{1y} \cos(\gamma_2 d) + iv_{1y} \sin(\gamma_2 d))$$

— также функция только от λ .

Отметим, что из (67) и (68) следует, что в цилиндрических координатах $E_{1,\rho}(\rho, z) = E_{1,x} \cos \varphi + E_{1,y} \sin \varphi$ не зависит от φ , что соответствует симметрии задачи. Из симметрии также следует, что

$E_{1,z}$ не зависит от φ . Действительно, учитывая (54), получим

$$E_{1,z}(\rho, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda^2 S_{1,z}(\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \times \\ \times \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{1,z}(\lambda) J_0(\rho\lambda) e^{-i\gamma_1 z} \lambda^3 d\lambda, \quad (69)$$

где

$$S_{1,z}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{1z} \cos(\gamma_2 d) + i v_{1z} \sin(\gamma_2 d)).$$

Полупространство $j = 3$. Приведем аналогичные выражения для составляющих полей. Составляющая по оси x представляется в виде

$$E_{3,x}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{E}_{3,x}^+ e^{i\gamma_3(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Переходя к полярным координатам и учитывая (54), получим

$$E_{3,x}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda S_{3,x}(\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \times \\ \times \left(\int_0^{2\pi} \cos\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ = \frac{i \cos\varphi}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{3,x}(\lambda) J_1(\rho\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \lambda^2 d\lambda, \quad (70)$$

где

$$S_{3,x}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{3x} \cos^2(\gamma_2 d) + \\ + v_{3x} \sin^2(\gamma_2 d) + i w_{3x} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d))$$

— функция только от λ .

Аналогично,

$$E_{3,y}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda S_{3,y}(\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \times \\ \times \left(\int_0^{2\pi} \sin\vartheta e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ = \frac{i \sin\varphi}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{3,y}(\lambda) J_1(\rho\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \lambda^2 d\lambda, \quad (71)$$

где

$$S_{3,y}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{3y} \cos^2(\gamma_2 d) + \\ + v_{3y} \sin^2(\gamma_2 d) + i w_{3y} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d)).$$

Наконец,

$$E_{3,z}(\rho, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \lambda^2 S_{3,z}(\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \times \\ \times \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\varphi-\vartheta)} d\vartheta \right) \lambda d\lambda = \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} S_{3,z}(\lambda) J_0(\rho\lambda) e^{i\gamma_3(z-d)} \lambda^3 d\lambda, \quad (72)$$

где

$$S_{3,z}(\lambda) = \frac{1}{\omega\mu_0 D(\lambda)} (u_{3z} \cos^2(\gamma_2 d) + \\ + v_{3z} \sin^2(\gamma_2 d) + i w_{3z} \sin(\gamma_2 d) \cos(\gamma_2 d)).$$

Итак, мы получили выражения для электрического поля вертикального диполя, расположенного на границе пленки в окружающих пленку полупространствах.

8. ЭЛЕМЕНТАРНЫЙ ВЕРТИКАЛЬНЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ НА СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕ ПЛЕНКИ ЗОЛОТА В СХЕМЕ КРЕЧМАНА

Данная статья задумывалась как продолжение работы по изучению явлений, связанных с поверхностной плазмонной волной, которая возбуждается по схеме Кречмана и распространяется вдоль свободной поверхности пленки металла (например, золота) определенной толщины, нанесенной на призму [18]. На свободной поверхности пленки возбуждается волна, которая имеет высокую интенсивность на границе раздела и убывает экспоненциально в направлении, нормальном к границе. Если поместить на свободной поверхности молекулу или наноструктуру, в которой будет индуцироваться поверхностной волной дипольный момент, то можно найти излучение индуцированного диполя, разложив диполь на параллельную и перпендикулярную границе составляющие.

Излучение диполя, ориентированного параллельно границе, было исследовано в работе [19].

В данной работе мы рассмотрим элементарный излучатель, с вертикальным дипольным моментом, направленным перпендикулярно пленке. Интерес представляет пространственная направленность излучения этого диполя в двух случаях: при излучении диполя на границе двух полупространств без пленки ($d \rightarrow 0$) и с металлической пленкой, по свободной границе которой может распространяться поверхностная плазмонная волна. Это сравнение поможет понять влияние поверхностной волны на направленные свойства элементарного излучателя.

Итак, выберем частоту излучения диполя ω , соответствующую длине волны в вакууме, равной $\lambda_0 = 633$ нм, показатель преломления полупространства призмы на этой частоте выберем равным $n_p = 1.6$ ($\varepsilon_1 = 2.56\varepsilon_0$, где ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума), показатель преломления свободного полупространства над пленкой — $n_1 = 1$ ($\varepsilon_3 = \varepsilon_0$). Диэлектрическую проницаемость золотой пленки на заданной частоте примем равной $\varepsilon_2 = (-11.6 + i1.2)\varepsilon_0$ [12], а ее толщину — $d = 48.6$ нм. Как было показано [18], при таких параметрах в пленке наилучшим образом возбуждается поверхностная плазмонная волна при падении плоской волны p -поляризации со стороны призмы под углом $\alpha_{opt} = 40.98^\circ$ к нормали. Для того чтобы оценить влияние такой пленки на излучение диполя в полупространство призмы и свободное полупространство, были вычислены диаграммы направленности вертикального диполя, т. е. в плоскостях, нормальных границе, проходящих через центр диполя. Диаграммы вычислялись по амплитуде поля и нормировались на максимум излучения.

На рис. 6а показаны диаграммы направленности элементарного вертикального диполя в полупространство призмы для двух случаев. Первый случай — пленка отсутствует (кривая 1), при этом диполь расположен на границе двух полупространств с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_3 со стороны полупространства с ε_3 . Второй случай — с пленкой (кривая 2), когда диполь расположен на свободной границе золотой пленки (см. рис. 5б) (на границе областей с проницаемостями ε_2 и ε_3 со стороны полупространства с ε_3). Диаграммы направленности представляют собой графики амплитуды вектора электрического поля E_a в точках на линии пересечения плоскости, проходящей через диполь, и сферы большого радиуса R_s в зависимости от полярного угла θ . Центр сферы находился в начале координат. Угол θ отсчитывался от оси z . В численных расчетах радиус сферы принимался равным

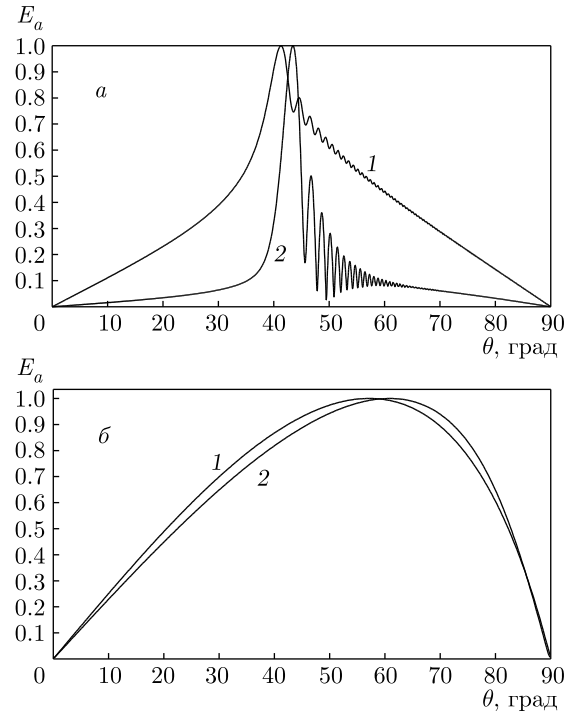


Рис. 6. Нормированные диаграммы направленности по амплитуде поля, вычисленные для элементарного вертикального диполя, расположенного на границе двух полупространств (кривые 1) и на границе золотой пленки оптимальной толщины, нанесенной на призму (кривые 2), в сторону призмы (а) и в сторону свободного пространства (б)

$R_s = 158\lambda_0$, т. е. поля вычислялись в дальней зоне излучения диполя.

Из рис. 6а видно, что в отсутствие металлической пленки максимум излучения в призму примерно соответствует углу полного внутреннего отражения призмы (кривая 1), который равен 38.7° . Когда появляется металлическая пленка, возникает резкий пик излучения (кривая 2) при угле примерно 41° , однако однозначно связать этот пик на диаграмме с возбуждением поверхностной волны, как кажется, нельзя. Интерференционные биения на кривых, как показали расчеты, определяются конечностью радиуса R_s и в пределе бесконечного радиуса исчезают. На рис. 6б представлены такие же, как на рис. 6а, диаграммы направленности, но в сторону свободного полупространства (в область с проницаемостью ε_3). Из рисунка видно, что наличие металлической пленки качественно не меняет направленных свойств излучения диполя в сторону свободного полупространства.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, предложено теоретическое рассмотрение электромагнитного излучения элементарного дипольного источника, расположенного в плоскослоистой среде. Предложен аналитический метод сведения электромагнитных полей к одномерным интегралам для задачи излучения точечного диполя, расположенного на границе одной пленки. Показана общность метода. Рассмотрена прикладная задача – нахождение направленных характеристик излучения нанобъектов, находящихся на свободной поверхности пленки золота оптимальной толщины в схеме Кречмана. Показано, что, при ориентации излучающего диполя перпендикулярно границе, наличие металлической пленки, в которой может возбуждаться поверхностная волна, существенно влияет на диаграмму направленности излучателя в полупространство призмы, а в свободное полупространство практически не влияет.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Приведем выражения для коэффициентов a, b, c, d, e, f .

Коэффициенты в формуле (45):

$$a_{1x} = -(\gamma_1 + \gamma_3), \quad d_{1x} = -\frac{\gamma_1 + \gamma_3}{\gamma_1 \gamma_3},$$

$$b_{1x} = \frac{\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2}{\gamma_2},$$

$$e_{1x} = \frac{\gamma_3 + \gamma_1}{\gamma_2 \gamma_3} + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) k_3^2}{\varepsilon_2 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}.$$

Коэффициенты в формуле (46):

$$a_{1y} = \frac{\gamma_1 + \gamma_3}{\gamma_1 \gamma_3},$$

$$b_{1y} = \frac{1}{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3} \left(\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) k_3^2}{\varepsilon_2} - \gamma_1 (\gamma_1 + \gamma_3) \right).$$

Коэффициенты в формуле (48):

$$a_{3x} = -(\gamma_1 + \gamma_3), \quad d_{3x} = -\frac{\gamma_1 + \gamma_3}{\gamma_1 \gamma_3},$$

$$b_{3x} = \frac{1}{\gamma_1 k_2^2} [\gamma_1 \gamma_3 (k_3^2 - \gamma_3^2) + \gamma_3 \gamma_1^3 + \gamma_2^2 k_1^2],$$

$$e_{3x} = \frac{1}{k_2^2 \gamma_1 \gamma_2^2 \gamma_3} [\gamma_3 \gamma_1^2 (k_2^2 + \gamma_2^2) - \gamma_3 \gamma_2^4 + k_1^2 \gamma_1 \gamma_2^2],$$

$$c_{3x} = \frac{\gamma_3}{\gamma_1 \gamma_2 k_2^2} ((\gamma_2^2 + \gamma_1^2) (k_3^2 - \gamma_3^2) + 2\gamma_1^2 \gamma_2^2) + \frac{1}{\gamma_2 k_2^2} (\gamma_2^4 + \gamma_1^2 \gamma_2^2 + 2\gamma_2^2 (k_2^2 - \gamma_2^2)),$$

$$f_{3x} = \frac{1}{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 k_2^2} (k_3^2 (\gamma_2^2 + \gamma_1^2) + 2\gamma_1^2 \gamma_2^2 - \gamma_3^2 (\gamma_2^2 + \gamma_1^2)) + \frac{1}{\gamma_2 k_2^2} (2k_2^2 + \gamma_1^2 - \gamma_2^2).$$

Коэффициенты в формуле (49):

$$a_{3y} = \frac{\gamma_1 + \gamma_3}{\gamma_1 \gamma_3},$$

$$b_{3y} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{\gamma_1 (k_3^2 - \gamma_3^2) - \gamma_2^2 \gamma_3}{\gamma_1 \gamma_2^2 \gamma_3} - \frac{\gamma_1 (\gamma_1 + \gamma_3)}{\gamma_2^2 \gamma_3},$$

$$c_{3y} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} \frac{k_3^2 - \gamma_3 (\gamma_1 + \gamma_3)}{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3} - \frac{2(\gamma_1 + \gamma_3)}{\gamma_2 \gamma_3}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Приведем выражения для коэффициентов u, v, w .

Коэффициенты в формуле (61):

$$u_{1x} = -\frac{\gamma_3 + \gamma_1}{\gamma_3}, \quad v_{1x} = \frac{\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2}{\gamma_2 \gamma_3}.$$

Коэффициенты в формуле (62):

$$u_{1y} = -\frac{\gamma_3 + \gamma_1}{\gamma_3}, \quad v_{1y} = \frac{\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2}{\gamma_2 \gamma_3}.$$

Коэффициенты в формуле (63):

$$u_{1z} = -\frac{\gamma_3 + \gamma_1}{\gamma_1 \gamma_3}, \quad v_{1z} = \frac{\gamma_1 \gamma_3 + \gamma_2^2}{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}.$$

Коэффициенты в формуле (64):

$$u_{3x} = \frac{(\gamma_1 + \gamma_3) k_1^2}{\gamma_1 k_3^2}, \quad v_{3x} = -\frac{(\gamma_2^2 + \gamma_1 \gamma_3) k_2^2}{\gamma_2^2 k_3^2},$$

$$w_{3x} = -\frac{(k_3^2 - \gamma_3^2) (\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1 \gamma_3) + \gamma_1 (\gamma_1^2 \gamma_3 + \gamma_2^2 \gamma_3 + 2\gamma_1 \gamma_2^2)}{k_3^2 \gamma_1 \gamma_2}.$$

Коэффициенты в формуле (65):

$$u_{3y} = \frac{(\gamma_1 + \gamma_3) k_1^2}{\gamma_1 k_3^2}, \quad v_{3y} = -\frac{(\gamma_2^2 + \gamma_1 \gamma_3) k_2^2}{\gamma_2^2 k_3^2},$$

$$w_{3y} = -\frac{(k_3^2 - \gamma_3^2)(\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1\gamma_3) + \gamma_1(\gamma_1^2\gamma_3 + \gamma_2^2\gamma_3 + 2\gamma_1\gamma_2^2)}{\gamma_1\gamma_2k_3^2}.$$

Коэффициенты в формуле (66):

$$u_{3z} = -\frac{(\gamma_1 + \gamma_3)k_1^2}{\gamma_1\gamma_3k_3^2}, \quad v_{3z} = \frac{(\gamma_2^2 + \gamma_1\gamma_3)k_2^2}{\gamma_2^2\gamma_3k_3^2},$$

$$w_{3z} = \frac{(k_3^2 - \gamma_3^2)(\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1\gamma_3) + \gamma_1(\gamma_1^2\gamma_3 + \gamma_2^2\gamma_3 + 2\gamma_1\gamma_2^2)}{\gamma_1\gamma_2\gamma_3k_3^2}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Kretschmann and H. Z. Raether, *Naturforsch. A* **23**, 2135 (1968).
2. H. Raether, *Surface Plasmons*, Springer-Verlag, Berlin (1988).
3. W. L. Barnes, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **8**, S87 (2006).
4. R. Garabedian, C. Gonzalez, J. Richards et al., *Sensors and Actuators A* **43**, 202 (1994).
5. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **125**, 830 (2018).
6. A. Sommerfeld, *Ann. Physik. (Leipzig)* **81**, 1135 (1926).
7. J. R. Wait, *IEEE Anten. Propag. Magazine* **40**(5), 7 (1998).
8. R. W. P. King and G. S. Smith, *Antennas in Matters*, MA: M.I.T. Press, Cambridge (1981).
9. T. T. Wu, *J. Appl. Phys.* **28**(3), 299 (1957).
10. R. H. Jansen, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **33**, 1043 (1985).
11. R. W. P. King, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **36**, 1080 (1988).
12. Л. Новотный, Б. Хехт, *Основы нанооптики*, под ред. В. В. Самарцева, Физматлит, Москва (2009).
13. J. B. Pendry, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3966 (2000).
14. А. Б. Петрин, *ЖЭТФ* **134**, 436 (2008).
15. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **125**, 375 (2018).
16. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **126**, 350 (2019).
17. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **127**, 654 (2019).
18. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **127**, 1051 (2019).
19. А. Б. Петрин, *Опт. и спектр.* **128**, 1676 (2020).

ДИНАМИЧЕСКАЯ ИОНИЗАЦИЯ И ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ Ne^+-Ne

А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 17 июля 2020 г.,
после переработки 5 августа 2020 г.
Принята к публикации 7 августа 2020 г.

Показано, что экспоненциальная компонента спектра электронов при столкновениях $\text{Ne}-\text{Ne}$ связана с переходами электрона с автоионизационного терма в континуум. Определены характеристики этого терма. Экспоненциальная форма спектра объясняется отсутствием интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц, что связано с большой вероятностью перехода. Для оже-переходов в квазимолекуле определены зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, которая хорошо согласуется с результатами расчетов энергетических уровней для системы $\text{Ne}-\text{Ne}$, и зависимость средневзвешенной вероятности оже-перехода от наблюдаемой энергии электрона E_e . Показано, что с ростом E_e при уменьшении межъядерного расстояния вероятность переходов значительно уменьшается, что, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрытия волновых функций взаимодействующих электронов. Проведенный анализ позволяет сформировать целостную картину ионизации в столкновениях ионов средних масс энергий порядка кэВ.

DOI: 10.31857/S0044451021010041

1. ВВЕДЕНИЕ

При медленных атомных столкновениях с большими сечениями происходит формирование автоионизационных состояний, распад которых после разлета частиц является основным каналом ионизации и приводит к возникновению характеристического линейчатого спектра электронов. В нашей работе [1] было показано, что механизм ионизации при столкновениях Ne^+-Ne аналогичен образованию L_{23} , вакансий при столкновениях Ar^+-Ar . При тесном сближении сталкивающихся атомов при достижении межъядерного расстояния $R_c = 1.3$ ат. ед., происходит выдвигание $4f\sigma$ -орбитали. Это приводит к появлению одного-двух электронов на уровне $4f$ -объединенного атома. Заброс электронов на слабо связанные уровни облегчает их переход в континуум вследствие возмущения, обусловленного изменением поля ядер при столкновениях (динамической ионизации). Спектры электронов при столкновениях Ne^+-Ne изучались в работе [2] для энергий

соударения 50–300 кэВ и в работе [3] для энергий 25–800 кэВ. В работе [3] была предложена эмпирическая формула, хорошо описывающая экспоненциально убывающий с ростом энергии спектр электронов, и высказано соображение, что данный спектр связан с переходами электронов в континуум с терма квазимолекулы, образующейся при сближении сталкивающихся атомов:

$$\sigma(E_e, \theta) = \frac{\sigma'_0}{E_e} \exp\left(\frac{-(E_e - \delta)a}{\hbar v}\right).$$

В данном выражении σ'_0 , δ , a — параметры, E_e — энергия вылетевшего электрона, v — скорость соударения.

За прошедшее время произошло значительное развитие теории таких переходов. Было показано, что они могут быть обусловлены скрытыми пересечениями термов в комплексной плоскости межъядерного расстояния [4, 5]. Подробный обзор теоретических работ по описанию данного механизма ионизации дан в [6]. Среди других исследований спектров электронов при атомных столкновениях следует упомянуть работы [7–12].

Другим механизмом ионизации, приводящим к появлению электронов с непрерывным спектром

* E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

энергий в виде широкой полосы, являются оже-переходы в квазимолекуле, обнаруженные в нашей работе [13]. В этом случае вакансия на орбитали заполняется во время соударения частиц, а энергия перехода меняется при изменении межъядерного расстояния. В работах [7, 14] было развито теоретическое описание таких переходов, из которого следовало, что в классически разрешенной области могут наблюдаться осцилляции, связанные с интерференцией амплитуд при сближении и разлете частиц, а в запрещенной области эмиссия электронов возможна вследствие так называемого столкновительного уширения.

В работах [15, 16] применялась регистрация электронов по совпадениям с рассеянными на заданный угол ионами и получены спектры электронов для конкретных траекторий частиц с заданными параметрами удара. Применение данной методики позволило решить задачу спектроскопии квазимолекулы. Для нескольких систем были определены зависимости хода орбитали от межъядерного расстояния, которые неплохо согласуются с теоретическими расчетами, и оценена вероятность оже-переходов в квазимолекуле.

Однако до сих пор детальное сопоставление с единых позиций существующих теоретических представлений и результатов измерений спектров электронов для столкновений типа $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ не проводилось. В задачи настоящей работы входили следующие: а) проверить теоретические предсказания для экспоненциальной части спектра, обусловленной переходами электрона в континуум вследствие динамической ионизации; б) рассмотреть влияние различных каналов на наблюдаемые спектры для оже-переходов в квазимолекуле и оценить из эксперимента зависимость вероятности оже-переходов в квазимолекуле.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Результаты измерений сечений эмиссии электронов [17] при столкновениях в диапазоне энергий 3–50 кэВ представлены на рис. 1.

Представленные на рис. 1 спектры распадаются на две компоненты: экспоненциальную составляющую и широкую полосу, обусловленную оже-переходами в квазимолекуле. Измерения при сравнительно низких энергиях позволяют выделить эту составляющую более явно, тогда как при энергии 50 кэВ она выражена слабо.

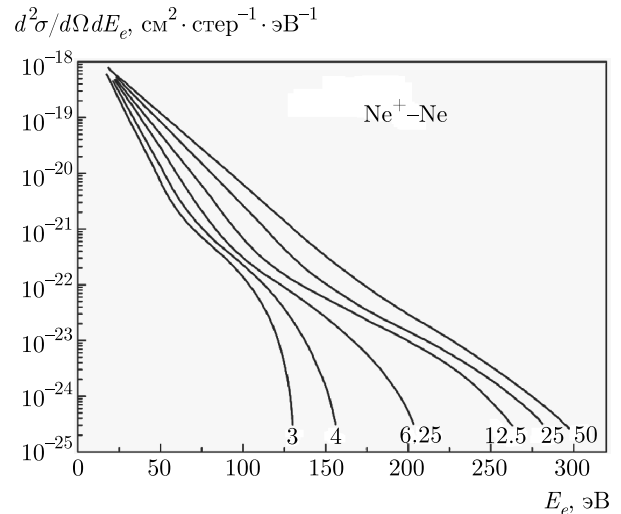


Рис. 1. Спектры электронов при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ для различных энергий соударения [17]. Цифры у кривых указывают энергию соударения в кэВ

Для сопоставления с теорией нам необходимо сечение, проинтегрированное по углам вылета электрона $\sigma(E_e, E_{col})$ (E_e — энергия вылетевшего электрона, E_{col} — энергия соударения):

$$\sigma(E_e, E_{col}) = \int \frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega} \sin \Theta d\Theta d\varphi = 4\pi \frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega} \beta,$$

где β — поправочный коэффициент, учитывающий анизотропию вылета электрона в зависимости от угла наблюдения. В случае [17] угол наблюдения составлял 128.5° относительно направления пучка и поправочный коэффициент $\beta = 1.18 \pm 0.07$. Результаты измерений зависят от эффекта Доплера и угла наблюдения вылетевших электронов. Коррекция на эффект Доплера проводилась согласно формулам

$$E_e^{Lab} = \left(1 + \frac{v_i}{v_e} \cos \Theta\right)^2 E_e^{CM},$$

$$\sigma(E_e)^{CM} = \sigma(E_e)^{Lab} \frac{dE_e^{Lab}}{dE_e^{CM}}.$$

Здесь E_e^{CM} и E_e^{Lab} , $\sigma(E_e)^{CM}$ и $\sigma(E_e)^{Lab}$ — энергия электрона и сечение в системе центра масс и в лабораторной системе соответственно, v_i — скорость излучателя (в случае квазимолекулы — скорость центра масс, т.е. $v_i = v/2$) и v_e — скорость электрона, Θ — угол наблюдения.

На рис. 2 представлены данные измерений при разных углах вылета электрона $\Theta = 128.5^\circ$ [17] и $\Theta = 90^\circ$ [2]. Как видно из рис. 2, данные, измеренные при разных углах вылета электрона, хорошо согласуются между собой при учете эффекта Доплера

Таблица. Потенциалы ионизации и вероятности ионизации различных состояний P_i в зависимости от энергии соударения E_{col} , вычисленные по формуле (1) [18]

Терм	I , эВ		E , кэВ					
			3	4	6.25	12.5	25	50
$4f$	0.85	P_1	0.844	0.864	0.889	0.920	0.943	0.959
$4f^2$	2.31	P_2	0.631	0.671	0.727	0.798	0.853	0.893
$3d4f^2$	13.6	P_3	0.00176	0.00412	0.0123	0.0447	0.156	0.216

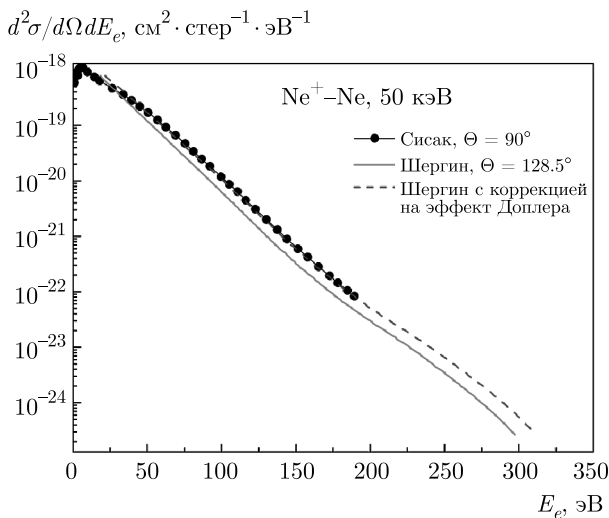


Рис. 2. Учет влияния эффекта Доплера на измеряемые спектры. Совпадение кривых, измеренных для разных углов наблюдения, при введении поправки на эффект Доплера доказывает, что испускание электрона происходит во время соударения

в предположении, что испускание электрона происходит в системе центра масс, т. е. во время соударения.

В дальнейшем мы будем обсуждать зависимости сечений от энергии вылетевшего электрона, скорректированные на эффект Доплера, и будут использоваться атомные единицы.

3. АНАЛИЗ ВКЛАДА ДИНАМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ

Оценим вероятность перехода электрона P в континуум, применив формулу из работы [18]:

$$P = \exp\left(-\frac{\pi I a}{v}\right), \quad (1)$$

где I — потенциал ионизации, a — характерный масштаб изменения волновой функции, v — скорость

соударения. Для случая выдвигания $4f\sigma$ -орбитали $a = 0.134$ ат. ед. [3], для $3d\sigma$ — 0.25 ат. ед.

Энергии ионизуемых уровней и вероятности ионизации приведены в таблице. При возбуждении одного электрона эффективный заряд остова атома был равен 1, при возбуждении двух электронов — 1.7, при возбуждении $3d$ -уровня — 3.

Как видно из таблицы, вероятность ионизации с уровня $4f$ весьма высока. Следует отметить, что ионизовать возбужденный уровень $3d$, заселяемый вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей, значительно труднее (см. нижнюю строку в таблице). Следует отметить, что дополнительная ионизация вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей наблюдается только при энергиях соударения более 10 кэВ [19]. Использование этих данных позволяет оценить вклад в сечение ионизации канала, связанного с выдвиганием $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей, как $3 \cdot 10^{-17}$ см², т. е. менее 10 % от полного сечения ионизации. Выдвигание $4f\sigma$ -орбитали вследствие большого геометрического фактора ($R_c = 1.32$ ат. ед. [20]) вносит основной (90 %) вклад в сечение ионизации.

Другим каналом ионизации, вносящим вклад в наблюдаемые спектры, являются оже-переходы в квазимолекуле на $2p\pi$ - и $3p\pi$ -орбитали, наблюдавшиеся в работе [15]. Согласно [17] вклад этих каналов в сечение ионизации не превышает 10^{-18} см².

Перезарядка и соответствующая интерференция каналов влияет на зарядовые распределения партнеров соударения после разлета, но не сказывается на степени ионизации системы в целом, а следовательно, на спектре электронов.

В работах [4,5] рассчитывалось поведение термов $E_i(R)$ для системы H^+H в комплексной плоскости межъядерного расстояния R . Различные термы являются разными листами функции $E_i(R)$. При определенных точках R эти листы могут пересекаться, а вероятность перехода между различными термами может быть оценена вычислением интеграла по

обходу этих точек, как это сделано в известной модели Ландау – Зинера. Было обнаружено наличие особенностей типа «штопора», которые связывают множество листов и обуславливают возможность перехода электрона в континуум. Это объяснило возможность выдвигания адиабатического термина в континуум, несмотря на наличие кулоновского сгущения термов. Для вычисления вероятности перехода электрона в континуум P с термина $E_i(R)$ было предложено выражение [5]

$$P(E_e) = \frac{1}{2\pi v} \times \left| \frac{dR_i}{dE_e} C_i^2(E_e) \exp \left\{ \frac{2i}{v} \int_{E_i^\infty}^{E_e} R_i(E') dE' \right\} \right|,$$

где $R_i(E_e)$ — функция, обратная к $E_i(R)$. Нормирующий коэффициент для кулоновского поля иона с зарядом Z равен

$$C^2(E_e) = \frac{k^3}{Z} \left(1 - \exp \left\{ \frac{-2\pi Z}{k} \right\} \right),$$

где k — импульс вылетевшего электрона. Таким образом, предсказывается спектр вылетевших электронов экспоненциальной формы, определяемой в основном экспонентой $\exp \left(-\frac{2}{v} \int \text{Im} R_i(E') dE' \right)$, где $\text{Im} R_i(E_e)$ — мнимая часть функции $R_i(E_e)$.

Сечение эмиссии электронов получается интегрированием вероятности перехода по параметрам удара. В работе [21] для описания спектров электронов было предложено выражение

$$\sigma(E_e) = A(E_e) \exp \left(-\frac{\alpha(E_e)}{v} \right),$$

$$\alpha(E_e) = 2 \int_{E_p}^{E_e} \text{Im} R(E) dE,$$

$$A(E_e) = \frac{4\pi |R(E_e)|^2 \text{Im} R(E_e)}{\alpha(E_e)}.$$

Следуя методике, предложенной в [22], т.е. взяв отношение сечений для двух скоростей соударения, можно убрать влияние предэкспоненциального фактора и получить

$$\alpha(E_e) = -\ln \left\{ \frac{\sigma(E_e, E_1)}{\sigma(E_e, E_2)} \right\} \left[\frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_2} \right]^{-1}, \quad (2)$$

таким образом можно определить из эксперимента значение $\alpha(E_e)$ (см. рис. 3), здесь v_1, v_2 — скорости соударения для двух рассматриваемых случаев.

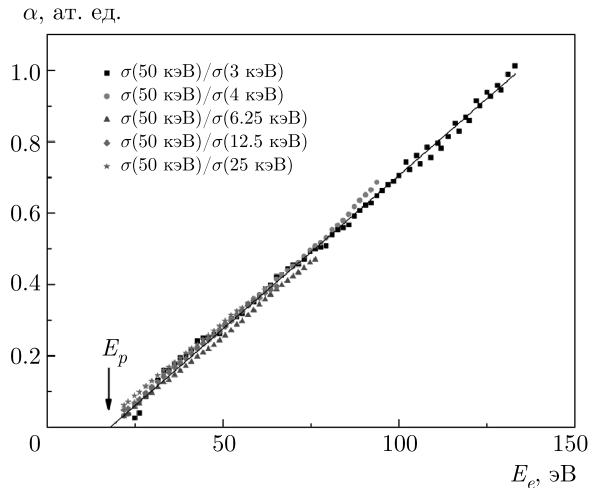


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости $\alpha(E_e)$, полученные по формуле (2) из отношения сечений, измеренных при разных энергиях. Стрелкой указано значение $E_p = 17.5$ эВ, когда терм переходит в сплошной спектр

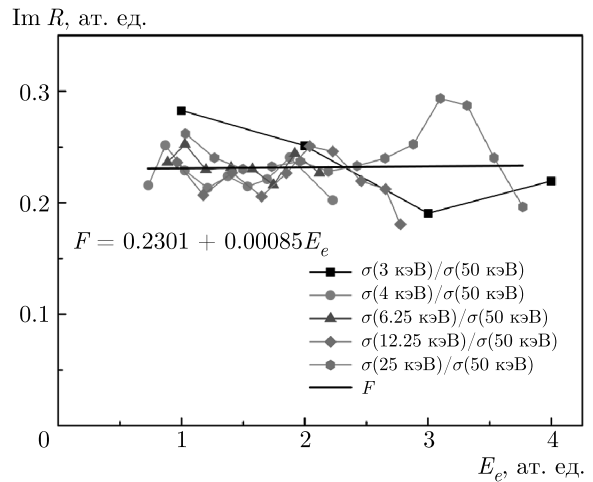


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости $\text{Im} R(E_e)$, полученные из различных отношений сечений. Фитирующая кривая F — практически константа

Как видно из рис. 3, данные для различных пар скоростей укладываются на одну кривую, что указывает на отсутствие зависимости в предэкспоненциальном множителе от скорости соударения. Зависимости $\alpha(E_e)$ обращаются в нуль при энергии $E_p = 17.5 \pm 1.0$ эВ, что свидетельствует о том, что ионизация происходит с автоионизационного уровня, находящегося в континууме. Значение E_p слабо зависит от использованной пары сечений. Зависимость $\alpha(E_e)$ хорошо описывается линейной зависимостью, квадратичный член мал.

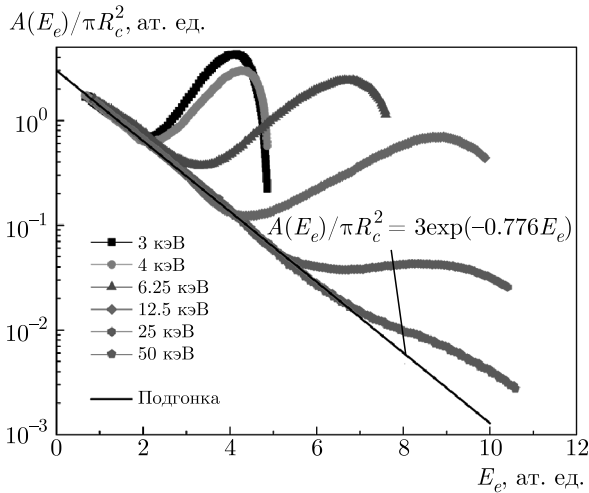


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости величины $A(E_e)$ от энергии электрона при различных энергиях соударения ($A(E_e) = (d\sigma/dE_e) \exp[\alpha(E_e)]$). Фитирующая кривая позволяет получить величину $A(E_e)$

Взяв производную от значения $\alpha(E_e)$ по энергии электрона, получим из эксперимента зависимость $\text{Im} R(E_e)$ (рис. 4). Фитируя эту зависимость полиномом, видим, что $\text{Im} R(E_e)$ практически константа и слабо зависит от E_e , что расходится с теоретическими предсказаниями [5] о том, что значение $\text{Im} R(E_e)$ должно уменьшаться с ростом E_e . Факт, что зависимость $\text{Im} R(E_e)$ является практически константой, связан с экспоненциальной формой спектра. Такая форма спектра предполагает отсутствие интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. А это может происходить в том случае, если вероятность перехода в континуум высока, что имеет место в изучаемом случае.

Значение нормировочного предэкспоненциального множителя можно получить, построив соотношение $A(E_e) = (d\sigma/dE_e) \exp[\alpha(E_e)]$, см. рис. 5. Выражение, предложенное в [21], дает значение $A(E_e) = 4\pi |R(E_e)|^2 / (E_e - E_{col})$, что явно не согласуется с экспериментом. Результаты эксперимента можно фитировать выражением $A(E_e) = 3\pi R_c^2 \exp(-\gamma E_e)$, $\gamma = 0.776$. Подобная зависимость не имеет пока теоретического объяснения и, возможно, связана с влиянием кулоновского поля ядер на волновую функцию эмитированного электрона.

Прямая ионизация и столкновительное уширение линий (postcollision interaction) приводят к похожим формам спектров электронов. Влияние после столкновительного уширения наблюдалось вблизи порогов фотоионизации [23, 24], при возбуждении автоионизационных состояний при столкновениях с

электронами [25, 26] и ионами [27]. При ионном возбуждении это влияние характеризуется отношением времени жизни уровня к времени соударения. В нашем случае вероятность срыва электрона близка к 100%, время жизни автоионизационного состояния мало, что делает влияние послестолкновительного уширения маловероятным. В частности, эксперимент показывает отсутствие зависимости предэкспоненциального множителя от скорости соударения. На наш взгляд, требуется более подробное изучение влияния взаимодействия с ионным остовом на форму спектра электронов при динамической ионизации.

Таким образом, показано, что появление экспоненциальной компоненты в спектре электронов согласуется с представлением о выдвигании автоионизационного терма в континуум. Высокая вероятность срыва электрона приводит к отсутствию интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц и, как следствие, к экспоненциальной форме спектра. Определены параметры автоионизационного терма: $E_p = 17.5$ эВ, зависимость $\text{Im} R(E_e)$, а также значение предэкспоненциального множителя $A(E_e)$. Полученные зависимости $\text{Im} R(E_e)$ и $A(E_e)$ расходятся с предсказаниями теории.

Получим полное сечение ионизации, проинтегрировав $\sigma(E_e)$ по энергии электрона,

$$\sigma_i = 3\pi R_c^2 \times \left\{ \frac{\exp(-\gamma E_p)}{\frac{\text{Im} R(E_e)}{v} + \gamma} + [1 - \exp(-\gamma E_p)] \gamma E_p \right\}. \quad (3)$$

Значения, полученные по формуле (3) (см. рис. 6, звездочки), находятся в хорошем согласии с независимыми экспериментальными данными [28, 29].

4. ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Как видно из рис. 1, в спектре присутствует широкая полоса при больших энергиях электронов (более 60 эВ), которая связана с оже-переходами в квазимолекуле. Особенно ярко вклад этой компоненты виден на рис. 5. Оже-переходы в квазимолекуле, образующейся при столкновениях Ne-Ne, изучались в работе [15] с использованием техники совпадений электрон-рассеянный ион. Применение техники совпадений позволяет уменьшить вклад в спектр переходов, связанных с выдвиганием $4f\sigma$ -орбитали, так как убирается интегрирование по прицельным параметрам. В изучаемом случае $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ имеется

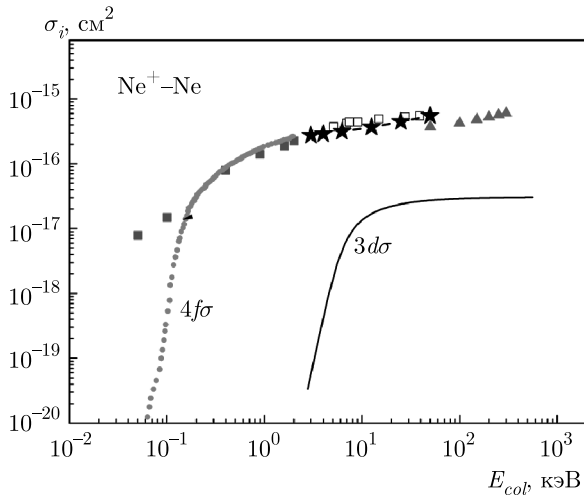


Рис. 6. Зависимости полного сечения ионизации при столкновениях Ne^+-Ne от энергии соударения. Звездочками показаны результаты расчета сечения ионизации с помощью формулы (3)

конечная вероятность оказаться одной вакансией на снижающейся при сближении частиц $2p\pi$ -орбитали и стопроцентная вероятность наличия четырех вакансий на $3p\pi$ -орбитали. Это делает переходы на $3p\pi$ -орбиталь на порядок более вероятными, чем на $2p\pi$ -орбиталь, в согласии с экспериментом [15]. Энергии переходов, связанные с заполнением вакансий на $3p\pi$ -орбитали, лежат в области $E_e < 1$ ат. ед., скрыты вкладом экспоненциальной компоненты и в настоящей работе не изучались.

4.1. Классическое и квантовомеханическое описания спектров электронов при оже-переходах в квазимолекуле

При классическом рассмотрении вероятность вылета электрона при распаде вакансии на квазимолекулярном уровне равна

$$P(E_e) = 2fW(R) \frac{dR}{dE_e} \frac{1}{v(R)}.$$

Здесь f — число вакансий на рассматриваемом уровне, $W(R)$ — вероятность оже-распада вакансии, коэффициент 2 учитывает тот факт, что расстояние R проходит дважды: при сближении и разлете частиц, dR/dE_e определяется зависимостью терма от межъядерного расстояния, $v(R)$ — радиальная компонента скорости. В точке поворота траектории $v(R) = 0$, и при классическом рассмотрении в спектре электронов имеется расходимость. Сечение эмиссии электронов получается интегрированием вероятности перехода по параметрам удара b , когда достигается межъядерное расстояние R :

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= 2 \int_0^{b(R)} 2\pi b db f W(R) \frac{dR}{dE_e} \frac{dt}{dR} = \\ &= 4\pi f W(R) \frac{dR}{dE_e} R \frac{b(R)}{v_0}. \end{aligned}$$

Здесь v_0 — скорость налетающей частицы, $b(R) = R[1 - U(R)]^{0.5}$ — максимальное значение параметра удара, когда достигается расстояние R , $U(R)$ — потенциал взаимодействия.

При квантовомеханическом рассмотрении вблизи точки поворота траектории R возникает интерференция амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. В работе [14] получено выражение для вероятности перехода для терма, квадратично зависящего от времени, $E_i = \xi t^2$, учитывающее интерференцию амплитуд перехода при сближении и разлете частиц:

$$P(E_e) = B\xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \xi^{-1/3} (E_e - E_i) \right\}.$$

Здесь E_e — энергия вылетевшего электрона, $E_i(R)$ — зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, $A_i(x)$ — функция Эйри, B — нормирующая константа. Если энергия оже-перехода возрастает при уменьшении межъядерного расстояния, то при $E_e > E_i(R)$ спектр экспоненциально убывает пропорционально асимптотике функции $A_i^2(x)$ [30]:

$$A_i^2(x) = \frac{1}{4\pi} x^{-0.5} \exp\left(-\frac{4}{3} x^{3/2}\right),$$

т. е. имеют место туннельные переходы в запрещенной области. В разрешенной области решение имеет асимптотику [30]

$$A_i^2(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{x^{0.5}} \sin^2\left(x^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

т. е. могут наблюдаться осцилляции в спектре электронов. Параметр α равен

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{2} \frac{d^2 E_i}{dt^2} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E_i}{dR^2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + \frac{dE_i}{dR} \frac{d^2 R}{dt^2} \right) \Bigg|_{R=R(E_0)}. \end{aligned}$$

Радиальная скорость при приближении к точке поворота стремится к нулю, поэтому первый член исчезает и получаем выражение, приведенное в работе [15]:

$$\xi = \frac{1}{2} \frac{dE_i}{dR} \frac{d^2 R}{dt^2} \Bigg|_{R=R(E_0)}.$$

Замечая, что

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dt^2} &= \frac{dR}{dt} \frac{d(dR/dt)}{dR} = \frac{1}{2} \frac{d(dR/dt)^2}{dR} = \\ &= \frac{1}{2} v_0^2 \left(-\frac{dU(R)}{dR} \frac{1}{E_{CM}} + 2 \frac{b^2}{R^3} \right), \end{aligned}$$

получаем

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

т.е. значение α зависит от производной терма dE_i/dR , возрастает с ростом скорости соударения и зависит от параметра удара, производной от потенциала взаимодействия $U(R)$. В данной работе использовалась зависимость $U(R)$, полученная в [31] из экспериментальных данных о рассеянии при столкновениях Ne^+-Ne .

Для нахождения нормирующей константы B воспользуемся тем, что в классически разрешенной области квантовомеханическое решение должно совпадать с классическим. Заменяя квадрат синуса в асимптотике средним значением 0.5 и проводя интегрирование по параметру удара, получаем

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= \int_0^{b(R)} P(b) \cdot 2\pi b db = \\ &= B \int_0^{b(R)} \xi^{-0.5} [E_e - E_i(R)]^{-0.5} b db. \end{aligned}$$

При больших параметрах удара

$$\begin{aligned} b &\approx R, E_e - E_i(R) \approx \frac{dE_i}{dR} (R - R_0), \\ \xi^{-0.5} &= 2^{0.5} \left(\frac{dR}{dE_i} \right)^{-0.5} v^{-1} R^{1.5} b^{-1}. \end{aligned}$$

Интегрируя по параметрам удара, имеем

$$\sigma(E_e) \approx \frac{1}{v} B \cdot 2^{0.5} \frac{dR}{dE_i} R b(R).$$

Приравнивая квантовое выражение к классическому выражению, находим

$$B = 2^{3/2} \pi f W(R),$$

а для сечения получаем

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= 2^{5/2} \pi^2 f W(R) \times \\ &\times \int_0^{b(R)} \xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E_e - E_i(R)] \right\} b db. \end{aligned}$$

4.2. Анализ спектров в одноканальном приближении

На рис. 7 приведены рассчитанные спектры электронов в классическом и квантовомеханическом приближении, которые сопоставляются с результатами экспериментов. Имеется ошибка, связанная с различными способами вычитания вклада экспоненциальной компоненты. Указана область достоверности, когда различие в способах вычитания не приводит к ошибке, превышающей 30%. Приведена расчетная кривая при параметре удара $b = 0.01 \text{ \AA}$, что практически соответствует лобовому соударению. При этом достигается расстояние наибольшего сближения R_0 , определяемое из соотношения $U(R) = E_{CM}$. Ноль функции Эйри при этом соответствует энергии оже-перехода при таком расстоянии. Как видно из рисунка, при квантовом рассмотрении имеет место экспоненциальное убывание при больших энергиях, описываемое асимптотикой функции Эйри при больших x , а при классическом рассмотрении в этой точке сечение принимает нулевое значение. Сопоставление формы расчетных и экспериментальных кривых позволяет судить о правильности использованного при расчете значения параметра α .

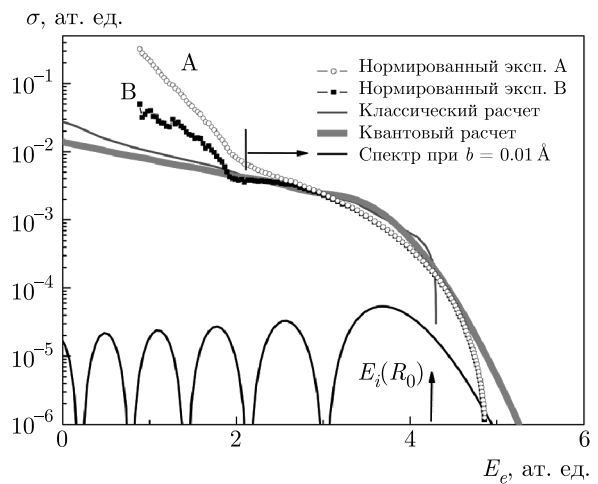


Рис. 7. Методика определения $E_i(R_0)$. Расчетный спектр и экспериментальная кривая нормируются по абсолютной величине, и варьированием параметров расчета достигается хорошее описание правого края спектра. Приведен случай $E_{col} = 3 \text{ кэВ}$. Кривые А, В — различные способы вычитания вклада экспоненциальной компоненты (стрелкой указана область достоверности результатов из-за двух способов вычитания экспоненциальной компоненты). Значение $E_i(R_0)$ соответствует пределу классического расчета и положению нуля функции Эйри при квантовом расчете для нулевого параметра удара

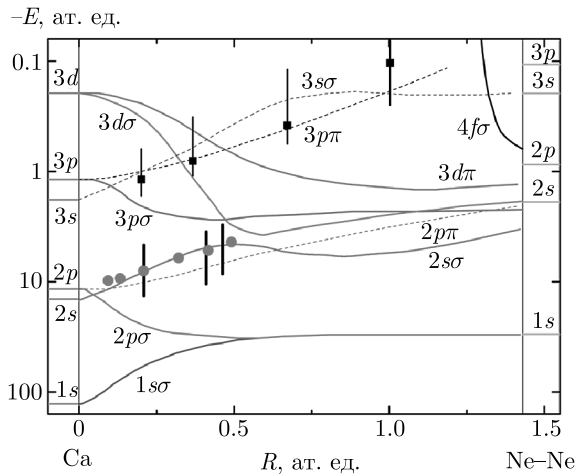


Рис. 8. Положение эффективного термина (точки), полученного из эксперимента, и диаграмма МО для системы Ne-Ne [32]. Точки с усами — результаты работы [15]

Проведенный анализ при всех энергиях позволяет построить зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Поведение термов для систем Ne-Ne и Ne⁺-Ne подобно, что позволяет использовать расчет термов для системы Ne-Ne для анализа оже-переходов в системе Ne⁺-Ne. Величина потенциала ионизации Ne составляет примерно 0.7 ат. ед., в то время как энергия изучаемых оже-переходов в нашем случае составляет 4–9 ат. ед., т. е. различие небольшое. Ниже, в разд. 4.3, мы обсудим сдвиги, связанные с различием систем Ne-Ne и Ne⁺-Ne. Как видно из рис. 8, имеется хорошее согласие экспериментальных данных с результатами расчетов поведения молекулярных орбиталей (МО) для системы Ne-Ne [32]. Этот факт является главным аргументом правильности нашей интерпретации экспериментальных данных. Второй аргумент связан с тем, что если учесть предсказанную теорией зависимость сечения от скорости соударения и построить зависимость $\sigma(E_e)v$, то широкие полосы в спектре, измеренные при разных энергиях соударения, ложатся на единую кривую.

4.3. Анализ спектров в многоканальном приближении

Как следует из диаграммы МО [32] (рис. 8), заполнение вакансии на $2p\pi$ может происходить с орбиталей $3p\sigma$ (на орбитали 2 электрона), $3d\sigma$ (2 электрона), $3d\pi$ (4 электрона).

Мы предполагаем, что орбитали $3s\sigma$, $3p\pi$ и $3d\delta$ не содержат электронов, так как формируются из незаполненных при больших межъядерных расстояни-

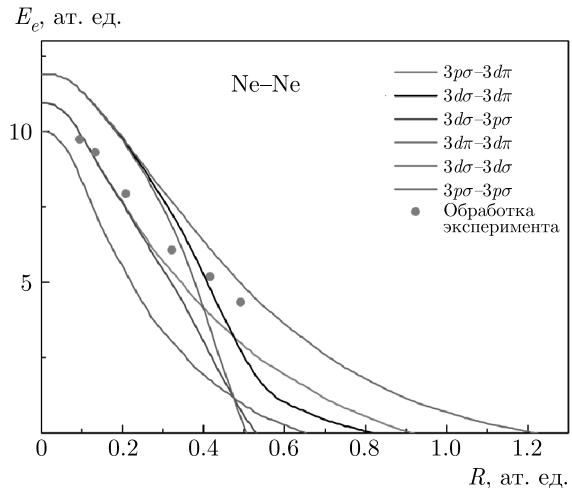


Рис. 9. (В цвете онлайн) Энергии оже-переходов из различных начальных состояний на $2p\pi$ -вакансию, вычисленные нами из данных о положении МО [32]. Для сопоставления приведена средняя энергия оже-переходов (эффективный терм), определенная из эксперимента в одноканальном приближении

ях уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется по крайней мере 6 вариантов оже-переходов: $3p\sigma^2-2p\pi\epsilon$ (под значком ϵ понимается улетающий электрон), $3d\sigma^2-2p\pi\epsilon$, $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\sigma-2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$ и $3d\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$.

На рис. 9 энергии оже-переходов для этих каналов, рассчитанные из диаграммы МО, сравниваются со средней энергией оже-перехода, полученной нами из эксперимента. Имеется хорошее согласие средней энергии оже-перехода, полученной из анализа эксперимента, с расчетными значениями. Следует заметить, что при энергиях соударения 3 и 4 кэВ вклад в спектр электронов вносят всего два канала. При больших энергиях столкновения все шесть каналов могут вносить вклад. В работе [33] были рассчитаны вероятности переходов из интересующих нас состояний в водородоподобном ионе с двумя возбужденными электронами, которые оказались сравнимыми по величине. В нашем случае энергии уровней $3p$ и $3d$ значительно различаются, поэтому наш расчет носит модельный характер: мы предполагаем вероятности оже-переходов равными. Введем понятие фактора перехода:

$$G_i = 2^{5/2} \frac{\pi^2}{v} \int_0^{b(R)} \xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \xi^{-1/3} [E_e - E_i(R)] \right\} b db.$$

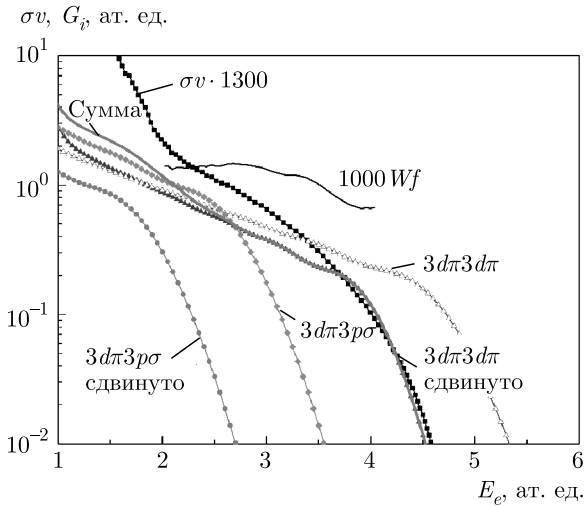


Рис. 10. Сравнение расчетных факторов оже-переходов с данными измерений сечений σv для $E_{col} = 3$ кэВ. Для удобства сравнения результатов расчета и эксперимента измеренное сечение умножено на 1300. Кривая «Сумма» — сумма факторов G_i . Приведено также значение Wf , умноженное на 1000, полученное по формуле (4)

В классическом пределе $G_i = 4\pi(dE_i/dR)^{-1}Rb(R)$, где $E_i(R)$ — зависимость энергии рассматриваемого оже-перехода от межъядерного расстояния. Произведение сечения на скорость соударения равно

$$\sigma v = \sum_i G_i W_i f,$$

где W_i — вероятность оже-перехода, f — вероятность иметь вакансию на $2p\pi$ -орбитали. Если взять отношение σv к сумме факторов перехода, получаем средневзвешенную вероятность оже-перехода:

$$W = \frac{1}{f} \frac{\sigma v}{\sum_i G_i} = \frac{\sum_i G_i W_i}{\sum_i G_i}, \quad (4)$$

т. е. каждый переход учитывается с весовым фактором G_i .

На рис. 10–15 представлены зависимости расчетных факторов от энергии электронов в сопоставлении с измеренными значениями σv . Соотношение этих величин позволяет оценить средневзвешенную вероятность оже-перехода. Как видно из рис. 10, вычисленное положение правого края спектра определяется каналом $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$ и отличается от полученного экспериментально на сдвиг, равный 0.81 ± 0.03 ат. ед. Причина сдвига — различие в поведении орбиталей для систем $Ne-Ne$ и Ne^+-Ne , о чем говорилось выше, а также погрешности теоретического расчета. Вклад канала $3\rho\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$ сдвинут на ту же величину в сторону меньших энергий,

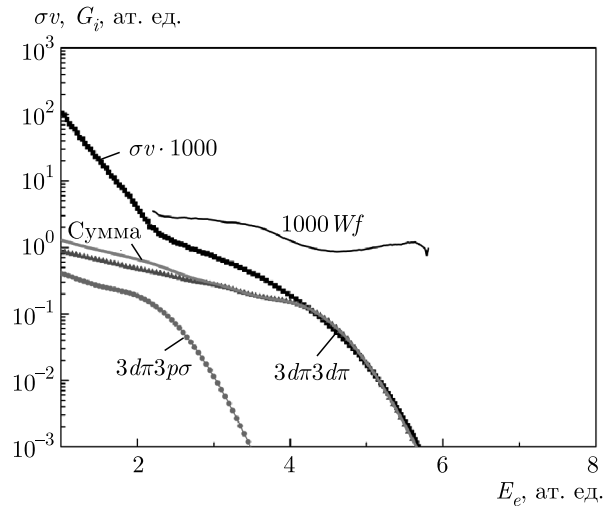


Рис. 11. Представлены данные для $E_{col} = 4$ кэВ. Значение σv умножено на 1000. Вклады каналов приведены с учетом сдвига

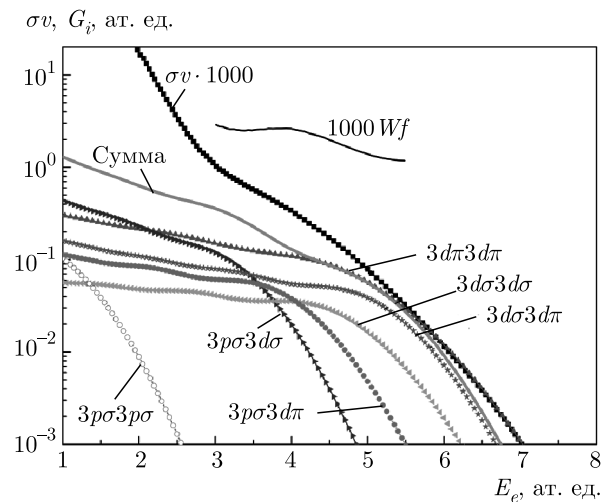


Рис. 12. Представлены данные для $E_{col} = 6.25$ кэВ

поскольку энергия обоих переходов определяется в основном энергией $2p\pi$ -орбитали, и можно предположить, что упомянутые сдвиги равны. С учетом сдвига канал $3\rho\sigma 3d\pi-2p\pi$ начинает вносить вклад при $E_e = 2.2$ ат. ед. Имеется корреляция с областью роста экспериментального сечения. В то же время этот рост проявляется вблизи края области достоверности значения сечения, связанного с вычитанием вклада экспоненциальной компоненты. Из соотношения (4) определена величина $fW(R)$ (сплошная линия на рис. 10), которую в данном случае можно трактовать как вероятность оже-перехода в атомных единицах для перехода $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$, вносящего основной вклад в сечение.

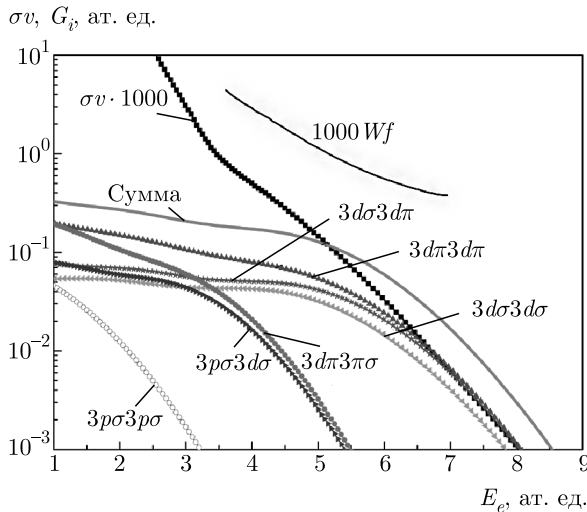


Рис. 13. Представлены данные для $E_{col} = 12.5$ кэВ

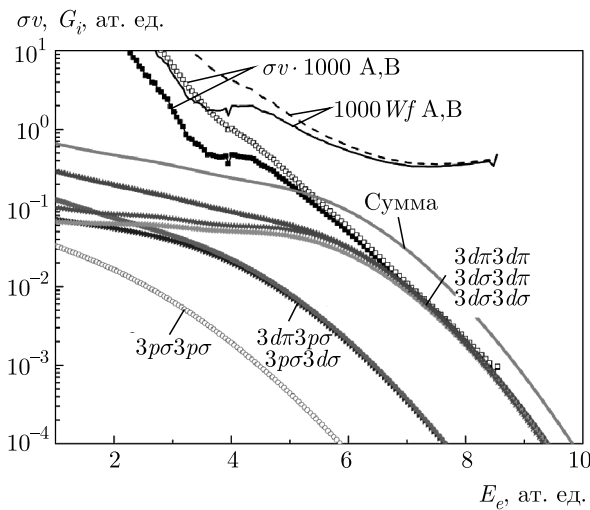


Рис. 14. Представлены данные для $E_{col} = 25$ кэВ. Символами А и В показаны экспериментальные кривые, полученные при разном способе вычитания экспоненциальной подложки

При энергии соударения $E_{col} = 4$ кэВ по-прежнему доминирует вклад канала $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\epsilon$, сдвиг составляет 0.95 ± 0.05 ат. ед. Вблизи порога достоверности имеется вклад канала $3p\sigma 3d\pi - 2p\pi\epsilon$. Остальные каналы вносят вклад при $E_e < 2$ ат. ед.

При $E_{col} = 6.25$ кэВ край при больших энергиях электронов определяется каналом $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\epsilon$, сдвиг составляет 1.10 ± 0.05 ат. ед. Затем подключаются каналы с начальными состояниями $3d\sigma 3d\pi$ и $3d\sigma 4d\sigma$, а при энергиях менее 5 ат. ед. вносит вклад канал $3p\sigma 3d\pi - 2p\pi\epsilon$.

При больших энергиях 12.5–50 кэВ (рис. 13–15) практически одинаковую зависимость от энергии электрона дают три канала с начальными состо-

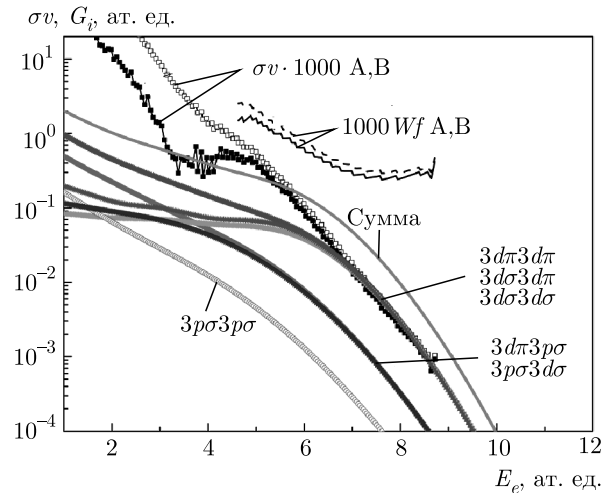


Рис. 15. Представлены данные для $E_{col} = 50$ кэВ. Обозначения те же

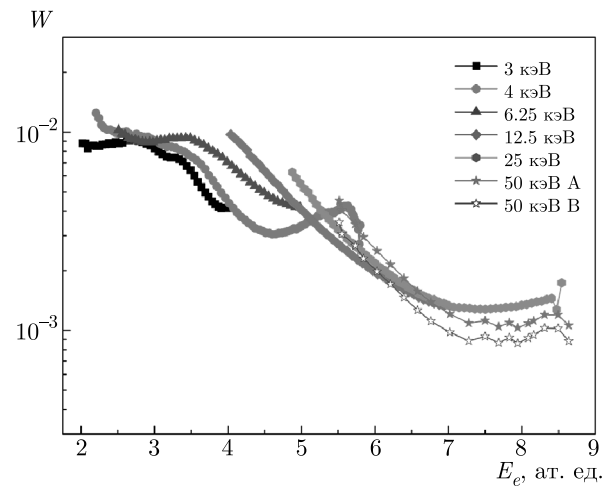


Рис. 16. (В цвете онлайн) Зависимость средней вероятности оже-переходов от наблюдаемой энергии электрона. Кривые А и В показывают ошибки, связанные с вычитанием экспоненциальной подложки

яниями $3d\pi 3d\pi$, $3d\sigma 3d\pi$ и $3d\sigma 3d\sigma$, также группируется вклад от каналов с начальными состояниями $3p\sigma 3d\pi$ и $3p\sigma 3d\sigma$. Сдвиги для энергий 12.5, 25 и 50 кэВ составляют соответственно 1.56, 1.59 и 1.79 ат. ед. Сплошной линией показано значение фактора $fW(R)$. Кривые, отмеченные символами А и В, получены при разных способах вычитания экспоненциальной подложки и позволяют оценить ошибку, связанную с ее вычитанием.

Вероятности оже-переходов в квазимолекуле в зависимости от наблюдаемой энергии электрона представлены на рис. 16. Как видно из рис. 16, данные, полученные из обработки сечений, измеренных при разных энергиях соударения, согласо-

ются. Ошибки, связанные с вычитанием экспоненциальной компоненты, не превышают 30%. Абсолютные ошибки связаны, главным образом, с абсолютными измерениями сечений и составляют также 30%. Различия в зависимостях вероятности эмиссии от энергии электрона при разных начальных энергиях связаны с погрешностями определения сдвига края спектра между экспериментом и расчетом. При определении $W(E_e)$ использовалось значение $f = 1/3$, что соответствует статистике распределения вакансии между молекулярными уровнями, формирующимися из $2p$ -оболочки Ne при больших R . Как видно из рис. 16, с ростом E_e , что соответствует уменьшению межъядерного расстояния, вероятность переходов значительно уменьшается, и это, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрывания волновых функций электронов, участвующих в оже-переходе.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что экспоненциальная компонента спектра электронов при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ связана с переходами электрона с автоионизационного терма в континуум. Определены характеристики этого терма. Отсутствие интерференции амплитуд перехода при разлете и сближении частиц связано с большой вероятностью перехода, что объясняет практически экспоненциальную форму спектра.

Для оже-переходов в квазимолекуле определена зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, которая хорошо согласуется с расчетами МО для системы Ne-Ne, и определена зависимость средневзвешенной вероятности оже-перехода от наблюдаемой энергии электрона. Показано, что с ростом E_e , при уменьшении межъядерного расстояния вероятность переходов значительно уменьшается, что, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрывания волновых функций взаимодействующих электронов.

Анализ с современных позиций результатов экспериментальных и теоретических исследований прошлых лет позволил в настоящей работе оценить роль конкурирующих механизмов, приводящих к эмиссии электронов, установить основные характеристики уровней, с которых осуществляются электронные переходы в континуум и оже-переходы в квазимолекуле, и сформировать целостную картину ионизации в столкновениях ионов средних масс энергий порядка кэВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **354**, 142 (2015).
2. R. K. Cacak and T. Jorgensen, Phys. Rev. A **2**, 1322 (1970).
3. P. H. Woerlee, Yu. S. Gordeev, H. de Waard et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **14**, 527 (1981).
4. E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **54**, 893 (1981).
5. S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **64**, 280 (1986); S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **63**, 538 (1986).
6. S. Yu. Ovchinnikov, G. N. Ogurtsov, J. H. Macek, and Yu. S. Gordeev, Phys. Rep. **389**, 169 (2004).
7. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, Москва (2019).
8. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov, and J. H. Macek, Phys. Rev. A **74**, 032706 (2006).
9. S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A **84**, 032706 (2016).
10. S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **241**, 78 (2005).
11. J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. **104**, 033201 (2010).
12. L. Ph. H. Schmidt, C. Goil, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. **162**, 083201 (2014).
13. V. V. Afrosimov, Yu. S. Gordeev, A. N. Zinov'ev et al., JETP Lett. **24**, 28 (1976).
14. A. Z. Devdariani, V. N. Ostrovskii, and Y. N. Sebyakin, Sov. Phys. JETP. **46**, 215 (1977).
15. V. V. Afrosimov, G. G. Meskhi, N. N. Tsarev, and A. P. Shergin, Sov. Phys. JETP **57**, 263 (1983).
16. В. Р. Асагрян, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **44**, 454 (1986).
17. А. П. Шергин, Дисс. ... докт. физ.-матем. наук, ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград (1987).
18. Yu. N. Demkov, Sov. Phys. JETP **18**, 138 (1964).
19. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba, and E. Everhart, Phys. Rev. **107**, 704 (1957).
20. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **354**, 142 (2015).

21. G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan, and Yu. S. Gordeev, *Phys. Rev. A* **53**, 2391 (1996).
22. A. N. Zinoviev, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, *Abstr. XII ICPEAC, Gatlinburg* (1981), p. 900.
23. M. Ya. Amusia, M. Yu. Kuchiev, S. A. Sheinerman, and S. I. Sheftel, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **10**, L535 (1977).
24. R. Guillemin, L. Gerchikov, and S. Sheinerman, *Phys. Rev. A* **99**, 063409 (2019).
25. A. A. Borovik and G. N. Ogurtsov, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **42**, 105202 (2009).
26. A. A. Borovik and G. N. Ogurtsov, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **43**, 165203 (2010).
27. R. B. Barker and H. W. Berry, *Phys. Rev.* **151**, 19 (1966).
28. R. C. Amme and P. O. Haugsjaa, *Phys. Rev.* **177**, 230 (1969).
29. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, *Proc. Roy. Soc. A* **240**, 382 (1957); H. B. Gilbody, J. B. Hasted, J. V. Ireland et al., *Proc. Roy. Soc. A* **274**, 40 (1963).
30. В. М. Галицкий, Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, *Теория столкновений атомных частиц*, Наука, Москва (1981).
31. А. Н. Зиновьев, *ЖТФ* **78**, 15(2008).
32. J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup, and K. Taulbjerg, *Phys. Rev. A* **14**, 707 (1976).
33. A. N. Zinoviev, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **269**, 943 (2016).

СУБИЗЛУЧЕНИЕ ХОЛОДНЫХ И РАЗРЕЖЕННЫХ АТОМНЫХ АНСАМБЛЕЙ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ РЕЗОНАНСНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

*И. М. Соколов**

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

*Институт аналитического приборостроения Российской академии наук
190103, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 24 августа 2020 г.,
после переработки 31 августа 2020 г.
Принята к публикации 1 сентября 2020 г.

Исследована динамика флуоресценции оптически плотных, но разреженных атомных ансамблей, охлажденных до субдоплеровских температур и возбуждаемых резонансным импульсным возбуждением. Помимо полной интенсивности излучения анализируется изменение со временем спектрального состава флуоресценции и его поляризации, а также изменение пространственного распределения возбуждения внутри атомного ансамбля. На основе этого анализа показано, что с течением времени роль пленения излучения ослабевает и основным фактором, определяющим медленный распад атомного возбуждения, становятся субизлучательные квантовые состояния, формируемые в результате резонансного диполь-дипольного межатомного взаимодействия. Проанализирована зависимость характера субизлучения от размеров ансамбля.

DOI: 10.31857/S0044451021010053

1. ВВЕДЕНИЕ

Атомные ансамбли, охлажденные до субдоплеровских температур в специальных ловушках, вызывают в настоящее время пристальный интерес как в силу целого ряда их уникальных физических свойств, так и из-за широкого круга их возможного практического применения в задачах квантовой метрологии, стандартизации частоты, в квантово-информационных приложениях [1–3].

Большинство методов диагностики и практически все предложенные схемы применения холодных атомных ансамблей основаны на их взаимодействии с электромагнитным излучением. Такое взаимодействие обладает рядом особенностей, связанных с коллективными многоатомными эффектами, обусловленными малой скоростью движения атомов. Во-первых, из-за низкой скорости линия атомного перехода оказывается узкой, и сечение рассея-

ния резонансного излучения достигает значений порядка квадрата его длины волны. Это означает, что рассматриваемые атомные ансамбли, как правило, имеют большую оптическую толщину, и при описании их взаимодействия со светом необходимо учитывать процессы многократного некогерентного рассеяния.

Во-вторых, малая скорость и пространственная неупорядоченность атомного ансамбля приводит к возможности образования атомных кластеров, или квазимолекул, состоящих из нескольких случайно расположенных на расстояниях порядка длины волны резонансного излучения друг от друга атомов. Для разреженных сред это, как правило, двухатомные квазимолекулы. Вероятность образования кластеров из большего числа атомов быстро убывает с уменьшением концентрации.

При близком расположении атомов мы должны учитывать процессы рекуррентного многократного рассеяния, приводящие к эффекту диполь-дипольного межатомного взаимодействия. Это взаимодействие вызывает формирование коллективных (в рассматриваемом случае двухатомных) состоя-

* E-mail: ims@is12093.spb.edu

ний, часть из которых является суперизлучательными, а часть — субизлучательными.

Наконец, малые скорости приводят к необходимости учитывать интерференционные эффекты при многократном рассеянии. Интерферировать могут пары волн, одна из которых образуется в результате многократного последовательного рассеяния на некоторой цепочке атомов, а вторая — на той же цепочке, но при прохождении их в обратном порядке. Из-за низкой скорости атомов доплеровские сдвиги при рассеянии малы и эффект интерференции не исчезает даже при усреднении по случайному неоднородному расположению атомов.

Одним из эффективных методов изучения свойств холодных атомных ансамблей является исследование динамики флуоресценции после окончания импульсного возбуждения. При этом в самой динамике коллективные эффекты проявляются достаточно ярко. К настоящему времени очень детально изучено такое явление, как сверхизлучение Дике [4], имеющее место в плотных атомных ансамблях. Также достаточно подробно, в том числе и экспериментально, исследовано так называемое однофотонное сверхизлучение, наблюдающееся в разреженных средах при слабом возбуждении [5, 6]. При этом противоположный эффект, субизлучение, проявляющееся в замедлении распада возбуждения многоатомных систем и связанное с заселением антисимметричных коллективных состояний, при которых атомные диполи колеблются в противофазе, исследовано существенно менее подробно. Одной из причин этого является сравнительно быстрое нерадиационное разрушение этих состояний, а другой — необходимость наблюдать его на фоне эффекта пленения излучения, обусловленного диффузией света, связанной с многократным некогерентным рассеянием фотонов в оптически плотной среде. По-видимому, впервые эффект субизлучения наблюдался в разреженных оптически плотных средах в работе [7].

Традиционно основной величиной, которая анализируется как при теоретическом, так и при экспериментальном изучении эффекта субизлучения, является временная зависимость полной интенсивности света, излучаемого в заданном направлении. Иногда в теории вычисляется суммарная интенсивность в полный сферический угол. Основной целью настоящей работы является более детальный теоретический анализ динамики флуоресценции, включающий исследование динамики поляризации и спектрального состава, а также пространственного распределения возбужденных атомов в ансамбле. Мы

покажем, что все эти три характеристики претерпевают качественные изменения в процессе послесвечения, и их экспериментальное исследование может дать дополнительную информацию о физических процессах и механизмах, приводящих к медленному распаду атомного возбуждения.

2. РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНЫХ СИГНАЛОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Мы рассматриваем ансамбль, состоящий из $N \gg \gg 1$ одинаковых атомов с невырожденным основным состоянием с угловым моментом $J_g = 0$. Возбужденное состояние — $J_e = 1$. Время жизни всех трех зеemanовских подуровней ($m = -1, 0, 1$) одинаково и равно $\tau_{at} = 1/\gamma$. Атомы считаются неподвижными. Медленное смещение, обусловленное конечной температурой ансамбля, частично учитывается усреднением рассчитываемых величин по случайному пространственному расположению атомов.

Эволюция состояний атомов описывается с помощью модели связанных диполей, традиционной для этого класса задач. Эта модель была впервые предложена Фолди [8], а затем подробно обсуждена Лаксом [9]. Позже аналогичный подход был использован в контексте различных типов коллективных эффектов, таких как многократное и рекуррентное рассеяние, коллективный спонтанный распад и сильная (андерсоновская) локализация света [10–24].

В данной работе мы будем использовать вариант модели связанных осцилляторов, сформулированный в рамках последовательного квантового подхода, разработанного в работе [25]. Не повторяя вывода, отметим лишь его основные особенности. Наш подход базируется на решении нестационарного уравнения Шредингера для волновой функции ψ , описывающей состояние объединенной, замкнутой системы, состоящей из всех атомов и электромагнитного излучения, включая вакуумный резервуар. Волновую функцию этой системы мы ищем в виде разложения по собственным функциям ψ_l гамильтониана невзаимодействующих атомов и света $\psi = \sum_l b_l \psi_l$. Рассматривая случай слабого возбуждения и ограничиваясь состояниями, содержащими не более одного фотона, для амплитуд b_e однократно возбужденных состояний атома $\psi_e = |g \cdots e \cdots g\rangle$ получаем следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial b_e}{\partial t} = \left(i\delta_e - \frac{\gamma}{2} \right) b_e - \frac{i\Omega_e}{2} + \frac{i\gamma}{2} \sum_{e' \neq e} V_{ee'} b_{e'}. \quad (1)$$

Здесь индекс «e» показывает номер атома, возбужденного в состоянии $\psi_e = |g \cdots e \cdots g\rangle$, а также

конкретный зеemanовский подуровень, заселенный в этом состоянии.

Первое слагаемое в правой части уравнения (1) отвечает за свободную эволюцию независимых атомных осцилляторов. Второе слагаемое описывает влияние внешнего возбуждающего лазерного поля. Частота Раби этого поля в точке расположения атома e равна Ω_e . Отстройка поля δ_e в общем случае может быть различна для различных переходов $g \leftrightarrow e$. Такое различие может иметь место, например, при наличии внешнего статического электрического или магнитного поля. Последнее слагаемое в уравнении (1) учитывает диполь-дипольное взаимодействие атомов друг с другом. Оно обуславливает все коллективные многоатомные эффекты, имеющие место в рассматриваемом ансамбле. Матрица $V_{ee'}$, входящая в это слагаемое, имеет следующий вид:

$$V_{ee'} = -\frac{2}{\gamma} \sum_{\mu, \nu} \mathbf{d}_{eg}^{\mu} \cdot \mathbf{d}_{ge'}^{\nu} \frac{e^{ikr_{ij}}}{\hbar^3 r_{ij}^3} \times \left\{ \delta_{\mu\nu} [1 - ikr_{ij} - (kr_{ij})^2] - \frac{\mathbf{r}_{ij}^{\mu} \cdot \mathbf{r}_{ij}^{\nu}}{r_{ij}^2} [3 - 3ikr_{ij} - (kr_{ij})^2] \right\}. \quad (2)$$

Здесь мы предположили, что в состояниях e и e' возбуждены соответственно атомы i и j ; \mathbf{d}_{eg} — матричный элемент оператора дипольного момента для перехода $g \rightarrow e$, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ и $k = \omega_0/c$ — волновое число, соответствующее частоте ω_0 этого перехода, c — скорость света в вакууме. Индексы μ или ν обозначают проекции на оси выбранной системы координат $\mu, \nu = x, y, z$.

Система (1) для амплитуд $b_e(t)$ решается численно для различных случайных пространственных конфигураций неподвижных атомов. На основе вычисленных значений $b_e(t)$ мы можем найти амплитуды всех других состояний, которые определяют волновую функцию ψ объединенной системы атом-поле (подробнее см. [25]) и, следовательно, свойства как атомного ансамбля, так и рассеянного света. Так, например, интенсивность $I_{\alpha}(\Omega, t)$ поляризационной компоненты света α , излучаемого облаком в единичном телесном угле вокруг произвольного направления, заданного волновым вектором \mathbf{k} ($\Omega = \theta, \varphi$), можно определить следующим образом [23]:

$$I_{\alpha}(\Omega, t) = \frac{c}{4\pi} \times \left| k^2 \sum_{i,m} (\mathbf{u}_{\alpha}^* \cdot \mathbf{d}_{ge}) \beta_e(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) \right|^2. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{u}_{α} — единичный вектор поляризации вторичного излучения.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Расчет динамики флуоресценции методом связанных осцилляторов может быть проведен для произвольной формы и произвольного неоднородного пространственного распределения атомов. При этом и форма и распределение влияют лишь количественно, не изменяя базовые физические закономерности исследуемых эффектов. Поэтому в данной работе мы рассматриваем геометрически наиболее простой случай однородного в среднем ансамбля кубической формы. Такой выбор упрощает анализ пространственного распределения возбужденных атомов и его изменение со временем. Кроме того, для простой геометрии при наличии сравнительно резких границ атомного ансамбля и однородного в среднем пространственного распределения атомов удобно проводить сравнение получаемых численных результатов с предсказаниями диффузионной теории переноса излучения.

Плотность атомов n во всех расчетах будет одинакова: $nk^{-3} = 0.005$. Это дает возможность приближенно смоделировать разреженные атомные ансамбли, с которыми имеют дело в экспериментах. Возбуждение предполагается прямоугольным импульсом, несущая частота которого совпадает с частотой перехода в свободном атоме. Длительность импульса $\gamma T = 50$, что позволяет возбуждать атомы в достаточно узком спектральном интервале вблизи атомного резонанса. Поляризация лазерного излучения может быть любая. Как следует из нашего анализа, ее характер не влияет на основные физические результаты, обсуждаемые в данной работе. Все конкретные численные результаты, приведенные далее, получены для циркулярно поляризованного света.

Результаты расчетов суммарной интенсивности флуоресценции, излучаемой во всех направлениях, во всем спектральном диапазоне и во всех поляризационных каналах, приведены на рис. 1а для атомных ансамблей различного размера. Размер задается длиной ребра куба L . На рис. 1б показана временная зависимость мгновенного времени задерж-

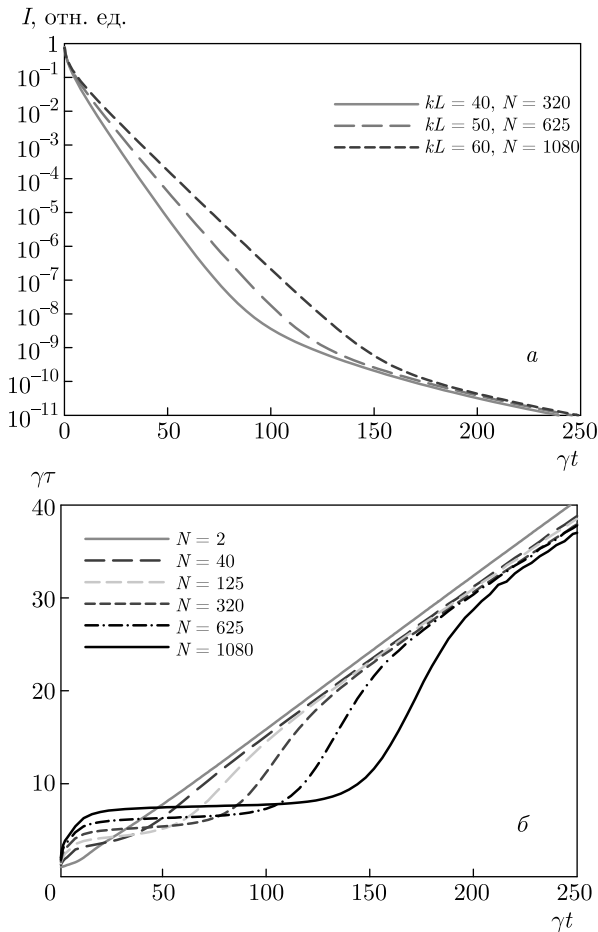


Рис. 1. Динамика флуоресценции атомных ансамблей различного размера. Плотность атомов $n = 0.005k^3$, длительность возбуждения $\gamma T = 50$. *a* — полная нормированная интенсивность излучения по всем направлениям и поляризациям $I(t)$, *б* — мгновенное время задержки $\tau(t)$

ки, которое определяется как величина, обратная мгновенной скорости распада: $\tau(t) = 1/\Gamma(t)$, где

$$\Gamma(t) = d \ln(I(t))/dt. \quad (4)$$

Полученные кривые демонстрируют ряд важных физических результатов. На кривых рис. 1 можно выделить четыре характерных этапа изменения. В самом начале, после окончания импульса возбуждения (этот момент соответствует $t = 0$), на временах $t < \tau_{at}$ наблюдается эффект суперизлучения. Скорость распада $\Gamma(t)$ больше естественной ширины возбужденных атомных состояний γ . Затем наступает этап пленения излучения. Перенос излучения описывается диффузионным уравнением [26]. Этот этап можно разделить на две части. Вначале диффузия излучения описывается многомодовой дина-

микой. На этом этапе скорость распада уменьшается, а время пленения возрастает.

Затем наступает режим одномодовой диффузии, когда распад описывается одноэкспоненциальным законом с характерным временем τ_d . Хорошо видны прямолинейные участки на рис. 1*а* и горизонтальные на рис. 1*б*. Длительность этого этапа возрастает с увеличением размеров системы. Для среды с большой оптической толщиной b , когда фотон испытывает многократное рассеяние внутри облака, время τ_d может быть оценено следующим образом:

$$\tau_d = \frac{3b^2}{\alpha\pi^2} \tau_{at}, \quad (5)$$

где параметр α зависит от формы облака. Для кубического объема $\alpha = 3$.

В рассматриваемом случае резонансная оптическая толщина $b_0 = n\sigma_0 L$, где $\sigma_0 = 6k^{-2}$ — сечение резонансного рассеяния, составляет величину порядка 5.65 для наибольшего облака $kL = 60$. Это недостаточно большая толщина для применения формулы (5). При таких толщинах ее необходимо уточнить, заменив b на $b' = b_0 + b^*$. В работе [26] показано, что добавка b^* связана с особенностями граничных условий для уравнения диффузии излучения и определяется длиной свободного пробега фотона $l_0 = 1/(n\sigma_0)$ (подробнее см. ниже).

Наконец, после одноэкспоненциального этапа наблюдается заметное уменьшение скорости распада и возрастание времени пленения $\tau(t)$. При заданной плотности независимо от размеров ансамбля все кривые на этом участке на рис. 1*а* с хорошей точностью параллельны друг другу. На рис. 1*б* видно, что кривые для разных размеров ансамбля выходят на одну асимптоту, причем различия в мгновенных скоростях распада и мгновенных временах пленения практически лежат в пределах точности вычислений. В этой области времен зависимость характера субизлучения от размеров системы практически исчезает.

Такое резкое изменение поведения системы говорит об изменении основного механизма, приводящего к задержке флуоресценции. Если на предыдущих этапах характер послесвечения определялся пленением, вызванным диффузией излучения, то на рассматриваемом заключительном этапе мы имеем дело с излучением кластеров, случайно образующихся из близко расположенных атомов. В нашем случае разреженного облака это преимущественно кластеры, состоящие из двух атомов. У таких двухатомных квазимолекул среди возбужденных состояний есть долгоживущие антисимметричные состоя-

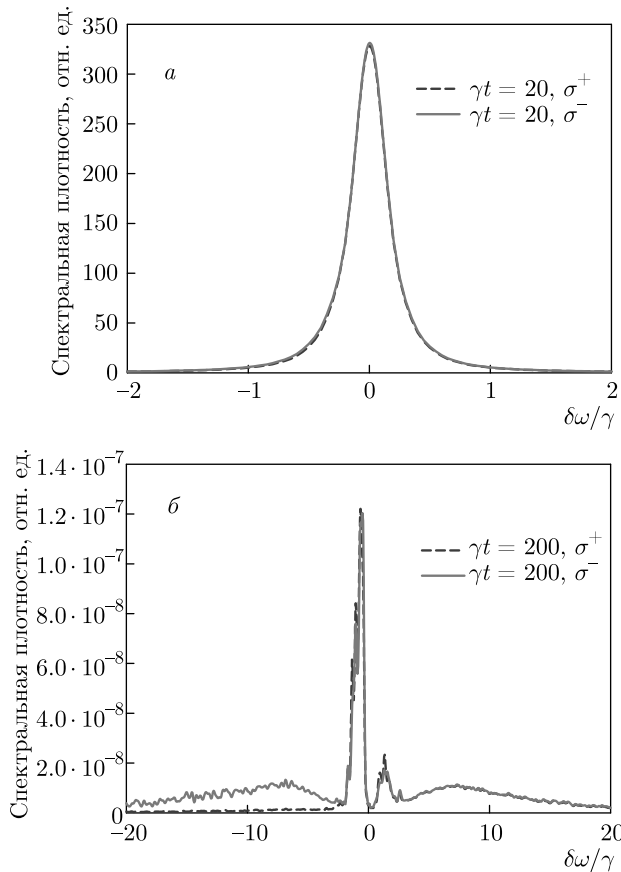


Рис. 2. Спектр право (σ^+) и лево (σ^-) циркулярно поляризованных компонент излучения, рассеянного атомным облаком на угол $\theta = \pi/4$, для разных моментов времени: $\gamma t = 20$ (а), 200 (б). Расчет проведен для ансамбля $kL = 50$. Падающее излучение лево циркулярно поляризовано

ния, которые характеризуются большими временами жизни и которые ответственны за «классический» процесс субизлучения, предсказанный Дике.

Убедиться в изменении механизма задержки можно, проанализировав спектр вторичного излучения. В данной работе для определения спектра мы используем оконное преобразование Фурье [27] с окном прямоугольной формы и длительностью $\gamma\Delta t = 30$. На рис. 2а показаны спектры двух ортогональных циркулярно поляризованных компонент излучения, рассеянного на угол $\theta = \pi/4$, для случая, когда середине окна соответствует момент времени $\gamma t = 20$ после окончания возбуждения. На этом этапе мы наблюдаем лоренцев контур на частоте возбуждения, что говорит о том, что основной вклад в излучение дают несмещенные по частоте коллективные состояния.

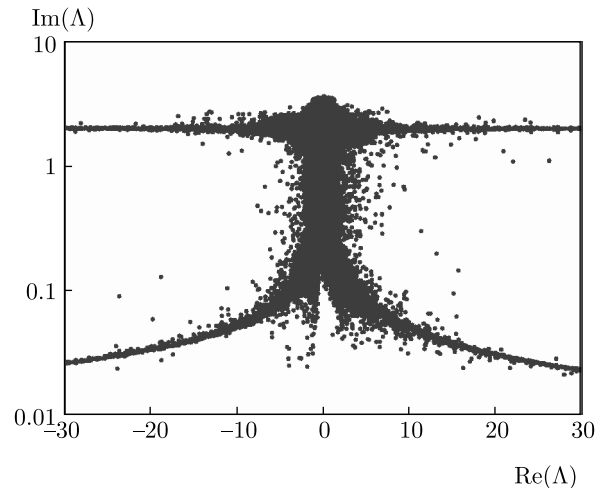


Рис. 3. Спектр коллективных состояний атомного ансамбля плотностью $n = 0.005k^3$, $kL = 50$

При переходе к этапу двухатомного субизлучения $\gamma t = 200$ (рис. 2б) спектр существенно изменяется. Здесь флуоресценция характеризуется сложной формой спектра, имеющей широкие крылья.

Наблюдаемая форма спектра определяется сложной структурой коллективных состояний, формируемой в результате диполь-дипольного взаимодействия, обусловленного многократным обменом фотонами между атомами. По существу, мы имеем дело с огромной квазимолекулой, состоящей из всех атомов, образующих ансамбль. На рис. 3 в качестве примера приведен спектр состояний для атомного облака с плотностью $n = 0.005k^3$ и размером $kL = 50$. Этот спектр определяется набором собственных чисел Λ матрицы Грина для рассматриваемой системы $G_{ee'} = i\delta_{ee'} + (1 - \delta_{ee'})V_{ee'}$. Вещественная часть произведения $\gamma\Lambda$ равна сдвигу коллективного состояния относительно частоты перехода свободного атома, а мнимая — скорости его спонтанного распада. Результат, приведенный на рис. 3, получен усреднением по 600 различных случайных пространственных конфигураций атомов в ансамбле.

Как видно из рис. 3, большинство коллективных состояний для рассматриваемого разреженного ансамбля имеет относительно малый сдвиг, что обусловлено большим средним межатомным расстоянием, а следовательно, слабостью межатомного диполь-дипольного взаимодействия. Эти состояния определяют характер диффузии излучения и эффект пленения. Имеется, однако, некоторое число состояний с большими сдвигами и заметным отличием времени жизни от естественного. Эти состоя-

ния лежат на четырех хорошо различимых ветвях и связаны с отмеченным выше существованием в неупорядоченной среде пар близко расположенных атомов.

В рассматриваемом случае атомов с угловым моментом $J_e = 1$ собственные числа матрицы Грина, а следовательно, коллективные состояния двухатомных кластеров могут быть найдены аналитически. У таких кластеров имеется шесть возбужденных состояний. Две пары состояний вырождены. Сдвиги частот и ширины четырех различных состояний удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{\gamma} &= \frac{3\epsilon}{4} \left(-\frac{p \cos(kr)}{kr} + q \left(\frac{\cos(kr)}{(kr)^3} + \frac{\sin(kr)}{(kr)^2} \right) \right), \\ \frac{\Gamma}{\gamma} &= 1 - \frac{3\epsilon}{2} \left(-\frac{p \sin(kr)}{kr} + \right. \\ &\quad \left. + q \left(\frac{\sin(kr)}{(kr)^3} - \frac{\cos(kr)}{(kr)^2} \right) \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\epsilon = \pm 1$, $p_0 = 0$, $q_0 = -2$, $p_{\pm 1} = 1$, $q_{\pm 1} = 1$.

Для суперизлучательных двухатомных состояний скорость распада приблизительно в два раза больше, чем для свободного атома (две верхние ветви на рис. 3). Для субизлучательных время жизни стремится к бесконечности при сближении атомов (нижние ветви). При этом спектральный сдвиг также стремится к бесконечности.

В процессе взаимодействия ансамбля с внешним излучением возбуждаются все коллективные состояния, в том числе и долгоживущие кластерные. Именно эти состояния и дают основной вклад в излучение на больших временах. Чем больше времени прошло с окончания возбуждения, тем более долгоживущие состояния дают наблюдаемый вклад во флуоресценцию, несмотря на относительно малую вероятность их возбуждения. По этой причине мы наблюдаем на рис. 1 монотонное возрастание мгновенного времени пленения.

Пленение и двухатомное субизлучение в эксперименте можно различить не только по характерным временам затухания или по спектральному составу. Эти два механизма различаются также поляризационными свойствами вторичного излучения при возбуждении ансамбля поляризованным светом. Многократное рассеяние в условиях пленения приводит к существенной деполяризации, что хорошо видно на рис. 2а. Спектральные плотности двух ортогональных поляризационных компонент одинаковы. Свет не поляризован.

При рассеянии на двухатомных кластерах свет остается частично поляризованным. При этом в од-

ном спектральном крыле, соответствующем положительным отстройкам, излучение не поляризовано, а в другом наблюдается существенное различие интенсивностей различных поляризационных компонент (рис. 2б). Такое различие поляризации в разных крыльях спектра можно объяснить спецификой двухатомных субизлучательных состояний. Долгоживущие состояния с положительным сдвигом частоты формируются из атомных состояний с проекцией углового момента $m = 0$. При распаде таких квазимолекулярных состояний возникающее излучение не обладает циркулярной поляризацией. Состояния, сдвинутые в отрицательную область и имеющие большие времена жизни, обусловлены смешиванием атомных состояний с $m = \pm 1$. Их распад дает поляризованное излучение.

На рис. 4 приведены результаты расчета интенсивности двух ортогональных циркулярных поляризационных компонент, излучаемых на угол $\theta = \pi/4$, для широкого временного интервала. Для рассматриваемого резонансного возбуждения эффект пленения доминирует на достаточно длительном промежутке времени, на котором свет флуоресценции не поляризован. Начиная с времен $\gamma t \simeq 100$ становится заметен вклад двухатомного субизлучения. Интенсивности двух ортогональных поляризационных компонент на этом этапе различны. Свет становится частично поляризованным. Момент $\gamma t \simeq 100$ хорошо согласуется с результатами, показанными на рис. 1, где этап режима пленения излучения также заканчивается приблизительно на этих временах.

Для лучшего понимания процессов, происходящих на этапе послесвечения, помимо свойств вторичного излучения, мы проанализировали также пространственное распределение возбужденных атомов в ансамбле и его изменение со временем. Для двух моментов времени $\gamma t = 20$ и $\gamma t = 200$ после окончания импульса это распределение для облака с $kL = 50$ показано на рис. 5.

Видно, что для времен, для которых наблюдается медленная зависимость мгновенного времени пленения $\tau(t)$ (рис. 5а), пространственное распределение возбужденных атомов, которое для разреженных сред должно совпадать с распределением плененного излучения, с хорошей точностью описывается законом синуса. Такая зависимость характерна для диффузионного переноса и обеспечивает постоянную скорость затухания излучения. На границах облака возбуждение не равно нулю. Оно обращается в нуль на некотором расстоянии от границы облака. Именно поэтому время пленения определяется не оптической толщиной b , а несколько боль-

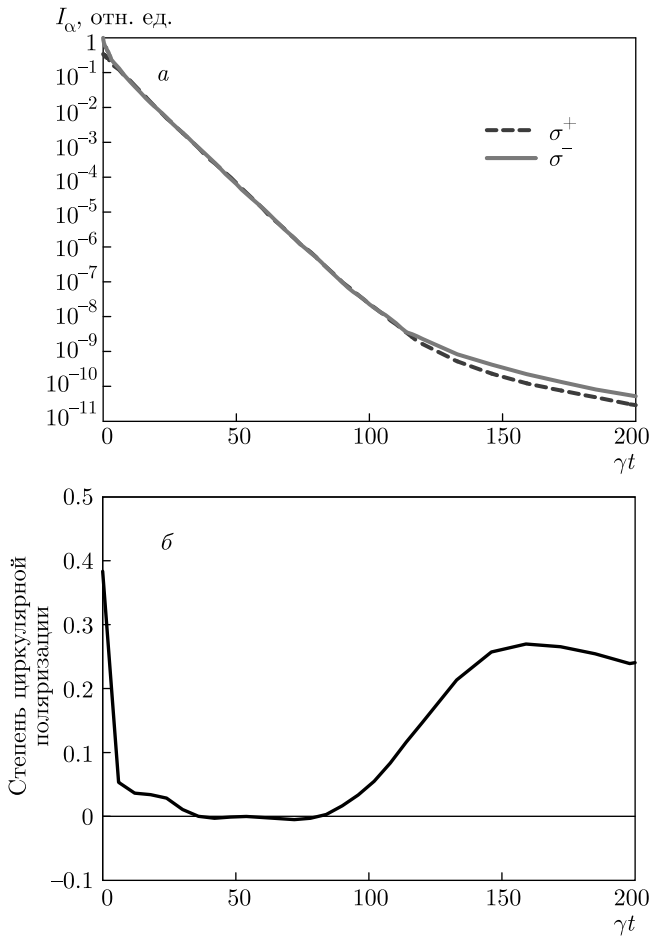


Рис. 4. Динамика изменения интенсивности двух ортогональных циркулярно поляризованных компонент (а) и степени циркулярной поляризации (б) излучения на угол $\pi/4$. Возбуждение осуществляется светом с левой циркулярной поляризацией, $kL = 50$

шей величиной b' . Пока самая медленная диффузионная мода не распадется, форма распределения не меняется, изменяется только абсолютная величина плотности возбуждения. По мере приближения к последнему этапу на синусоидальной зависимости появляются некоторые «выбросы», которые со временем становятся доминирующими. Для больших времен, когда диффузия закончилась, распределение возбуждения становится практически равномерным (см. рис. 5б). Следы флуктуаций, сохраняющиеся на рис. 5, обусловлены усреднением по конечному (порядка 60000) числу ансамблей со случайным распределением атомов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы детально проанализировали временную зависимость интенсивности флюо-

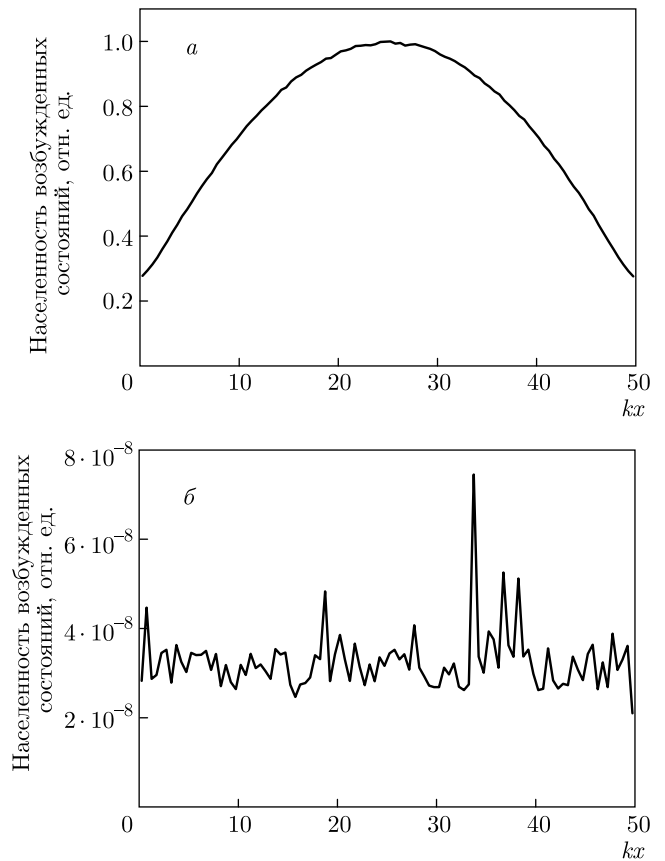


Рис. 5. Пространственное распределение возбужденных атомов в облаке $kL = 50$ для разных моментов времени: $\gamma t = 20$ (а), 200 (б)

ресценции, ее спектральный состав и поляризацию, а также пространственное распределение атомов, возбуждаемых импульсным излучением. Этот анализ показал, что при резонансном возбуждении задержка флуоресценции на разных этапах обусловлена разными механизмами. Вначале доминирует эффект пленения излучения, а на заключительном этапе основной вклад дает двухатомное субизлучение Дике. Изменение механизма флуоресценции приводит к качественным изменениям ее характеристик. На определенном этапе появляется поляризация, а спектр претерпевает существенное уширение.

Обнаруженные эффекты могут быть использованы при более детальном экспериментальном анализе свойств атомных ансамблей, охлаждаемых до сверхнизких температур в специальных ловушках.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. V. Hau, *Nature Photon.* **2**, 451 (2008).
2. D. Bouwmeester, A. Ekert, and A. Zeilinger, *The Physics of Quantum Information*, Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
3. B. J. Bloom, T. L. Nicholson, J. R. Williams et al., *Nature* **506**, 71 (2014).
4. R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).
5. M. O. Araújo, I. Krešić, R. Kaiser, and W. Guerin, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 073002 (2016).
6. S. J. Roof, K. J. Kemp, M. D. Havey, and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 073003 (2016).
7. W. Guerin, M. O. Araújo, and R. Kaiser, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 083601 (2016).
8. L. L. Foldy, *Phys. Rev.* **67**, 107 (1945).
9. M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 287 (1951).
10. J. Javanainen, J. Ruostekoski, B. Vestergaard, and M. R. Francis, *Phys. Rev. A* **59**, 649 (1999).
11. M. Rusek, J. Mostowski, and A. Orłowski, *Phys. Rev. A* **61**, 022704 (2000).
12. F. A. Pinheiro, M. Rusek, A. Orłowski, and B. A. van Tiggelen, *Phys. Rev. E* **69**, 026605 (2004).
13. H. Fu and P. R. Berman, *Phys. Rev. A* **72**, 022104 (2005).
14. A. A. Svidzinsky, J. T. Chang, and M. O. Scully, *Phys. Rev. A* **81**, 053821 (2010).
15. Д. В. Кузнецов, Вл. К. Рерих, М. Г. Гладуш, *ЖЭТФ* **140**, 742 (2011).
16. T. Bienaimé, R. Bachelard, P. W. Courteille, N. Piovella, and R. Kaiser, *Fortschr. Phys.* **61**, 377 (2013).
17. S. E. Skipetrov and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 023905 (2014).
18. L. Bellando, A. Gero, E. Akkermans, and R. Kaiser, *Phys. Rev. A* **90**, 063822 (2014).
19. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. A* **91**, 053822 (2015).
20. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. A* **94**, 022511 (2016).
21. И. М. Соколов, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 317 (2017).
22. W. Guerin, M. T. Rouabah, and R. Kaiser, *J. Mod. Opt.* **64**, 895 (2017).
23. A. S. Kuraptsev, I. M. Sokolov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **96**, 023830 (2017).
24. S. E. Skipetrov and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. B* **99**, 134201 (2019).
25. И. М. Соколов, Д. В. Куприянов, М. Д. Хэви, *ЖЭТФ* **139**, 288 (2011).
26. M. C. W. van Rossum and Th. M. Nieuwenhuizen, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 313 (1999).
27. С. В. Божокин, И. М. Соколов, *ЖТФ* **88**, 1771 (2018).

ЧИСЛО СОЛИТОНОВ, ПОРОЖДАЕМЫХ ИЗ ИНТЕНСИВНОГО НАЧАЛЬНОГО ИМПУЛЬСА ПРИ АСИМПТОТИЧЕСКИ БОЛЬШИХ ВРЕМЕНАХ

*А. М. Камчатнов**

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

*Московский физико-технический институт
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 31 августа 2020 г.,
после переработки 21 сентября 2020 г.
Принята к публикации 21 сентября 2020 г.

На основе теоремы Гуревича и Питаевского о числе осцилляций, входящих в область дисперсионной ударной волны при эволюции нелинейного импульса, предложен способ вывода формул для числа солитонов, на которые распадается достаточно интенсивный начальный импульс в виде локализованной простой волны при асимптотически больших временах. В случае интегрируемых уравнений этим методом воспроизводятся формулы типа Карпмана, следующие из квазиклассического приближения для ассоциированной с рассматриваемым уравнением линейной спектральной задачи. Показано на конкретных примерах, что в случае неинтегрируемых уравнений получают выражения, предложенные ранее путем формального продолжения решения модуляционных уравнений Уизема на бездисперсионную область волны.

DOI: 10.31857/S0044451021010065

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, если в нелинейной волновой системе могут распространяться солитоны в виде, предположим, положительных импульсов рассматриваемой физической переменной, то достаточно интенсивное начальное возмущение того же знака распадается в конечном счете на некоторое число солитонов. Поскольку число образующихся солитонов является наиболее просто измеряемым параметром в процессах, включающих рождение солитонов, методы расчета этого числа имеют большое значение в теории солитонов. В случае нелинейных волновых уравнений, к которым применим метод обратной задачи рассеяния, параметры получающихся солитонов могут быть найдены из дискретного спектра ассоциированной с уравнением линейной задачи (см., например, [1]). В частности, число солитонов равно числу дискретных собственных значений в этой

линейной задаче, и если это число велико, то к линейной спектральной задаче применим квазиклассический метод, выражающий параметры солитонов через начальную форму импульса. Например, уравнение Кортевега–де Фриза (КдФ), которое мы напишем здесь в стандартных безразмерных переменных,

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (1)$$

ассоциировано со спектральной задачей Шредингера [2] $\psi_{xx} = -(\lambda + u)\psi$, и если начальному распределению $u = u_0(x) \geq 0$, $u_0(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, соответствует большое число собственных значений $-\lambda_i > 0$, то известные из квантовой механики формулы метода ВКБ дают для их числа N простое приближенное выражение Карпмана [3, 4]:

$$N \approx \frac{1}{\pi} \int \sqrt{u_0(x)} dx. \quad (2)$$

Аналогичные выражения могут быть получены и для других нелинейных волновых уравнений, являющихся полностью интегрируемыми. Однако такой подход ограничен лишь относительно узким (хотя и важным) классом таких уравнений и, кроме того,

* E-mail: kamch@isan.troitsk.ru

он оставляет в тени процесс трансформации изначально широкого и гладкого распределения $u_0(x)$ в набор солитонных импульсов

$$u_i(x, t) = \frac{-\lambda_i}{\operatorname{ch}^2 [\sqrt{-\lambda_i}(x + 4\lambda_i t)]}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Здесь используется лишь факт, что при эволюции $u(x, t)$ согласно уравнению КдФ (1) спектр линейной задачи не изменяется и начальная «перевернутая яма» с большим числом собственных значений трансформируется в N более узких и низких импульсов (3), каждый из которых отвечает своему собственному значению $-\lambda_i$.

Детальная картина эволюции широкого и интенсивного начального импульса была предложена Гуревичем и Питаевским [5], согласно ей изначально гладкий импульс в процессе эволюции «опрокидывается» с образованием на его фронте дисперсионной ударной волны (ДУВ), которую можно представить в виде промодулированного периодического решения рассматриваемого уравнения. Эволюция ДУВ описывается модуляционными уравнениями для параметров, характеризующих периодическое решение, и в работе Уизема [6] такие модуляционные уравнения для периодических решений уравнения КдФ были получены путем усреднения законов сохранения. В этом случае имеются три модуляционных параметра r_i , $i = 1, 2, 3$, являющихся римановыми инвариантами системы Уизема, которому удалось преобразовать свою систему модуляционных уравнений к диагональному виду. В работе [5] Гуревич и Питаевский рассмотрели типичные ДУВ, возникающие при опрокидывании волны. В рассматриваемом нами случае, когда начальный импульс $u_0(x)$ представляет собой возвышение на нулевом фоне, волна опрокидывается на переднем фронте, и на этом своем крае ДУВ вырождается в солитонное решение с $-\lambda = r_3 = r_2 > r_1 = 0$, распространяющееся по невозмущенному фону. Задний малоамплитудный край ДУВ движется по неоднородному и, вообще говоря, эволюционирующему фону импульса с групповой скоростью, определяемой локальными значениями $r_1 = r_2 = 0$ и $r_3 > 0$. Решение уравнений Уизема для общей формы локализованного начального распределения было получено в работе [7], и из него следует формула для распределения волнового числа, т. е. плотности длин волн, вдоль ДУВ. При асимптотически больших временах ДУВ распространяется на весь импульс и каждая длина волны соответствует одному солитону в пределе $t \rightarrow \infty$. Эта теория воспроизводит в асимптотическом пределе результаты Карпмана и, в частнос-

ти, формулу (2) для числа солитонов. Таким образом, трансформация изначально гладкого импульса в набор солитонов происходит через промежуточную стадию образования ДУВ и ее распространения на весь импульс с последующим распадом на отдельные солитоны. Развита теория дает удовлетворительную картину явления в целом, но в количественном отношении она применима лишь к полностью интегрируемым уравнениям, и поэтому необходимо хотя бы частичное ее обобщение на любые нелинейные волновые уравнения, допускающие устойчивые солитонные решения. В настоящей работе мы покажем, что формула для числа солитонов, порождаемых начальным импульсом в виде простой волны, распространяющейся в неподвижную среду, может быть выведена для весьма широкого класса нелинейных волновых уравнений без использования метода обратной задачи рассеяния.

2. КВАЗИПРОСТЫЕ ДИСПЕРСИОННЫЕ УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

Обсудим здесь некоторые свойства рассматриваемого класса начальных импульсов, соответствующих однонаправленному их распространению вглубь покоящейся среды. Фактически, во многих реальных задачах такие начальные условия возникают естественным образом, так как в случае плоских волн с единственной существенной пространственной координатой x любой начальный импульс распадается со временем на два импульса, распространяющихся в противоположных направлениях оси x . Такие однонаправленные волны до момента опрокидывания, пока их форма остается достаточно плавной и поэтому дисперсионными эффектами можно пренебречь, являются простыми, т. е. в них все физические переменные могут быть выражены через одну из них. Для большого числа физических систем с двумя физическими переменными это означает, что можно ввести такие их комбинации r_{\pm} , называемые бездисперсионными римановыми инвариантами, что вдоль каждой простой волны один из этих инвариантов постоянен, а другой изменяется [8]. Если тем или иным образом учесть дисперсию, то мы придем к нелинейному волновому уравнению для однонаправленного распространения волны, и частным примером такого уравнения является уравнение КдФ (1) с единственной изменяющейся переменной u . Возникающая при опрокидывании такой волны ДУВ является квазипростой [9], когда она распро-

страняется вглубь однородной покоящейся среды с постоянными физическими параметрами, т. е. с постоянными бездисперсионными римановыми инвариантами r_{\pm} . В частности, в теории, сводящейся к уравнению КдФ, один бездисперсионный риманов инвариант (скажем, r_-) предполагается постоянным по определению, а если, кроме того, импульс распространяется в покоящуюся среду, то внутри нее r_+ также постоянен и может быть выбран равным нулю подходящим преобразованием переменных. В теории Гуревича–Питаевского он «сшивается» с римановым инвариантом r_1 системы Узема, так что в квазипростой волне, динамика которой описывается уравнением КдФ, риманов инвариант r_1 имеет постоянное нулевое значение и все физические переменные выражаются через r_2 и r_3 . В случае неинтегрируемых уравнений римановы инварианты системы Узема отсутствуют, но тем не менее квазипростые ДУВ обладают некоторыми свойствами, упрощающими их исследование.

Прежде всего, Гуревич и Мещеркин предположили в работе [10], что даже в неинтегрируемом случае опрокидывание простой волны, распространяющейся в неподвижную среду, ведет к образованию единственной ДУВ, соединяющей состояния среды с одинаковыми значениями одного из бездисперсионных римановых инвариантов. Сравнение с результатами численных расчетов показывает, что это предположение выполняется с хорошей точностью для не слишком большой амплитуды волны, и мы ограничимся обсуждением именно такого случая.

Далее, малоамплитудный край ДУВ распространяется с групповой скоростью линейной волны, отвечающей закону дисперсии $\omega = \omega(u, k)$, где u — локальное значение примыкающего к этому краю фона, а волновое число k удовлетворяет указанному Уземом [6] закону сохранения числа волн:

$$k_t + \omega_x = 0. \tag{4}$$

Здесь $k/(2\pi)$ имеет смысл «плотности волн», т. е. числа длин волн, приходящихся на единицу длины, а $\omega/(2\pi)$ играет роль «плотности потока волн». В силу известной оптико-механической аналогии (см., например, [11]) движение малоамплитудного края, являющегося пакетом из группы линейных волн с частотой несущей волны $\omega(k)$, подчиняется уравнениям Гамильтона

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad \frac{dk}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial x}, \tag{5}$$

где первое уравнение соответствует определению групповой скорости, а второе согласуется с (4) при

дифференцировании вдоль траектории пакета. В нашей задаче существенно, что зависимость гамильтониана от x и t осуществляется через посредство фоновой амплитуды $u = u(x, t)$, примыкающей к малоамплитудному краю и являющейся решением бездисперсионного уравнения

$$u_t + V_0(u)u_x = 0. \tag{6}$$

В частности, из этого уравнения и второго уравнения (5) получаем соотношения

$$\begin{aligned} \frac{dk}{dt} &= -\frac{\partial \omega}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{du}{dt} &= \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} - V_0 \right) \frac{\partial u}{\partial x}, \end{aligned} \tag{7}$$

так что их отношение дает обыкновенное дифференциальное уравнение для $k(u)$:

$$\frac{dk}{du} = \frac{\partial \omega / \partial u}{V_0(u) - \partial \omega / \partial k}. \tag{8}$$

Оно было выведено Элем в работе [12] из закона сохранения числа волн (4) на основе анализа свойств характеристик системы Узема. Начальное условие для этого уравнения можно определить из того обстоятельства, что в момент опрокидывания на границе с покоящейся средой, где $u = 0$, в приближении Узема ДУВ сжимается в точку, так что малоамплитудный край соединяется с солитонным краем, на котором $k = 0$, и, следовательно,

$$k(0) = 0. \tag{9}$$

Решение уравнения (8) с начальным условием (9) дает нам волновое число k вдоль пути малоамплитудного края ДУВ как функцию от локального значения примыкающего фона u . Например, в случае эволюции начального импульса, подчиняющегося уравнению КдФ, решение указанной задачи с $V_0 = 6u$ и $\omega(u, k) = 6uk - k^3$ дает для этого волнового числа значение $k = 2\sqrt{u}$. Поэтому при эволюции импульса в форме ступеньки с амплитудой u_0 волновое число на малоамплитудном крае ДУВ равно $k_0 = 2\sqrt{u_0}$ и групповая скорость движения этого края равна $v_g = 6u_0 - 3k_0^2 = -6u_0$ в согласии с полным решением задачи Гуревича–Питаевского, полученным в работе [5]. Этот подход допускает обобщение на солитонный край квазипростых ДУВ [12], что позволило найти основные параметры ДУВ в задаче об эволюции ступеньки для большого числа физически важных неинтегрируемых уравнений [12–20].

Если не накладывать на решение уравнения (8) граничных условий, то оно будет содержать постоянную интегрирования q :

$$k = k(u, q). \tag{10}$$

При подстановке этой функции в первое уравнение Гамильтона (5) мы получим в качестве его решения некую траекторию движения волнового пакета на неоднородном и изменяющемся со временем фоне $u = u(x, t)$, причем вдоль этой траектории $q = \text{const}$, т.е. $q_t + v_g q_x = 0$. На малоамплитудном крае ДУВ это уравнение совпадает с одним из предельных уравнений Уизема, тогда как другим предельным уравнением является (6). Таким образом, система

$$u_t + V_0(u)u_x = 0, \quad q_t + v_g q_x = 0 \tag{11}$$

продолжает систему модуляционных уравнений Уизема за пределы дисперсионной ударной волны, а переменная q является римановым инвариантом модуляционных уравнений для линейных волн. Система (11) была недавно получена в работе [21] путем непосредственной диагонализации модуляционных уравнений (для солитонного края аналогичная система получена в [22]; общее обсуждение гамильтонова подхода к теории квазипростых ДУВ имеется в [23]).

Наконец, в конце работы [24] Гуревич и Питаевский высказали важное замечание, что групповая скорость малоамплитудного края v_g отличается от фазовой скорости волны V в этой точке, и поэтому длина области колебаний увеличивается за единицу времени на $|v_g - V|$, где знак модуля учитывает возможность разных знаков дисперсии и нелинейности. Следовательно, число периодов волны в ДУВ увеличивается со скоростью

$$\frac{dN}{dt} \approx \frac{1}{2\pi} |k(v_g - V)|, \tag{12}$$

где k — волновое число на малоамплитудном крае. Например, в задаче Гуревича–Питаевского о ступеньке в теории КдФ [5] мы имеем $k = k_0 = 2\sqrt{u_0}$, $v_g = \partial\omega/\partial k|_{k=k_0} = -6u_0$, $V = \omega/k|_{k=k_0} = 2u_0$, так что число осцилляций в ДУВ через время t равно

$$N \approx (8/\pi)u_0^{3/2}t. \tag{13}$$

Для времени $t = 15$ эта формула при $u_0 = 1$ предсказывает значение числа осцилляций $N \approx 38$, попадающих в область ДУВ. Это число совпадает с числом осцилляций на графике рис. 1, полученном численным решением уравнения КдФ, где область

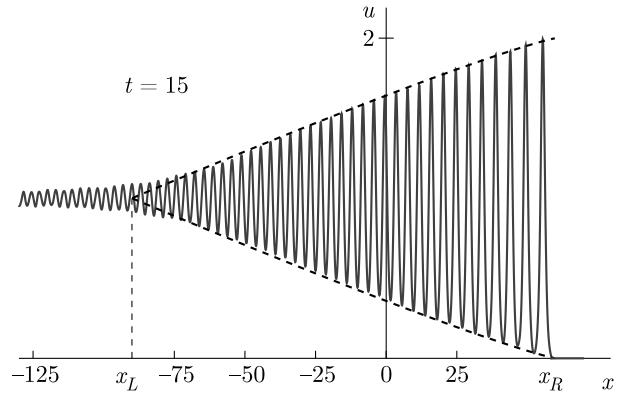


Рис. 1. Профиль ДУВ, образующейся в теории уравнения КдФ при эволюции начального разрыва. Начальная высота «ступеньки» при $x < 0$ равна единице. Сплошной линией показан результат численного решения уравнения КдФ (1), а штриховыми линиями изображены огибающие промодулированной волны согласно решению уравнений Уизема, полученному в работе [5]. На левой границе ДУВ при $x = x_L(t)$ амплитуда ДУВ в приближении Гуревича–Питаевского обращается в нуль

ДУВ определена огибающими промодулированной волны согласно теории Гуревича–Питаевского.

Если обратиться к задаче о числе солитонов, образующихся из локализованного импульса, то, интегрируя формулу (12) вдоль пути малоамплитудного края $x_L(t)$ от момента опрокидывания $t = 0$ до времени полного поглощения импульса ударной волной, получаем выражение [25]

$$N \approx \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty |k(v_g - V)| dt. \tag{14}$$

Групповая скорость малоамплитудного края, являющаяся в теории Уизема гидродинамической величиной, имеет в этом случае смысл скорости границы, отделяющей колебания, превращающиеся при $t \rightarrow \infty$ в солитоны, от линейного волнового пакета. Неточность в определении положения малоамплитудного края ДУВ в приближении Гуревича–Питаевского становится несущественной в асимптотическом пределе большого числа солитонов $N \gg 1$. Это основное предположение нашего подхода к вычислению числа солитонов подтверждается также тем, что в частном случае теории КдФ на этом пути, как будет показано ниже, воспроизводится формула Карпмана (2). Кроме того, в работах [26, 27] теория Гуревича–Питаевского для уравнения КдФ воспроизведена строгим асимптотическим анализом в рамках метода задачи Римана–Гильберта, что подтверждает основные предположения приближенной тео-

рии Уизема. Поэтому мы будем предполагать применимость общего метода Уизема и теории Гуревича–Питаевского для ДУВ также и к неинтегрируемым уравнениям. При этом подразумевается, что возникающие в процессе эволюции солитоны должны быть устойчивы [28], что мы будем предполагать в дальнейшем.

Исключив фазовую скорость $V = \omega/k$, представим формулу (14) в виде

$$N \approx \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \left| k \frac{\partial \omega}{\partial k} - \omega \right| dt, \quad (15)$$

где подынтегральное выражение (с точностью до знака модуля) имеет простой физический смысл: согласно закону сохранения числа волн (4) величина $\omega/(2\pi)$, вычисленная на малоамплитудном крае ДУВ, является потоком числа волн в область ДУВ, но из-за движения этого края с групповой скоростью $\partial\omega/\partial k$ частоту ω надо вычислять с учетом сдвига Доплера. Если связать теперь с волновым пакетом, движущимся вдоль малоамплитудного края, движение классической частицы с импульсом k и гамильтонианом $\omega(u, k)$, то подынтегральное выражение становится лагранжианом этой частицы, а интеграл представляет собой классическое действие S , соответствующее движению этой частицы вдоль всего импульса:

$$N \approx \frac{S}{2\pi}. \quad (16)$$

Таким образом, если мы можем найти подынтегральное выражение в (15) вдоль пути малоамплитудного края в зависимости от времени, то тем самым мы определим число солитонов, порождаемых импульсом. Задача о движении малоамплитудного края ДУВ для неинтегрируемых уравнений была решена в [29,30] и здесь мы применим развитую в этих работах теорию к вычислению числа солитонов для ряда неинтегрируемых уравнений. Приведем здесь необходимые формулы.

Пусть начальный импульс имеет профиль $u = u_0(x)$. Тогда в момент времени t его гладкий профиль вплоть до границы с ДУВ представляется известным решением уравнения (6):

$$x - V_0(u)t = \bar{x}(u), \quad (17)$$

где $\bar{x}(u)$ — функция, обратная начальному профилю $u_0(x)$. Нас интересует случай локализованного импульса, имеющего максимум u_m в некоторой точке x_m . Кроме того, мы считаем импульс равным нулю в области покоящейся среды $x > 0$ и стремимся

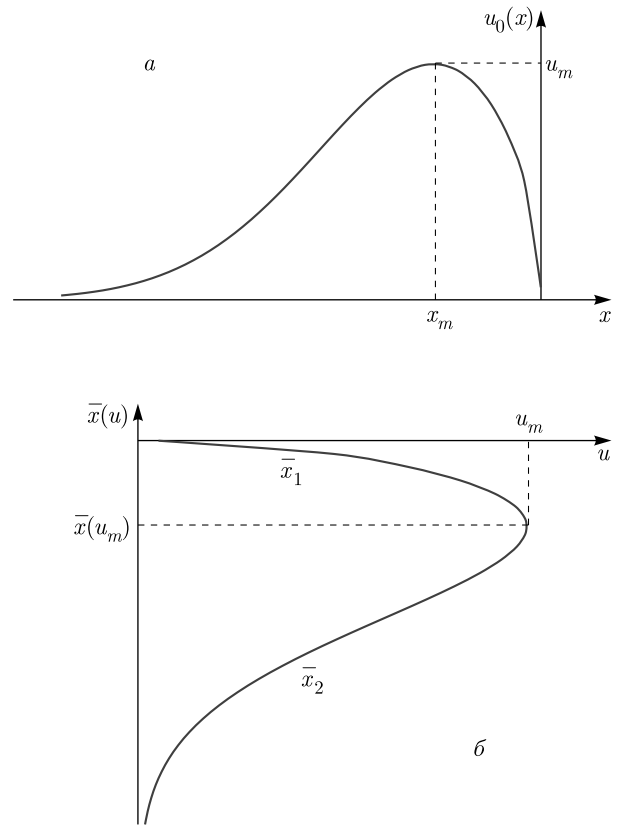


Рис. 2. а) Начальный профиль $u_0(x)$ импульса. б) Обратная функция $\bar{x}(u)$, состоящая из двух ветвей $\bar{x}_1(u)$ и $\bar{x}_2(u)$

к нулю при $x \rightarrow -\infty$; см. рис. 2а. Тогда обратная функция состоит из двух ветвей $\bar{x}_1(u)$ и $\bar{x}_2(u)$, показанных на рис. 2б, и каждой ветви соответствует решение (17). Сначала малоамплитудный край ДУВ движется по однозначной части решения, соответствующего ветви $\bar{x}_1(u)$, а после достижения точки максимума u_m он движется вдоль решения, соответствующего ветви $\bar{x}_2(u)$. За время dt этот край пройдет расстояние $dx = v_g dt$ и, предполагая параметрическую зависимость $t = t(u), x = x(u)$ вдоль пути малоамплитудного края, находим, что вдоль него удовлетворяется уравнение

$$\frac{dx}{du} - v_g \frac{dt}{du} = 0. \quad (18)$$

Этот же элемент пути dx за время dt соответствует прохождению малоамплитудным краем ДУВ участка граничащего с ДУВ гладкого решения (17), так что, продифференцировав (17) по u и исключив dx/du с помощью (18), мы придем к уравнению

$$(v_g - V_0) \frac{dt}{du} - \frac{dV_0}{du} t = \frac{d\bar{x}}{du}. \quad (19)$$

Его коэффициенты зависят от u и k , но вдоль малоамплитудного края зависимость $k(u)$ нам известна из решения уравнения (8), так что уравнение (19) представляет собой простое линейное уравнение для функции $t(u)$, которое для ветви $\bar{x}_1(u)$ должно решаться с начальным условием, гласящим, что опрокидывание происходит в момент $t = 0$ в точке с $u = 0$, т. е. $t(0) = 0$. Полученное решение справедливо до момента времени $t_m = t(u_m)$, в который малоамплитудный край достигает точки максимума распределения. При $t > t_m$ уравнение (19) решается для ветви $\bar{x}_2(u)$ с условием $t(u_m) = t_m$. В частном случае уравнения КдФ эта процедура была предложена в работе [9] с использованием преобразования годографа, а ее обобщение на неинтегрируемые уравнения было дано в работах [29, 30]. В результате подынтегральное выражение в (14) может быть представлено как функция от u , а функция $t(u)$ нам известна из решения линейного уравнения (19), так что нахождение числа солитонов сводится к вычислению интеграла от известной функции от фоновой амплитуды u . Рассмотрим несколько примеров, когда такое вычисление может быть проведено относительно просто.

3. ПРИМЕРЫ

Мы начнем с уравнений, в которых уже учтен переход к однонаправленному течению среды, так что не требуется вводить бездисперсионные римановы инварианты r_{\pm} .

3.1. Обобщенное уравнение КдФ

Введение дисперсионной поправки в уравнение (6) приводит к обобщенному уравнению КдФ:

$$u_t + V_0(u)u_x + u_{xxx} = 0, \quad V_0(0) = 0. \quad (20)$$

Условия, которые накладываются на функцию $V_0(u)$ для существования солитонов и их устойчивости, были получены в работе [31], и мы предполагаем их выполненными.

Линеаризуя уравнение (20), находим закон дисперсии линейных волн

$$\omega(u, r) = V_0(u)k - k^3, \quad (21)$$

так что уравнение (8) сводится [12] к уравнению

$$3k \frac{dk}{du} = V_0'(u),$$

решение которого с начальным условием (7) имеет вид (см. [12])

$$k(u) = \sqrt{\frac{2}{3}V_0(u)}. \quad (22)$$

Следовательно, групповая скорость волны на малоамплитудном крае с фоновым значением u равна $v_g(u) = -V_0(u)$. Поэтому (19) превращается в уравнение

$$-2V_0(u) \frac{dt}{du} - V_0'(u)t = \bar{x}'(u) \quad (23)$$

с решением [29]

$$t(u) = -\frac{1}{2\sqrt{V(u)}} \int_0^u \frac{\bar{x}'_1(u_1)}{\sqrt{V(u_1)}} du_1, \quad 0 < t < t_m,$$

$$t(u) = -\frac{1}{2\sqrt{V(u)}} \left\{ \int_0^{u_m} \frac{\bar{x}'_1(u)}{\sqrt{V(u_1)}} du_1 + \int_{u_m}^u \frac{\bar{x}'_2(u)}{\sqrt{V(u_1)}} du_1 \right\}, \quad t > t_m. \quad (24)$$

Подстановка всех этих выражений в (14) сводит задачу после простых преобразований к вычислению интеграла

$$N = \frac{(2/3)^{3/2}}{2\pi} \left\{ \int_0^{u_m} du \frac{V_0'(u)}{2} \int_u^{u_m} \frac{(\bar{x}'_2 - \bar{x}'_1) du_1}{\sqrt{V_0(u_1)}} + \int_0^{u_m} \sqrt{V_0(u)} (\bar{x}'_2 - \bar{x}'_1) du \right\}. \quad (25)$$

Здесь двойной интеграл сводится к однократному с помощью очевидного интегрирования по частям с учетом $V_0(0) = 0$, так что согласно определению функции $\bar{x}(u)$ мы получаем окончательное выражение:

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{u_m} \sqrt{\frac{2}{3}V_0(u)} (\bar{x}'_2 - \bar{x}'_1) du = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 \sqrt{\frac{2}{3}V_0(u_0(x))} dx. \quad (26)$$

Вспоминая выражение (22) для волнового числа, мы видим, что полученный результат можно записать как

$$N \approx \frac{1}{2\pi} \int k[u_0(x)] dx, \quad (27)$$

что совпадает с известной формулой Карпмана (2) в частном случае интегрируемого уравнения КдФ, когда $V_0(u) = 6u$ и $k(u) = 2\sqrt{u}$.

Следует подчеркнуть, что в случае уравнения КдФ соотношение $k(u) = 2\sqrt{u}$ является непосредственным следствием ассоциированной с уравнением КдФ спектральной задачи Шредингера $\psi_{xx} = -(u + \lambda)\psi$ с «потенциалом» u в пределе $\lambda \rightarrow 0$. В случае неинтегрируемых уравнений ассоциированная спектральная задача отсутствует и соотношение (22) получается интегрированием соответствующего уравнения (8), которое является следствием уравнений Гамильтона для движения волнового пакета на малоамплитудном крае ДУВ вдоль эволюционирующего со временем гладкого фона.

3.2. Уравнение «магмы»

Другим интересным примером однонаправленного распространения нелинейных волн с дисперсией являются волны, распространяющиеся вдоль струи вязкой жидкости, всплывающей в окружении упругой среды. Такие волны описываются так называемым уравнением «магмы», впервые выведенным в геофизических приложениях для описания течения магмы [32, 33] через земную мантию. Это уравнение имеет солитонные решения [34], что было подтверждено в экспериментах со струями жидкости [35, 36]. Простой вывод уравнения магмы, а также теория ДУВ в задаче Гуревича – Питаевского о распаде начального распределения в виде ступеньки, представлены в работе [16], где можно найти ссылки на более ранние работы. Мы запишем уравнение магмы в форме

$$u_t + (u^2)_x - [u^2(u^{-1}u_t)_x]_x = 0, \quad (28)$$

где $u(x, t)$ имеет смысл локальной площади сечения всплывающей струи на высоте x в момент времени t . Линеаризация этого уравнения приводит к закону дисперсии

$$\omega(u, k) = \frac{2uk}{1 + uk^2}. \quad (29)$$

Фазовая скорость $V(u, k) = \omega/k = 2u/(1 + uk^2)$ в бездисперсионном пределе $k \rightarrow 0$ равна $V_0(u) = 2u$, так что эволюция плавных волн подчиняется уравнению

$$u_t + 2uu_x = 0. \quad (30)$$

Для описания движения малоамплитудного края ДУВ, где $k = k(u)$, удобно ввести переменную [16]

$$\alpha(u) = \frac{1}{1 + uk^2(u)}. \quad (31)$$

Тогда вдоль пути этого края уравнение (8) сводится к следующему:

$$\frac{d\alpha}{du} = -\frac{(\alpha + 1)\alpha}{u(2\alpha + 1)}. \quad (32)$$

Считая, что импульс распространяется в область с единичной площадью $u = 1$, откуда следует начальное условие $\alpha(1) = 1$, получаем решение этого уравнения в форме [16]

$$u = \frac{2}{\alpha(\alpha + 1)}, \quad k(\alpha) = \sqrt{\frac{1}{2}(1 - \alpha^2)}. \quad (33)$$

Поскольку переменные u и α однозначно связаны друг с другом найденным соотношением, будем задавать начальное состояние волны распределением $\alpha = \alpha_0(x)$, имеющим две ветви обратной функции $\bar{x}_{1,2}(\alpha)$. Переписанное через переменную α уравнение (30)

$$\alpha_t + \frac{4}{\alpha(\alpha + 1)}\alpha_x = 0 \quad (34)$$

имеет для каждой ветви решение

$$x - \frac{4}{\alpha(\alpha + 1)}t = \bar{x}(\alpha). \quad (35)$$

Малоамплитудный край движется по гладкому фону, описываемому этими решениями, с групповой скоростью

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = 8 - \frac{12}{\alpha + 1} \quad (36)$$

и условие согласования уравнения движения этого края

$$\frac{dx}{d\alpha} - v_g \frac{dt}{d\alpha} = 0 \quad (37)$$

с эволюцией примыкающего фона согласно формуле (35) приводит к уравнению

$$\frac{4(\alpha - 1)(2\alpha + 1)}{\alpha(\alpha + 1)} \frac{dt}{d\alpha} + \frac{4(2\alpha + 1)}{\alpha^2(\alpha + 1)^2} t = \bar{x}'(\alpha). \quad (38)$$

Из выражений (33) ясно, что переменная α находится в интервале $0 < \alpha < 1$ и в момент опрокидывания импульса $t = 0$ равна единице, так что на начальном этапе эволюции ДУВ решение уравнения (38) имеет вид

$$t_1(\alpha) = \frac{\alpha}{4\sqrt{1 - \alpha^2}} \int_{\alpha}^1 \frac{(1 + \alpha)^{3/2} \bar{x}'_1(\alpha)}{(1 + \alpha)^{1/2} (1 + 2\alpha)} d\alpha. \quad (39)$$

Оно справедливо до момента $t_m = t_1(\alpha_m)$, где минимальное значение α_m отвечает максимуму в начальном распределении u . После этого момента уравнение (38) решается с начальным условием $t(\alpha_m) = t_m$, что дает

$$t_2(\alpha) = \frac{\alpha}{4\sqrt{1-\alpha^2}} \left\{ \int_{\alpha_m}^1 \frac{(1+\alpha)^{3/2} \bar{x}'_1(\alpha)}{(1+\alpha)^{1/2}(1+2\alpha)} d\alpha + \int_{\alpha}^{\alpha_m} \frac{(1+\alpha)^{3/2} \bar{x}'_2(\alpha)}{(1+\alpha)^{1/2}(1+2\alpha)} d\alpha \right\}. \quad (40)$$

Для вычисления количества солитонов, порождаемых импульсом, мы подставляем закон дисперсии (29) и выражение (33) для волнового числа в формулу (14) и с помощью (38) получаем

$$N = \frac{1}{2\pi} \int \frac{4\sqrt{2}(1-\alpha^2)^{3/2}}{(1+\alpha)^2} \frac{dt}{d\alpha} d\alpha = \frac{4\sqrt{2}}{2\pi} \int_{\alpha_m}^1 \frac{(1-\alpha^2)^{3/2}}{(1+\alpha)^2} \left[\frac{1}{\alpha(1-\alpha^2)}(t_2 - t_1) - \frac{\alpha(1+\alpha)}{4(1-\alpha)(1+2\alpha)}(\bar{x}'_2 - \bar{x}'_1) \right] d\alpha. \quad (41)$$

При подстановке сюда формул (39) и (40) возникает двойной интеграл, который снова преобразуется к однократному с помощью интегрирования по частям, так что после простых преобразований найдем

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_{\alpha_m}^1 \sqrt{\frac{1-\alpha^2}{2}} (\bar{x}'_2(\alpha) - \bar{x}'_1(\alpha)) d\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 \sqrt{\frac{1-\alpha_0(x)^2}{2}} dx. \quad (42)$$

С учетом (33) это выражение также совпадает с (27).

3.3. Уравнение Серра

Когда мы имеем дело с уравнениями, описывающими распространение волн в обоих направлениях, мы должны ограничиться начальными условиями в виде простой волны, опрокидывание которой приводит к образованию квазипростой ДУВ. Мы проиллюстрируем этот подход на примере уравнений Серра [37], описывающих динамику мелкой воды без предположения о малости нелинейных эффектов. Эти уравнения позднее выводились заново в работах [38, 39] и поэтому в литературе часто называются также уравнениями Су – Гарднера или Грина – Нахди. Мы запишем эти уравнения в стандартной форме с безразмерными переменными:

$$h_t + (hu)_x = 0, \quad (43)$$

$$u_t + uu_x + h_x = \frac{1}{3h} [h^3(u_{xt} + uu_{xx} - (u_x)^2)]_x,$$

где h — полная локальная глубина жидкости, u — горизонтальная скорость течения, усредненная по глубине жидкости.

Если пренебречь дисперсионными эффектами, т. е. опустить в (43) все члены с высшими производными, то мы возвращаемся к известным уравнениям мелкой воды (см., например, [8]):

$$h_t + (hu)_x = 0, \quad u_t + uu_x + h_x = 0, \quad (44)$$

совпадающими по форме с уравнениями газовой динамики с h и u , играющими роль плотности газа и скорости его течения, соответственно, и с уравнением состояния $p = h^2/2$, где p — аналог «давления». «Скорость звука» в таком газе равна $c = (dp/dh)^{1/2} = \sqrt{h}$. Эти уравнения удобно преобразовать к новым переменным — упомянутым во Введении бездисперсионным римановым инвариантам

$$r_+ = u/2 + \sqrt{h}, \quad r_- = u/2 - \sqrt{h}, \quad (45)$$

так что уравнения (44) принимают вид

$$\frac{\partial r_+}{\partial t} + v_+ \frac{\partial r_+}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial r_-}{\partial t} + v_- \frac{\partial r_-}{\partial x} = 0, \quad (46)$$

где характеристические скорости также очень просто выражаются через r_{\pm} :

$$v_+ = \frac{1}{2}(3r_+ + r_-), \quad v_- = \frac{1}{2}(r_+ + 3r_-). \quad (47)$$

В простой волне один из римановых инвариантов имеет постоянное значение. Мы для определенности будем рассматривать распространяющийся в положительном направлении оси x импульс возвышения жидкости, вдоль которого постоянен инвариант $r_- = u/2 - \sqrt{h} = -\sqrt{h_0} = \text{const}$. В качестве динамической переменной удобно взять локальную скорость звука $c = \sqrt{h}$. В покоящейся среде, в которой распространяется импульс, скорость звука имеет постоянное значение $\sqrt{h_0} = c_0$. Другие переменные выражаются через скорость звука формулами

$$u = 2(c - c_0), \quad r_+ = 2c - c_0, \quad v_+ = 3c - 2c_0. \quad (48)$$

Второе уравнение (46) удовлетворяется автоматически в силу постоянства r_- , а первое уравнение принимает форму, аналогичную (30),

$$c_t + (3c - 2c_0)c_x = 0 \quad (49)$$

и имеет решение

$$x - (3c - 2c_0)t = \bar{x}(c), \quad (50)$$

где $\bar{x}(c)$ — состоящая из двух ветвей функция, обратная к начальному распределению локальной скорости звука $c(x, 0)$ в виде локализованного импульса, обращающегося в c_0 при $x > 0$ и $x \rightarrow -\infty$.

Мы предполагаем, что решение (50) опрокидывается в момент времени $t = 0$ с образованием ДУВ, малоамплитудный край которой распространяется сначала по ветви $\bar{x}_1(c)$, а затем, после прохождения точки максимума распределения, по ветви $\bar{x}_2(c)$. Пусть жидкость имеет в некоторой точке локальные значения скорости течения u и глубины h . Тогда для закона дисперсии линейных волн, распространяющихся по жидкости в окрестности этой точки, находим выражение

$$\omega(k) = uk + kc(1 + c^4k^2/3)^{-1/2} = k[u + c\alpha(c, k)], \quad (51)$$

где мы, следуя работе [13], ввели функцию

$$\alpha(c, k) = (1 + c^4k^2/3)^{-1/2}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (52)$$

которая характеризует отклонение закона дисперсии от бездисперсионной формулы $\omega = (u + c)k$. Зависимость волнового числа от локального значения скорости звука c на малоамплитудном крае была найдена в [13] методом работы [12], и мы воспроизведем здесь необходимые результаты с небольшими изменениями. На малоамплитудном крае, граничащем с простой волной, волновое число становится функцией c , $k = k(c)$, так что определяем $\bar{\alpha}(c) = \alpha(c, k(c))$, вводим обратную функцию $c = c(\bar{\alpha})$, и тогда волновое число можно выразить через переменную $\bar{\alpha}$:

$$k(\bar{\alpha}) = \frac{\sqrt{3}}{c^2(\bar{\alpha})} \sqrt{\frac{1}{\bar{\alpha}^2} - 1}. \quad (53)$$

Уравнение (8) превращается в уравнение для $\bar{\alpha}(c)$:

$$\frac{d\bar{\alpha}}{dc} = -\frac{\bar{\alpha}(4 - \bar{\alpha})(1 + \bar{\alpha})}{c(1 + \bar{\alpha} + \bar{\alpha}^2)}, \quad (54)$$

решение которого с начальным условием $\bar{\alpha}(c_0) = 1$ находится в неявном виде [13, 40]:

$$c(\bar{\alpha}) = \frac{c_0}{\bar{\alpha}^{1/4}} \left(\frac{1 + \bar{\alpha}}{2}\right)^{1/5} \left(\frac{4 - \bar{\alpha}}{3}\right)^{21/20}. \quad (55)$$

В результате уравнения (53) и (55) дают зависимость $k(c)$ в параметрической форме.

Малоамплитудный край движется с групповой скоростью, которую мы также выразим через $\bar{\alpha}$:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = 2[c(\bar{\alpha}) - c_0] + \bar{\alpha}^3 c(\bar{\alpha}). \quad (56)$$

Закон движения этого края, записанный в форме

$$\frac{\partial x}{\partial c} - [2(c - c_0) + c\bar{\alpha}^3] \frac{\partial t}{\partial c} = 0, \quad (57)$$

должен быть согласован с примыкающим к этому краю бездисперсионным решением (50), что приводит [40] к уравнению для $t(\bar{\alpha})$

$$\bar{\alpha}(1 - \bar{\alpha}^2)(4 - \bar{\alpha}) \frac{dt}{d\bar{\alpha}} - 3t = \Phi(\bar{\alpha}), \quad (58)$$

где мы ввели обозначение

$$\Phi(\bar{\alpha}) = \left. \frac{d\bar{x}}{dc} \right|_{c=c(\bar{\alpha})} \quad (59)$$

для производной обратной функции начального распределения после подстановки в нее $c = c(\bar{\alpha})$. Решение этого уравнения с начальным условием $t(1) = 0$ (считаем $c_0 = 1$) имеет вид [40]

$$t_1(\bar{\alpha}) = \frac{\bar{\alpha}^{3/4}(4 - \bar{\alpha})^{1/20}}{(1 - \bar{\alpha})^{1/2}(1 + \bar{\alpha})^{3/10}} \times \int_1^{\bar{\alpha}} \frac{\Phi_1(z) dz}{z^{7/4}(1 - z)^{1/2}(4 - z)^{21/20}(1 + z)^{7/10}}. \quad (60)$$

Оно справедливо до момента времени $t_m = t_1(\bar{\alpha}_m)$, где $\bar{\alpha}_m$ отвечает максимальному значению c_m в начальном распределении локальной скорости звука, т. е. находится решением уравнения $c_m = c(\bar{\alpha}_m)$, где в правой части стоит функция (55). При $t > t_m$ аналогичным образом получаем для движения по второй ветви

$$t_2(\bar{\alpha}) = \frac{\bar{\alpha}^{3/4}(4 - \bar{\alpha})^{1/20}}{(1 - \bar{\alpha})^{1/2}(1 + \bar{\alpha})^{3/10}} \times \left\{ \int_1^{\bar{\alpha}_m} \frac{\Phi_1(z) dz}{z^{7/4}(1 - z)^{1/2}(4 - z)^{21/20}(1 + z)^{7/10}} + \int_{\bar{\alpha}_m}^{\bar{\alpha}} \frac{\Phi_2(z) dz}{z^{7/4}(1 - z)^{1/2}(4 - z)^{21/20}(1 + z)^{7/10}} \right\}. \quad (61)$$

Имея выражение (51) для закона дисперсии и зависимость (53) волнового числа от $\bar{\alpha}$, легко вычислить поток числа волн в область ДУВ и получить формулу для числа солитонов при $t \rightarrow \infty$:

$$N = \frac{1}{2\pi} \int \frac{d\bar{\alpha}}{d\bar{\alpha}} k(\bar{\alpha}) c(\bar{\alpha}) (1 - \bar{\alpha}^2) \frac{dt}{d\bar{\alpha}} d\bar{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \int_{\bar{\alpha}_m}^1 \frac{c(\bar{\alpha}) k(\bar{\alpha})}{4 - \bar{\alpha}} [3(t_2 - t_1) + \Phi_2 - \Phi_1] d\bar{\alpha}. \quad (62)$$

Двойной интеграл после подстановки сюда формул (53), (55), (60), (61) сводим к однократному интегрированию по частям, так что после простых преобразований находим окончательный результат:

$$\begin{aligned}
 N &= \frac{1}{2\pi} \int_{\bar{\alpha}_m}^1 \frac{c(\bar{\alpha})k(\bar{\alpha})}{4 - \bar{\alpha}} \frac{1 + \bar{\alpha} + \bar{\alpha}^2}{\bar{\alpha}(1 + \bar{\alpha})} [\Phi_2 - \Phi_1] d\bar{\alpha} = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{c_0}^{c_m} k(c)[\bar{x}'_2(c) - \bar{x}'_1(c)] dc = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 k[c(x, 0)] dx. \quad (63)
 \end{aligned}$$

Мы снова получили формулу (27), и приведенные примеры указывают, что она имеет общий характер. В следующем разделе, следуя методу работ [14, 41], мы дадим более общий ее вывод для рассматриваемого в настоящей работе класса начальных импульсов.

4. ФОРМУЛА ДЛЯ ЧИСЛА СОЛИТОНОВ

На границе с ДУВ риманов инвариант q (см. уравнения (10), (11)), продолжающий риманов инвариант модуляционной системы Уизема, равен нулю, так что, следуя Гуревичу и Мещеркину [10], мы считаем, что это его значение распространяется на всю область бездисперсионного решения. Тогда на эту область распространяется и функция для волнового числа $k = k_1(x, t) = k[u(x, t)]$. Решения уравнения

$$\frac{dx}{dt} = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k=k_1(x,t)} \quad (64)$$

с начальными условиями $x(0) = x_0, x_0 \leq 0$, дают нам семейство траекторий пакетов, испущенных из точек $x = x_0$ с волновыми числами $k[u_0(x_0)]$ несущей волны. Эти решения можно рассматривать как результат распространения модуляционной теории Уизема на область вне дисперсионной ударной волны. Таким образом, мы получаем единое описание для модуляционной теории вдоль всего импульса, включая его гладкую область, описываемую бездисперсионным решением.

Как мы уже знаем из (12), к моменту времени t в область ДУВ вошло число волн N , равное

$$N(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^t \left(\omega - k \frac{d\omega}{dk} \right) dt, \quad (65)$$

где для определенности мы предположили $V_0(u) > 0, \partial^2 \omega / \partial k^2 < 0$, и малоамплитудным является левый край $x_L(t)$ ударной волны, что отвечает выбору знака в подынтегральном выражении (65). Скорость изменения dN/dt этого числа равна, очевидно,

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{2\pi} \left(\omega - k \frac{d\omega}{dk} \right). \quad (66)$$

Теперь мы определяем число волн $N_1(t)$ в области гладкого решения, соответствующее распределению волнового числа $k_1(x, t)$ в момент времени t :

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-l}^{x_L(t)} k_1(x_1, t) dx_1 = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-l}^{x_L(t)} k[u(x_1, t)] dx_1. \quad (67)
 \end{aligned}$$

Вычислим скорость изменения этого числа со временем:

$$\begin{aligned}
 \frac{dN_1}{dt} &= \frac{1}{2\pi} \times \\
 &\times \left\{ \frac{dx_L}{dt} k_1(x_L(t), t) + \int_{-l}^{x_L(t)} \frac{\partial k_1(x_1, t)}{\partial t} dx_1 \right\}. \quad (68)
 \end{aligned}$$

Для производной dx_L/dt мы подставляем $\partial \omega / \partial k_1$ согласно первому уравнению (5). Далее, волновое число $k_1(x, t)$ удовлетворяет закону сохранения числа волн (4), так что в подынтегральном выражении второго члена заменяем $\partial k_1(x_1, t) / \partial t$ на $-\partial \omega(x_1, t) / \partial x_1$ и после интегрирования получаем

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{1}{2\pi} \left(k \frac{\partial \omega}{\partial k} - \omega \right)_{x=x_L(t)}. \quad (69)$$

Это выражение равно выражению (66), взятому с противоположным знаком, т. е. $N_1(t) + N(t) = \text{const}$. Наконец, в пределе $t \rightarrow \infty$ мы имеем $N(t) \rightarrow N$ (N — число солитонов, образовавшихся из импульса) и $N_1 \rightarrow 0$, а при $t \rightarrow 0$ ДУВ отсутствует и $N(0) = 0, N_1(0) = (1/(2\pi)) \int_{-\infty}^{\infty} k[u(x, 0)] dx$. С учетом $u(x, 0) = u_0(x)$ мы приходим к окончательной формуле для числа солитонов

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k[u_0(x)] dx, \quad (70)$$

где функция $k(u)$ является решением уравнения (8) с граничным условием (7). Это подтверждает справедливость формулы (27) для числа солитонов, порождаемых импульсом простой волны, распространяющейся в неподвижную среду.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы показали, что общее выражение (14) для числа солитонов является эффективным средством вычисления этой важной для эксперимента характеристики нелинейных импульсов при их достаточно долгой эволюции, если ограничиться типичным случаем опрокидывания простой волны, распространяющейся в «неподвижную» среду, и использовать для расчета траектории малоамплитудного края ДУВ метод, предложенный в работах [29, 30]. На этом пути воспроизводится известная формула Карпмана для уравнения КдФ и получены ее обобщения для других физически важных уравнений, не являющихся полностью интегрируемыми, к которым неприменим метод обратной задачи рассеяния. Замечательно, что окончательный результат во всех рассмотренных случаях можно представить в форме (27), полученной на основе некоторых предположений в работах [14, 41], что можно рассматривать как дополнительное обоснование этой формулы, уточняющее метод указанных работ. Кроме того, использованное в этих работах предположение, что функцию зависимости волнового числа $k(u)$ от фоновой амплитуды волны на малоамплитудном крае ДУВ можно распространить с этого края на область гладкого бездисперсионного решения, где осцилляции отсутствуют, представляется важным для общей теории дисперсионных ударных волн утверждением. Наконец, сочетание гамильтоновой механики волновых пакетов с бездисперсионной динамикой фона дает общий подход к решению задач о взаимодействии линейных волн с течением среды, что позволяет, например, обобщить результаты недавней работы [21] на произвольный профиль фоновой простой волны.

Благодарности. Выражаем благодарность Л. П. Питаевскому и Г. А. Элю за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов. Метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
2. S. C. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1095 (1967).
3. V. I. Karpman, *Phys. Lett. A* **25**, 708 (1967).
4. В. И. Карпман, *Нелинейные волны в диспергирующей среде*, Наука, Москва (1973).
5. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, *ЖЭТФ* **65**, 590 (1973).
6. G. B. Whitham, *Proc. Roy. Soc. London* **283**, 238 (1965).
7. А. В. Гуревич, А. Л. Крылов, Н. Г. Мазур, Г. А. Эль, *Доклады РАН* **323**, 876 (1992).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
9. А. В. Гуревич, А. Л. Крылов, Н. Г. Мазур, *ЖЭТФ* **95**, 1674 (1989).
10. А. В. Гуревич, А. Р. Мещеркин, *ЖЭТФ* **87**, 1277 (1984).
11. К. Ланцош, *Вариационные принципы механики*, Мир, Москва (1965).
12. G. A. El, *Chaos* **15**, 037103 (2005).
13. G. A. El, R. H. J. Grimshaw, and N. F. Smyth, *Phys. Fluids* **18**, 027104 (2006).
14. G. A. El, A. Gammal, E. G. Khamis, R. A. Kraenkel, and A. M. Kamchatnov, *Phys. Rev. A* **76**, 053813 (2007).
15. J. G. Esler and J. D. Pearce, *J. Fluid Mech.* **667**, 555 (2011).
16. N. K. Lowman and M. A. Hoefer, *J. Fluid Mech.* **718**, 524 (2013).
17. M. A. Hoefer, *J. Nonlinear Sci.* **24**, 525 (2014).
18. T. Congy, A. M. Kamchatnov, and N. Pavloff, *SciPost Phys.* **1**, 006 (2016).
19. M. A. Hoefer, G. A. El, and A. M. Kamchatnov, *SIAM J. Appl. Math.* **77**, 1352 (2017).
20. X. An, T. R. Marchant, and N. F. Smyth, *Proc. Roy. Soc. London A* **474**, 0278 (2018).
21. T. Congy, G. A. El, and M. A. Hoefer, *J. Fluid Mech.* **875**, 1145 (2019).
22. M. D. Maiden, D. V. Anderson, N. A. Franco, G. A. El, and M. A. Hoefer, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 144101 (2018).
23. A. M. Kamchatnov, arXiv:2008.09786.
24. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, *ЖЭТФ* **93**, 871 (1987).
25. А. М. Камчатнов, УФН, DOI:10.3367/UFN.2020.08.038815.
26. P. D. Lax and C. D. Livermore, *Commun. Pure Appl. Math.* **36**, 253 (1984); **36**, 571 (1983); **36**, 809 (1983).

- 27.** Н. Г. Мазур, ТМФ **106**, 44 (1996).
- 28.** E. A. Kuznetsov, A. M. Rubenchik, and V. E. Zakharov, Phys. Rep. **142**, 103 (1986).
- 29.** A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. E **99**, 012203 (2019).
- 30.** A. M. Камчатнов, ТМФ **202**, 415 (2020).
- 31.** E. A. Kuznetsov, Phys. Lett. A **101**, 314 (1984).
- 32.** D. McKenzie, J. Petrol. **25**, 713 (1984).
- 33.** A. C. Fowler, Geophys. Astrophys. Fluid Dynamics **33**, 63 (1985).
- 34.** D. R. Scott and D. J. Stevenson, Geophys. Res. Lett. **11**, 1161 (1984).
- 35.** D. R. Scott and D. J. Stevenson, Nature **319**, 759 (1986).
- 36.** P. Olson and U. Christensen, J. Geophys. Res. **91**, B6, 6367 (1986).
- 37.** F. Serre, La Houille Blanche **8**, 374 (1953).
- 38.** C. H. Su and C. S. Gardner, J. Math. Phys. **10**, 536 (1969).
- 39.** A. E. Green and P. M. Naghdi, J. Fluid Mech. **78**, 237 (1976).
- 40.** S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, Phys. Fluids **31**, 057102 (2019).
- 41.** G. A. El, R. H. J. Grimshaw, and N. F. Smyth, Physica D **237**, 2423 (2008).

О МЕХАНИЗМЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ВАРИАЦИЙ СРЕДНЕЙ ЭНЕРГИИ МЮОНОВ НА БОЛЬШИХ ГЛУБИНАХ

Н. Ю. Агафонова*, А. С. Мальгин

Институт ядерных исследований Российской академии наук
117312, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 августа 2020 г.,
после переработки 16 сентября 2020 г.
Принята к публикации 17 сентября 2020 г.

Рассмотрены источники сезонных температурных вариаций средней энергии потока мюонов, обнаруженные в эксперименте LVD. Показано, что вариации связаны с процессами генерации мюонов в верхних слоях атмосферы и прохождения мюонами слоя грунта большой толщины.

DOI: 10.31857/S0044451021010077

1. ВВЕДЕНИЕ

Сезонные вариации атмосферных мюонов на больших глубинах под землей до сих пор остаются в поле зрения исследователей, главным образом как содержащие информацию, во-первых, о циклических процессах в верхних слоях атмосферы и, во-вторых, о характеристиках и временном поведении фона в низкофоновых подземных экспериментах.

Мы остановимся на втором аспекте исследования вариаций потока мюонов. На больших глубинах причиной сезонных вариаций мюонов является положительный температурный эффект, приводящий к изменению плотности атмосферы и ее высоты в результате нагрева летом и остывания зимой. Амплитуда $\delta I_\mu = 1.5\%$ и фаза сезонных вариаций интенсивности мюонов $\varphi(I_\mu) = 185 \pm 15$ сут на глубине ~ 3600 м в.э. были установлены в экспериментах [1–9]. Помимо этого, в эксперименте [10] была определена амплитуда сезонных вариаций нейтронов $\delta \Phi_n$, образуемых потоком мюонов. Неожиданно величина $\delta \Phi_n$ оказалась примерно в 6 раз выше амплитуды δI_μ . Ранее *a priori* полагалось, что вариации $\delta \Phi_n$ должны быть равны вариациям потока мюонов δI_μ . В работе [11] было показано, что обнаруженный эффект можно объяснить вариациями средней энергии мюонов $\delta \bar{E}_\mu$. Из данных эксперимента [10] следует, что амплитуда вариаций $\delta \bar{E}_\mu$ на

глубине эксперимента LVD должна составлять примерно 10% для того, чтобы совместно с вариациями интенсивности мюонов $\delta I_\mu = 1.5\%$ обеспечить величину амплитуды вариаций потока космогенных нейтронов $\delta \Phi_n = 9.3\%$, измеренную на LVD [10].

В нашей работе рассматриваются процессы, которые создают сезонные вариации средней энергии \bar{E}_μ потока мюонов. В разд. 2 мы приводим общие соотношения, характеризующие связь спектра мюонов на глубине эксперимента LVD со спектром мюонов на уровне моря (s.l.); в разд. 3 мы находим энергетические спектры потока LVD-мюонов и их сезонные вариации под землей и на уровне моря. В разд. 4 обсуждаются процессы генерации мюонов высокой энергии, создающие сезонные вариации потока мюонов; в разд. 5 и Заключение проводится сравнение результатов LVD и Bogexino и оценивается точность определения величины $\delta \bar{E}_\mu$.

2. СВЯЗЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК LVD-МЮОНОВ ПОД ЗЕМЛЕЙ И НА УРОВНЕ МОРЯ

Температурные вариации интенсивности мюонов связаны с процессами их генерации в верхних слоях атмосферы. Последующее прохождение мюонами атмосферы практически не влияет на энергию LVD-мюонов, т.е. мюонов, достигающих глубины LVD ($H^{min} = 3.1$ км в.э.). Мы будем рассматривать данные LVD, так как аномальные вариации космогенных нейтронов были обнаружены в этом эксперименте.

* E-mail: agafonova@inr.ru

Энергопотери мюонов в грунте трансформируют их исходный энергетический спектр (на поверхности, ниже будем полагать, что на уровне моря), но не меняют интенсивности мюонов, обладающих на уровне моря энергией не ниже пороговой E_{μ}^{th} , т.е. достаточной для достижения глубины LVD. Следовательно, механизм вариаций средней энергии мюонов \bar{E}_{μ} под землей должен заключаться в процессах как генерации мюонов в верхних слоях атмосферы, так и, в отличие от вариаций интенсивности, прохождения мюонами слоя грунта большой толщины.

Для установления источников вариаций рассмотрим связь характеристик LVD-мюонов на глубине H^{min} (интенсивности, эффективного диапазона энергий, средней энергии) с характеристиками этих мюонов на поверхности и затем с характеристиками «родительских» пионов и генерации пионов в pA -столкновениях. В анализ будут включены одиночные мюоны, так как они составляют 90 % от полного числа мюонов (10 % входят в мюонные группы), достигающих глубины LVD [12]. Средняя энергия одиночных LVD-мюонов $\bar{E}_{\mu} = 270 \pm 18$ ГэВ была получена в измерениях [13]. Поэтому при анализе будем полагать $\bar{E}_{\mu} = 270$ ГэВ.

Минимальная энергия мюонов на уровне моря $E_{\mu,sl}^{min}$, необходимая для достижения глубины $H^{min} = 3.1$ км в.э., равна $E_{\mu,sl}^{min} = 1.3$ ТэВ [14]. Пороговая энергия $E_{\mu,sl}^{th}$ (50 % вероятности выживания) составляет 1.8 ТэВ. Эту величину можно определить с помощью выражения, связывающего энергию мюона на уровне моря $E_{\mu,sl}$ с его энергией в среднем $E_{\mu,H}^{av}$ на глубине H [15]:

$$E_{\mu,H}^{av} = (E_{\mu,sl} + \epsilon_{\mu})e^{-bH} - \epsilon_{\mu}, \quad (1)$$

отсюда

$$E_{\mu,sl} = (E_{\mu,H}^{av} + \epsilon_{\mu})e^{+bH} - \epsilon_{\mu}. \quad (2)$$

Полагая $E_{\mu,H}^{av} = 0$, для $E_{\mu,sl}^{th}$ получаем

$$E_{\mu,sl}^{th} = (e^{+bH} - 1)\epsilon_{\mu}. \quad (3)$$

В этих выражениях параметр $\epsilon_{\mu} = a/b$ характеризует форму дифференциального спектра мюонов, которая на больших глубинах является квазиплоской:

$$\frac{dN_{\mu}}{dE} \propto \frac{1}{(\epsilon_{\mu} + E_{\mu})^{\gamma_{\mu}}}.$$

Параметр ϵ_{μ} представляет энергию, выше которой начинают доминировать радиационные потери и квазиплоский спектр мюонов приобретает форму спектра на поверхности, $P_{sl}(E_{\mu}) \propto E_{\mu}^{-\gamma_{\mu}}$. Величины

a и b входят в формулу для энергопотерь мюонов в слое вещества H :

$$-dE_{\mu}/dH = a + bE_{\mu}. \quad (4)$$

Здесь a — полные ионизационные потери, b — суммарные потери для трех радиационных процессов. Отношение $a/b = \epsilon_{\mu}$ представляет критическую энергию мюона, при которой ионизационные потери равны радиационным; при $E_{\mu} \ll \epsilon_{\mu}$ доминируют ионизационные потери, при $E_{\mu} \gg \epsilon_{\mu}$ — радиационные. Величины a и b слабо зависят от E_{μ} : изменение E_{μ} от 1 ТэВ до 10 ТэВ приводит к увеличению a в стандартном грунте от 268 до 293 ГэВ·(км в.э.)⁻¹, b увеличивается от 0.392 до 0.435 (км в.э.)⁻¹ (см. табл. 24.2 в [15]).

Подставляя в (3) $\epsilon_{\mu} = a/b = 667$ ГэВ ($a = 280$ ГэВ/км в.э., $b = 0.42$ /км в.э.) для глубины $H = 3.1$ км в.э. находим $E_{\mu,sl}^{th} = 1785$ ГэВ ≈ 1.8 ТэВ. При выбранных значениях величин a и b средняя энергия одиночных LVD-мюонов $\bar{E}_{\mu}^{cal} = 277$ ГэВ, вычисляемая по формуле [16]

$$\bar{E}_{\mu}^{cal} = \epsilon_{\mu}[1 - \exp(-bH)](\gamma_{\mu} - 2)^{-1}, \quad (5)$$

с высокой точностью согласуется с установленной экспериментально $\bar{E}_{\mu} = 270$ ГэВ. Параметр $\gamma_{\mu} = 3.75$ является модулем показателя дифференциального спектра мюонов на уровне моря: $P_{sl}(E_{\mu}) \propto E_{\mu}^{-\gamma_{\mu}}$.

Здесь можно отметить интересное свойство величины \bar{E}_{μ} — ее «насыщение». На больших глубинах, отвечающих условию $H \gg 1/b$, в формуле (5) для \bar{E}_{μ}^{cal} множитель $[1 - \exp(-bH)] \approx 1$, что при $\epsilon_{\mu} = \text{const}$ приводит к выражению предельной средней энергии потока атмосферных одиночных мюонов в стандартном грунте:

$$\bar{E}_{\mu}^{lim} = \epsilon_{\mu}(\gamma_{\mu} - 2)^{-1}. \quad (6)$$

К энергии \bar{E}_{μ}^{lim} средняя энергия мюонов \bar{E}_{μ} асимптотически приближается на глубинах $\gtrsim 5$ км в.э. При значениях параметров $\epsilon_{\mu} = 693$ ГэВ, $\gamma_{\mu} = 3.77$, использованных в работе [16], величина предельной энергии $\bar{E}_{\mu}^{lim} = 392$ ГэВ; при $\epsilon_{\mu} = 618$ ГэВ, $\gamma_{\mu} = 3.7$ величина $\bar{E}_{\mu}^{lim} = 364$ ГэВ [17]; при $\epsilon_{\mu} = 495$ ГэВ, $\gamma_{\mu} = 3.7$ величина $\bar{E}_{\mu}^{lim} = 291$ ГэВ [18]. Как видим, величина \bar{E}_{μ}^{lim} рассчитывается с большой погрешностью. Учитывая результаты различных измерений, можно полагать $\bar{E}_{\mu}^{lim} = 400$ ГэВ.

3. СЕЗОННЫЕ ВАРИАЦИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА LVD-МЮОНОВ ПОД ЗЕМЛЕЙ И НА УРОВНЕ МОРЯ

Дифференциальный спектр мюонов на глубинах $H > 1/b \approx 2.5$ км в.э. является квазиплоским до энергии $\sim \epsilon_\mu$, выше которой спектр становится более крутым, приобретая форму спектра $P_{sl}(E_\mu) \propto E_\mu^{-\gamma_\mu}$ с показателем $\gamma_\mu = 3.75$. Поэтому спектр LVD-мюонов можно представить в виде ступеньки, обрывающейся при энергии ${}^0E_{\mu}^{max} = 2\bar{E}_\mu = 2 \cdot 270$ ГэВ = 540 ГэВ (приближение ступенчатого спектра), ${}^0E_{\mu}^{max}$ — среднегодовая энергия «ступеньки». В таком случае все LVD-мюоны на глубине 3.1 км в.э. с интенсивностью ${}^0I_{\mu,H}$ заключены в энергетическом диапазоне 0–540 ГэВ.

Полагая в выражении (2) $\bar{E}_{\mu,H}^{av} = {}^0E_{\mu}^{max} = 540$ ГэВ, определяем соответствующую энергию на уровне моря: ${}^0E_{\mu,sl}^{max} = 3771$ ГэВ ≈ 3.8 ТэВ. Следовательно, среднегодовой спектр мюонов на глубине LVD эффективно формируется LVD-мюонами, на уровне моря имеющими энергию в диапазоне $E_{\mu,sl}^{th} \div {}^0E_{\mu,sl}^{max} \rightarrow 1.8 \div 3.8$ ТэВ, с интенсивностью ${}^0I_{\mu,sl} = {}^0I_{\mu,H}$.

Гипотеза о связи сезонных вариаций числа космических нейтронов со средней энергией мюонов, объясняющая аномальные вариации числа нейтронов, приводит к заключению, что энергия мюонов \bar{E}_μ на глубине LVD в летний период ${}^s\bar{E}_{\mu,H}$ возрастает на 10%. Необходимо отметить, что величина \bar{E}_μ является естественным энергетическим параметром, характеризующим поток как мюонов, так и образуемых ими нейтронов, несмотря на то, что основное количество нейтронов производится мюонами высокоэнергетического участка спектра.

При ступенчатом спектре мюонов возрастание ${}^s\bar{E}_{\mu,H}$ на 10% должно увеличивать максимальную энергию спектра также на 10%: ${}^sE_{\mu,H}^{max} = 1.1 \cdot {}^0E_{\mu,H}^{max} = 594$ ГэВ. По формуле (2) находим, что данной величине соответствует энергия на уровне моря ${}^sE_{\mu,sl}^{max} = 3970$ ГэВ. Таким образом, увеличение $E_{\mu,sl}^{max}$ в 1.1 раза (от ${}^0E_{\mu,sl}^{max} = 3771$ ГэВ до ${}^sE_{\mu,sl}^{max} = 3970$ ГэВ) связано с возрастанием энергии ${}^0E_{\mu,sl}^{max}$ на 5.3%. В то же время увеличению $\bar{E}_{\mu,H} = 270$ ГэВ в 1.1 раза соответствует увеличение энергии $E_{\mu,sl}$ всего в 1.036 раза (от 2780 ГэВ до 2880 ГэВ). Полученные соотношения объясняются свойством формулы (2), связывающей энергии $E_{\mu,H}^{av}$ и $E_{\mu,sl}$ и отражающей воздействие на форму спектра мюонов под землей квазипостоянных ионизационных потерь и радиационных энергопотерь. Одна-

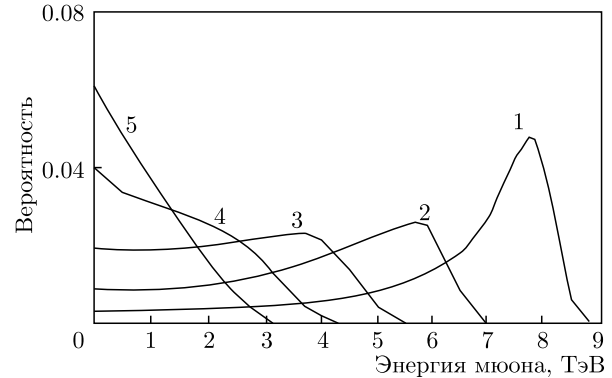


Рис. 1. Распределение вероятности для мюона с энергией 10 ТэВ на уровне моря иметь энергию от E до $E+0.1$ ТэВ на глубине 5, 4, 3, 2, 1 км в.э. (цифры у кривых)

ко флуктуирующий характер радиационных потерь, с одной стороны, значительно увеличивает вероятность достижения мюонами больших глубин и, с другой, — нелинейно «растягивает» спектр мюонов на глубине. Под действием этих потерь моноэнергетический поток мюонов с энергией на уровне моря, например 10 ТэВ, на разных глубинах трансформируется в спектры различной формы (рис. 1, [19]).

Величины ${}^0E_{\mu,sl}^{max}$ и ${}^sE_{\mu,sl}^{max}$ в действительности определяются участками спектра мюонов $P_{sl}(E_\mu)$, энергия которых превышает эти величины. Их значения, найденные выше в рамках приближения ступенчатого спектра LVD-мюонов, в силу быстро убывающего спектра $P_{sl}(E_\mu) \propto E_\mu^{-3.75}$ близки реальным.

4. СЕЗОННЫЕ ВАРИАЦИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНА ЭФФЕКТИВНОЙ ГЕНЕРАЦИИ LVD-МЮОНОВ

Средняя энергия мюона связана с энергией «родительского» пиона равенством $E_\pi = (m_\pi/m_\mu)E_\mu$, где m_π и m_μ — массы пиона и мюона. Используя это соотношение и пренебрегая энергопотерями (ионизационными) мюонов в воздухе (≈ 2 ГэВ), можно перейти от энергии $E_{\mu,sl}^{th}$ к пороговой энергии пиона: $E_\pi^{th} \approx (m_\pi/m_\mu)E_\mu^{th} = 2.4$ ТэВ. Полагая, что только примерно 5% пионов с энергией 2.4 ТэВ распадаются (ниже будет показано, что величина $k_\pi^{dec} = 0.05$ связана с доминированием одиночных мюонов в полном потоке на глубине LVD), а остальные пионы генерируют вторичные адроны, получаем, что для образования одиночного мюона с энергией $E_\mu^{th} = 1.8$ ТэВ пионами первого поколения необ-

ходима энергия приблизительно 48 ТэВ, затрачиваемая на рождение заряженных пионов. Добавляя к этому энергию нейтральных пионов (примерно 1/2 от энергии π^\pm), получаем энергию взаимодействия $E_{in}^{th} \approx 72$ ТэВ с образованием пионов. Средняя величина коэффициента неупругости K_{inl} в глубоко-неупругом pA -взаимодействии приблизительно равна 0.5 (примерно 1/2 энергии E_p уносится лидирующим нуклоном). С учетом этого получаем величину пороговой энергии протона $E_p^{th} \approx 144$ ТэВ, необходимой для образования мюона, достигающего глубины LVD. Быстро убывающий спектр первичных протонов $F(E_p) \propto E_p^{-2.75}$ и быстрый рост плотности атмосферы с уменьшением высоты (что приводит к увеличению вероятности πA -неупругих столкновений для пионов второго поколения) обуславливают определяющую роль пионов первого поколения в формировании потока мюонов на глубине LVD. Вклад пионов второго и последующих поколений в генерацию мюонов высокой энергии не превышает 20% [20].

Повторив такие же вычисления для среднегодовых ${}^0E_{\pi}^{max}$ и летних ${}^sE_{\pi}^{max}$ значений, находим величины ${}^0E_{\pi}^{max} = 4.98$ ТэВ, ${}^sE_{\pi}^{max} = 5.24$ ТэВ. Следовательно, участки эффективной генерации LVD-мюонов в спектрах пионов ограничиваются энергиями $2.4 \leq {}^0E_{\pi} \leq 4.98$ ТэВ, $2.4 \leq {}^sE_{\pi} \leq 5.24$ ТэВ.

Используя зависимость множественности пионов $\nu_{\pi} \approx 3 \ln E_{in}$ от энергии взаимодействия E_{in} и полагая величину $k_{\pi}^{dec} = 0.05$ независимой от E_{in} , можно оценить число мюонов N_{μ} , образующихся при пороговой $E_{in}^{th} = 72$ ТэВ и максимальной $E_{in}^{max} = 152$ ТэВ энергиях взаимодействия и достигающих глубины LVD: $\nu_{\pi}^{\pm} = 2/3(3 \ln E_{in})$, $N_{\mu} = k_{\pi}^{dec} \nu_{\pi} = 0.1 \ln E_{in}$ [ГэВ]; отсюда $N_{\mu}^{th} = 1.12$, $N_{\mu}^{max} = 1.19$. Таким образом, в диапазоне энергий $72 \text{ ТэВ} \leq E_{in} \leq 152$ ТэВ одному pA -взаимодействию соответствует один LVD-мюон.

Для эффективной генерации LVD-мюонов в распадах пионов энергия E_{π} не должна превышать критическую энергию E_{π}^{cr} , соответствующую плотности атмосферы ρ_{at} на высоте генерации пионов первого поколения. Величина E_{π}^{cr} определяется условием равенства $\lambda_{\pi}^{dec} = \lambda_{\pi}^{in}$, где $\lambda_{\pi}^{dec} = \gamma_f \tau_0 c_0 = (E_{\pi}/m_{\pi} c_0^2) \tau_0 c_0$ — длина распадного пробега релятивистского пиона, $\tau_0 = 2.6 \cdot 10^{-8}$ с — время жизни пиона в покое, γ_f — гамма-фактор пиона, $c_0 = 3 \cdot 10^{10}$ см/с, $\lambda_{\pi}^{in} = (\sigma_{\pi}^{in} n_A \rho_{at})^{-1}$ — длина пробега пиона для неупругого πA -взаимодействия, n_A — число ядер в грамме воздуха, σ_{π}^{in} — сечение неупругого πA -взаимодействия. Для реляти-

вистского пиона в воздухе $(\sigma_{\pi}^{in} n_A)^{-1} = 120$ г/см² и $\lambda_{\pi}^{in} = 120 \rho_{at}^{-1}$. Следовательно, E_{π}^{cr} [ГэВ] = $120 \rho_{at}^{-1} (m_{\pi} c^2 / \tau_0 c_0) = 2.15 \cdot 10^{-2} \rho_{at}^{-1}$. Если приравнять пороговую энергию критической, $E_{\pi}^{th} = E_{\pi}^{cr} = 2.4$ ТэВ, то можно оценить плотность слоя воздуха генерации пионов $\rho_{at} \approx 9 \cdot 10^{-6}$ г/см³, которая соответствует плотности атмосферы на высоте приблизительно 35 км.

Таким образом, подавляющее число LVD-мюонов образуется в распадах пионов первого поколения генерации с энергией в интервале от E_{π}^{th} до E_{π}^{cr} . Величина ${}^0E_{\pi}^{cr}$ соответствует среднегодовой высоте слоя атмосферы, в котором эффективно генерируются пионы с энергией $E_{\pi} \geq E_{\pi}^{th}$. Летнее повышение температуры атмосферы вызывает увеличение высоты и расширение слоя генерации пионов с энергиями $E_{\pi} \geq E_{\pi}^{th}$, сопровождающееся уменьшением плотности ρ_{at} . Уменьшение плотности приграничного слоя атмосферы на высоте около 40 км влечет за собой расширение энергетического диапазона распадающихся пионов в результате увеличения энергии E_{π}^{cr} от ${}^0E_{\pi}^{max} = 4.98$ ТэВ до летнего значения ${}^sE_{\pi}^{cr} = {}^sE_{\pi}^{max} = 5.24$ ТэВ и ужесточение спектра образующихся мюонов.

Эффект летнего ужесточения спектра LVD-мюонов на уровне моря (${}^s\gamma_{\mu,sl} < {}^0\gamma_{\mu,sl} = 3.75$), обуславливающего увеличение энергии $\bar{E}_{\mu,sl}$ и интенсивности I_{μ} , имеет ту же природу, что и ужесточение энергетического спектра и возрастание интенсивности мюонов высокой энергии ($\gtrsim 1$ ТэВ) при увеличении угла наблюдения θ . Это увеличение длины свободного пробега пионов в слое атмосферы низкой плотности, приводящее к увеличению вероятности распада пионов высокой энергии. Например, результаты измерений [21] показывают, что в области энергий $2 \cdot 10^2 \text{ ГэВ} < E_{\mu} < 3 \cdot 10^3 \text{ ГэВ}$ дифференциальный спектр мюонов на уровне моря, усредненный по интервалу углов $55^\circ < \theta < 90^\circ$, описывается степенным законом с показателем $\gamma_{\mu} = 3.1$ (погрешность 7%).

Можно оценить летнее отклонение величины ${}^s\gamma_{\mu,sl}$ от среднегодовой ${}^0\gamma_{\mu,sl} = 3.75$, используя формулу (5) и амплитуду вариаций 10% энергии \bar{E}_{μ} на глубине LVD. Полагая числитель в выражении (5) пренебрежимо слабо меняющимся от сезона к сезону, получаем

$$\frac{s\bar{E}_{\mu,LVD}}{{}^0\bar{E}_{\mu,LVD}} = \frac{{}^0\gamma_{\mu,sl} - 2}{{}^s\gamma_{\mu,sl} - 2} = 1.1. \quad (7)$$

Отсюда при ${}^0\gamma_{\mu,sl} = 3.75$ следует ${}^s\gamma_{\mu,sl} = 3.59$, т. е. летом показатель $\gamma_{\mu,sl}$ уменьшается на 4.3%, что находится в пределах погрешности измерений величин

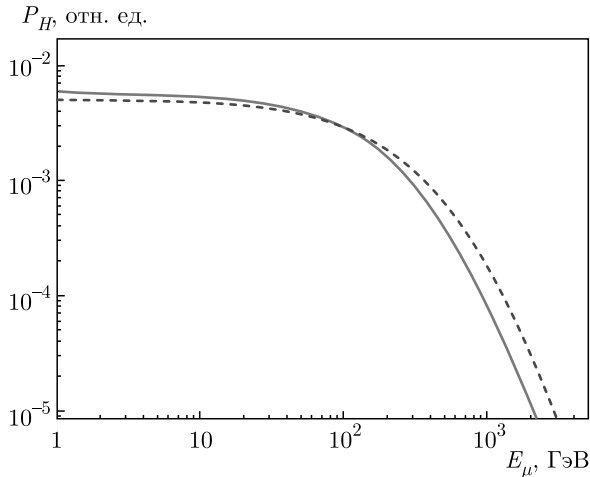


Рис. 2. Сезонная трансформация формы спектра мюонов, качественное представление. Красная кривая — среднегодовой спектр ${}^0P_H(E_\mu)$, синяя пунктирная — летний спектр ${}^sP_H(E_\mu)$

ны $\gamma_{\mu,sl}$ и что затрудняет определение вариаций показателя $\gamma_{\mu,sl}$ в эксперименте.

Летнее изменение формы спектра мюонов под землей (рис. 2) сходно с трансформацией спектра при увеличении глубины. Отличие заключается в том, что переход к большим глубинам приводит к росту \bar{E}_μ и уменьшению интенсивности I_μ , в то время как летнее изменение формы спектра $P_H(E_\mu)$ на глубине H сопровождается увеличением как энергии \bar{E}_μ , так и интенсивности I_μ .

Очевидно, что в силу постоянства среднегодовых характеристик потока мюонов их изменение в летней период соответствует изменению зимой с обратным знаком.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Вариации космогенных нейтронов являются инструментом, позволившим обнаружить сезонные вариации средней энергии мюонов на большой глубине, где $\bar{E}_\mu \geq 200$ ГэВ. Этот метод основывается на зависимости выхода нейтронов от энергии мюонов $Y_n \propto \bar{E}_\mu^{0.78}$, которая подтверждена в большом числе экспериментов и поддерживается феноменологически [22].

Необходимыми условиями для определения величины вариаций $\delta\bar{E}_\mu$ являются достаточная скорость счета мюонов, стабильная долговременная (не меньше нескольких лет) работа установки и высокая эффективность регистрации нейтронов. Установить вариации $\delta\bar{E}_\mu$ под землей можно прямым измерени-

ем энергии мюонов методом TRD [13] или параметра [23]. Но применение этих методов для определения вариаций $\delta\bar{E}_\mu$ малоэффективно, так как они не могут обеспечить необходимых для этого методических условий.

Указание на сезонные вариации величины \bar{E}_μ было получено не только на LVD, но и в долговременном эксперименте Bogexino [24], находящемся вблизи LVD. Амплитуда вариаций скорости образования космогенных нейтронов и соответствующая ей амплитуда вариаций $\delta\bar{E}_\mu$ в эксперименте Bogexino составили 2.6% и 9.2 ГэВ, т.е. в 3 раза меньше величин, полученных на LVD (7.7% и 28 ГэВ). Наиболее вероятно, что отличие результатов LVD и Bogexino связано с особенностями методов определения величины N_n и обработки данных. Возможно, влияние на результат Bogexino мог оказать отбор для анализа мюонных событий со множественностью нейтронов не выше 10. Несмотря на небольшое количество событий с множественностью ≥ 10 в полном числе мюонов, эти события наиболее сильно влияют на вариации спектра мюонов под землей, так как ввиду зависимости $N_n \propto \bar{E}_\mu^{0.78}$ связаны с высокоэнергетической областью мюонного спектра под землей.

Эксперименты по установлению сезонных вариаций энергии атмосферных мюонов прямыми измерениями энергии мюонов на уровне моря, как и подземные эксперименты, должны отвечать требованию долговременной работы со стабильными параметрами и, кроме этого, достаточным энергетическим разрешением. Имеющиеся на сегодня результаты измерений энергетического спектра мюонов на уровне моря в области энергий $E_\mu > 1$ ТэВ (рис. 4 в [25]) показывают, что проведенные эксперименты не отвечают этому требованию — разброс данных различных экспериментов значительно превышает погрешности измерений, указанные на графике. Кроме того, поиск сезонных вариаций средней энергии потока мюонов на уровне моря с энергиями выше 1 ТэВ не входил в программы проводившихся исследований энергетического спектра мюонов.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Более высокая амплитуда сезонных вариаций космогенных нейтронов по сравнению с амплитудой вариаций интенсивности мюонов была обнаружена в двух подземных экспериментах. Зависимость $N_n \propto \bar{E}_\mu^{0.78}$ связывает вариации нейтронов с вариациями средней энергии мюонов. Отсюда следует,

что температурный эффект, влияющий на генерацию мюонов, изменяет не только их интенсивность, но и среднюю энергию. Сезонные вариации средней энергии атмосферных мюонов являются новым эффектом в мюонной физике.

Приближение ступенчатого спектра LVD-мюонов под землей позволяет при исследовании механизма вариаций перейти от вариаций средней энергии мюонов под землей к вариациям энергии «ступеньки» E_{μ}^{max} .

Рассмотрение вариаций энергетического диапазона мюонов на пути от слоя генерации в атмосфере до глубины 3.1 км в.э. в рамках приближения ступенчатого спектра LVD-мюонов под землей приводит к заключению, что вариации $\delta\bar{E}_{\mu}$ определяются вариациями критической энергии для пионов E_{π}^{cr} . В результате этого диапазон генерации мюонов $E_{\mu,sl}^{th} - E_{\mu,sl}^{max}$ варьируется с амплитудой 5.3% с последующим увеличением вариаций до $\delta E_{\mu}^{max} = \delta\bar{E}_{\mu} = 10\%$ в результате прохождения мюонами слоя грунта 3.1 км в.э.

Сезонные вариации генерации высокоэнергетических мюонов на границе атмосферы проявляются также в вариациях жесткости их спектра на уровне моря и вариации формы квазиступенчатого спектра мюонов под землей.

Точность определения вариаций генерации мюонов, приводящих к вариациям $\delta\bar{E}_{\mu} = 10\%$, зависит от соответствия приближения ступенчатого спектра мюонов характеристикам реального спектра под землей, а также от погрешностей расчета энергетических диапазонов по формулам (1)–(3), (5) и входящих в них величин. Учитывая неопределенность этих величин (на примере вычисления значения энергии \bar{E}_{μ}^{lim}), можно допустить, что точность определения вариаций $\delta\bar{E}_{\mu}$ не хуже 20%.

Моделирование вариаций δI_{μ} и $\delta\bar{E}_{\mu}$ в полном объеме (с включением атмосферных явлений, трансформации спектра мюонов высоких энергий в грунте, процессов генерации нейтронов) дает пока противоречивые результаты, не согласующиеся между собой и не поддерживаемые экспериментальными данными [24, 26].

Сезонные изменения потока нейтронов, ввиду их заметной величины, необходимо учитывать при измерении выхода нейтронов. Температура атмосферы, помимо сезонных модуляций, в течение года испытывает нерегулярные изменения. В результате число нейтронов, образуемых мюонами под землей, значительно отклоняется от среднегодовой величины и гармонической функции с

нарушением постоянства амплитуды модуляций и фазы колебаний. Это следует учитывать при анализе фона в низкофоновых подземных экспериментах.

Финансирование. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-02-00064-а) и программы международного сотрудничества между INFN Италии и Министерством науки и высшего образования РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Ambrosio et al. (MACRO Collaboration), *Astropart. Phys.* **7**, 109 (1997).
2. M. Selvi (for the LVD collaboration), in *Proc. of the 31st ICRC* (2009), p. 1043.
3. C. Vigorito (for the LVD Collaboration), in *Proc. of the 35th ICRC* (2017), p. 291.
4. G. Bellini et al. (Borexino Collaboration), *JCAP* **1205**, 015 (2012).
5. M. Agostini et al. (GERDA Collaboration), *Astropart. Phys.* **84**, 29 (2016).
6. P. Desiati (for the IceCube Collaboration), in *Proc. of the 32nd ICRC* (2011), p. 78.
7. P. Adamson et al. (MINOS Collaboration), *Phys. Rev. D* **81**, 012001 (2010).
8. T. Abrahão et al. (Double Chooz Collaboration), *JCAP* **1702**, 017 (2017).
9. F.P. An et al., *JCAP* **1801**, 001 (2018).
10. N. Yu. Agafonova (on behalf of the LVD Collaboration), arXiv:1701.04620; *XXV ECRS 2016 Proc. – eConf C16-09-04.3*.
11. А. С. Мальгин, *ЖЭТФ* **45**, 247 (2015).
12. Н. Ю. Агафонова, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, ИЯИ РАН, Москва (2015).
13. M. Ambrosio et al. (MACRO Collaboration), *Astropart. Phys.* **19**, 313 (2003).
14. M. Ambrosio et al. (MACRO Collaboration), *Phys. Rev. D* **60**, 032001 (1999).
15. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **33**, 1232 (2006).
16. D. E. Groom, N. V. Mokhov, and S. I. Striganov, *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **78**, 183 (2001).

17. P. Lipari and T. Stanev, *Phys. Rev. D* **44**, 3543 (1991).
18. O. M. Horn, PhD Thesis, Institut für Kernphysik, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe (2008), ISSN 0947-8620.
19. В. А. Кудрявцев, Дисс. . . . канд. физ.-матем. наук, ИЯИ РАН, Москва (1998).
20. Э. В. Бугаев, Ю. Д. Котов, И. Л. Розенталь, *Космические мюоны и нейтрино*, Атомиздат, Москва (1970).
21. В. В. Борог, В. Г. Кирилов-Угрюмов, А. А. Петрухин и др., *ЯФ* **3**, 783 (1966).
22. A. Malgin, *Phys. Rev. C* **96**, 014605 (2017).
23. C. Castagnoli et al., *Astropart. Phys.* **6**, 187 (1997).
24. M. Agostini et al., *JCAP* **1902**, 046 (2019).
25. E. V. Bugaev, A. Misaki, V. A. Naumov, T. S. Sinogovskaya, S. I. Sinogovsky, and N. Takahashi, *Phys. Rev. D* **58**, 05401 (1998); arXiv:hep-ph/9803488v3.
26. C. Zhang and D.-M. Mei, *Eur. Phys. J. C* **79**, 825 (2019).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В НАНОСИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ТЕМПЕРАТУРАМИ КЮРИ

М. А. Кузнецов ^{a,b*}, А. Б. Дровосеков ^{c**}, А. А. Фраерман ^{a***}

^a Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

^b Нижегородский государственный университет им. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

^c Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 мая 2020 г.,
после переработки 31 июля 2020 г.
Принята к публикации 9 сентября 2020 г.

В рамках теории среднего поля рассчитан магнитокалорический эффект в наносистемах на основе обменно-связанных ферромагнетиков с различными температурами Кюри. Для плоскостойкой структуры Fe/Gd/Fe продемонстрировано хорошее согласие результатов теории среднего поля и теории Ландау, справедливой вблизи критической температуры фазового перехода. Показана принципиальная возможность достижения высокой эффективности магнитного охлаждения в этой системе и доказана справедливость соотношения Максвелла, что делает возможным экспериментальную проверку сделанных предсказаний. Развитая для плоскостойких структур теория обобщена на гранулированную среду.

DOI: 10.31857/S0044451021010089

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитокалорический эффект заключается в обратимом изменении температуры магнитного материала при его адиабатическом намагничивании или размагничивании. Эффект был открыт более ста лет назад [1] и по-прежнему вызывает значительный интерес [2]. Этот интерес связан с возможностью создания «магнитного» холодильника, в котором роль рабочего тела будет выполнять магнитный материал с сильным магнитокалорическим эффектом. Несмотря на успехи в создании таких материалов (см., например, работу [3]), проблема магнитного охлаждения при комнатной температуре остается, на наш взгляд, нерешенной. Принципиальная сложность для однородных магнитокалоричес-

ких материалов заключается в необходимости приложения очень большого (1–10 Тл) магнитного поля для достижения заметного (1 К) изменения температуры. Таким образом, рекордные на сегодняшний день значения эффективности магнитного охлаждения составляют 10 К/Тл [2].

В работе [4] предложен новый подход к проблеме снижения напряженности магнитного поля и повышения эффективности магнитного охлаждения. В качестве магнитного материала предлагается использовать многослойные структуры, состоящие из пленок с различными температурами Кюри. Тогда «сильный» ферромагнетик, имеющий большую температуру Кюри Θ за счет эффекта магнитной близости [5] будет подмагничивать «слабый» ферромагнетик ($T_C < \Theta$) даже в том случае, если последний находится в парамагнитной фазе, т.е. $T_C < T$. Более того, для многослойной структуры, в которой «слабый» ферромагнетик зажат между слоями «сильного» ферромагнетика, размагничивание (намагничивание) прослойки зависит от взаимной ориентации магнитных моментов в берегах, которой можно управлять посредством приложения маг-

* E-mail: kuznetsov@ipmras.ru

** E-mail: drovosekov@kapitza.ras.ru

*** E-mail: andr@ipm.sci-nnov.ru

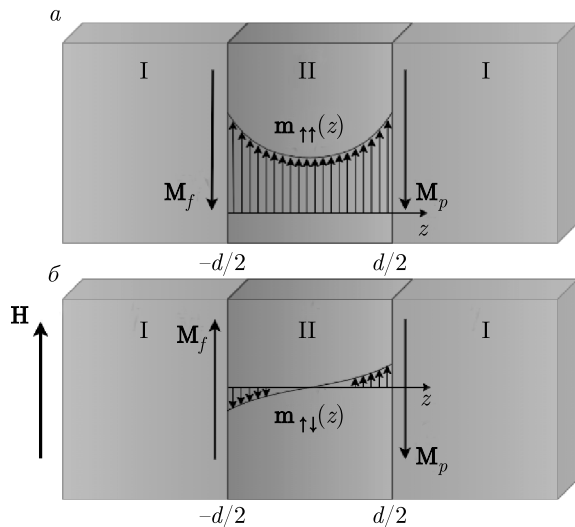


Рис. 1. Схематическое изображение трехслойной структуры с АФМ-обменом на границах раздела для случая параллельной (а) и антипараллельной (б) ориентаций намагниченностей боковых слоев: I — ферромагнитный слой; II — парамагнитный слой; M_f — намагниченность свободного ферромагнитного слоя; M_p — намагниченность «закрепленного» ферромагнитного слоя, $m_{\uparrow\uparrow}(z)$ и $m_{\uparrow\downarrow}(z)$ — намагниченности прослойки

нитного поля (рис. 1). При параллельной ориентации намагниченностей берегов прослойка имеет большую (в среднем по толщине) намагниченность, чем при антипараллельной ориентации. Величина поля, необходимого для переключения взаимной ориентации намагниченностей, порядка 10^{-2} Тл (см. ниже рис. 2б). Эффективность такого способа изменения намагниченности (энтропии) «слабого» ферромагнетика возрастает с уменьшением его толщины и может достигать гигантских значений. Эффект носит «обменный» характер, и увеличение эффективности охлаждения достигается за счет реконфигурации обменных полей на границах пленок. В работах [6–9] проведены эксперименты, подтвердившие возможность усиления магнитокалорического эффекта в многослойных структурах «сильный»/«слабый» ферромагнетик. Однако величина эффекта в десятки раз ниже значений, предсказываемых теорией.

Центральным моментом развиваемого нами подхода является предположение об обменном взаимодействии на границе ферромагнетиков. Величина этого взаимодействия заранее не известна, и требуется аккуратная обработка экспериментальных данных, которая позволит эту обменную константу определить. Для проведения сравнения нужно

иметь количественную теорию магнитокалорического эффекта в таких неоднородных системах, построению которой и посвящена настоящая работа. В качестве отправной точки нами использовано приближение среднего поля, хорошо зарекомендовавшее себя при анализе статических и динамических магнитных свойств многослойных структур Fe/Gd [10]. В разд. 2 этой статьи в рамках приближения среднего поля приведены расчеты распределений намагниченности, энтропии и величины магнитокалорического эффекта в трехслойных структурах Fe/Gd/Fe. В разд. 3.1 для расчета термодинамических характеристик системы используется теория фазовых переходов Ландау, справедливая при температурах, близких к T_C , для которых магнитокалорический эффект максимален. Проводится сравнение с результатами разд. 2. Кроме того, получены условия применимости приближенных аналитических решений для параллельной и антипараллельной ориентаций магнитных моментов ферромагнитных берегов. В разд. 3.2 полученные приближенные решения использованы для оценки магнитокалорического эффекта в системе ферромагнитных гранул, помещенных в парамагнитную матрицу. В Заключении обсуждаются возможности усиления магнитокалорического эффекта в ферромагнитных наносистемах.

2. ПЛОСКОСЛОИСТАЯ СТРУКТУРА В МОДЕЛИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Идея применения метода среднего поля для расчета магнитных характеристик слоистых структур была предложена Кэмли в работах [11–13]. Исследования были прежде всего направлены на выяснение особенностей магнетизма систем на основе переходных (ПМ) и редкоземельных (РЗМ) ФМ-металлов, таких как Fe/Gd. Характерной особенностью этих систем является возможность сильнонеоднородного распределения намагниченности внутри слоев РЗМ, что обусловлено конкуренцией нескольких факторов: сильным АФМ-обменом на границе раздела ПМ/РЗМ, относительно низкой температурой Кюри и малой обменной жесткостью слоев РЗМ. Предложенный подход позволял на качественном уровне описать основные особенности поведения слоистых структур ПМ/РЗМ и даже достичь определенного количественного согласия с экспериментом [14–17]. Ниже мы используем метод среднего поля для оценки величины магнитокалорического эффекта в многослойных структурах на примере системы Fe/Gd,

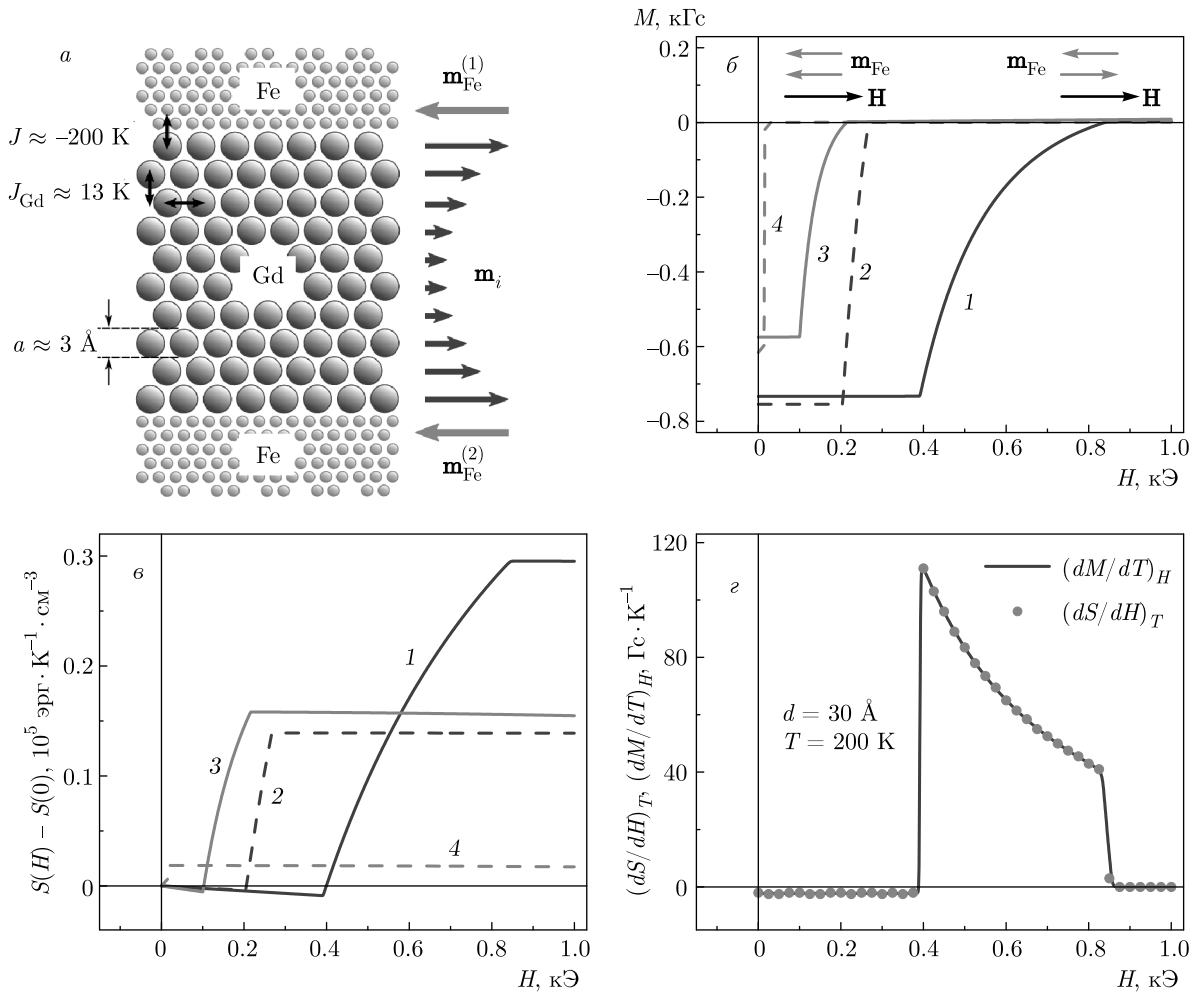


Рис. 2. (В цвете онлайн) *a*) Схематичное изображение модельной слоистой структуры Fe/Gd/Fe и распределения намагниченности по атомным слоям внутри прослойки Gd. Показаны кривые намагничивания (*б*) и полевые зависимости энтропии (*в*), полученные в модели среднего поля для структур Fe(35 Å)/Gd(*d*)/Fe(35 Å) с толщиной прослойки $d = 30$ Å (кривые 1 и 2) и $d = 50$ Å (кривые 3 и 4). Сплошные кривые соответствуют температуре $T = T_C = 200$ К, штриховые — $T = T_C = 210$ К. На графике (*г*) продемонстрировано выполнение в рассматриваемой задаче соотношения Максвелла $(dS/dH)_T = (dM/dT)_H$

магнитные свойства которой достаточно хорошо изучены [18,19].

Рассмотрим трехслойную структуру Fe(d_{Fe})/Gd(d)/Fe(d_{Fe}) с толщинами слоев d, d_{Fe} порядка нескольких нанометров при температурах T в окрестности температуры Кюри T_C гадолиния. Заметим, что в тонких слоях Gd величина T_C может быть заметно подавлена по сравнению с объемным значением 293 К. Так, в работах [10, 20, 21] для $d \approx 50$ Å получено значение $T_C \approx 200$ К. В рассматриваемых условиях слои Fe можно считать однородно намагниченными до насыщения. При этом большой АФМ-обмен на границах Fe-Gd

(обменная константа $J \approx -200$ К в расчете на атом Gd [10, 20]) приводит к сильной магнитной поляризации приграничных атомов Gd. В то же время существенно более слабое ФМ-взаимодействие атомов Gd внутри прослойки ($J_{Gd} \approx 13$ К [20]) приводит к быстрому (на масштабах около 20 Å) разрушению магнитного порядка при удалении от границы Fe-Gd из-за сильных тепловых флуктуаций вблизи T_C . Таким образом, внутри прослойки Gd формируется сильнонеоднородный профиль распределения намагниченности с максимумами вблизи границ Fe-Gd и минимумом в глубине слоя. Экспериментально наличие такого распределения

намагниченности в слоях Gd было доказано при исследовании сверхрешеток Fe/Gd методом рентгеновского резонансного магнитного рассеяния (см., например, работы [15, 20]).

Для теоретического моделирования этого распределения по методу среднего поля мы рассматриваем разбиение прослойки Gd на «атомные» подслои толщиной $a = 3 \text{ \AA}$ и с намагниченностью \mathbf{m}_i , где i — номер слоя (рис. 2а). Выбранное значение толщины элементарного слоя $a = 3 \text{ \AA}$ приближенно соответствует расстоянию между атомными плоскостями (0001) ГПУ-кристалла Gd. Эффективное поле \mathbf{H}_i , действующее на атомы i -го слоя, складывается из внешнего поля \mathbf{H} и обменных «молекулярных» полей со стороны близлежащих атомов того же слоя ($\gamma_{ii}\mathbf{m}_i$) и соседних слоев ($\gamma_{ii\pm 1}\mathbf{m}_{i\pm 1}$):

$$\mathbf{H}_i = \mathbf{H} + \gamma_{ii}\mathbf{m}_i + \gamma_{ii-1}\mathbf{m}_{i-1} + \gamma_{ii+1}\mathbf{m}_{i+1}, \quad (1)$$

где γ_{ij} — константы среднего поля. Заметим, что в однородном случае $\mathbf{m}_i = \mathbf{m}$, и мы получаем обычное выражение для молекулярного поля Вейсса $H + \gamma m$, где $\gamma = \gamma_{ii} + \gamma_{ii-1} + \gamma_{ii+1}$.

Для характеристики распределения обменных взаимодействий между атомом Gd заданного слоя с атомами того же слоя и соседних слоев удобно ввести параметр $\zeta = \gamma_{ii\pm 1}/\gamma$, который можно рассматривать как отношение числа ближайших атомов в соседних слоях к их полному количеству. Так, например, для ГПУ-монокристалла гадолиния $\zeta = 1/4$ [15], в случае же аморфной структуры этот параметр может несколько отличаться [10]. Принимая во внимание такое определение ζ , выражение для эффективного поля внутри Gd можно переписать в виде

$$\mathbf{H}_i = \mathbf{H} + \gamma\mathbf{m}_i + \gamma\zeta a^2 \frac{\mathbf{m}_{i+1} - 2\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_{i-1}}{a^2}. \quad (2)$$

Из такой записи видно, что первые два слагаемых представляют собой случай однородной намагниченности, а третье слагаемое определяет «градиентный» вклад в эффективное поле. Это слагаемое в континуальном пределе пропорционально второй производной намагниченности $d^2\mathbf{m}/dz^2$ в направлении нормали к пленке z и, таким образом, дает связь констант среднего поля с обменной жесткостью материала $D = \gamma\zeta a^2$.

Необходимо также определить эффективные поля, действующие на границах раздела Fe–Gd. Поверхностная плотность энергии обменного АФМ-взаимодействия на интерфейсе Fe–Gd записывается в виде

$$E_{ex} = J \frac{\mathbf{m}_{Fe} \cdot \mathbf{m}_{Gd}}{m_{Fe}m_s}, \quad (3)$$

где J — обменная константа, \mathbf{m}_{Fe} и \mathbf{m}_{Gd} — векторы намагниченности Fe и приграничного слоя Gd, m_{Fe} и m_s — намагниченности насыщения Fe и Gd. Отсюда получаем эффективное поле, действующее со стороны слоя Fe на приграничный слой Gd,

$$\mathbf{H}_{Gd} = -\frac{J\mathbf{m}_{Fe}}{m_{Fe}m_s a},$$

и эффективное поле, действующее со стороны Gd на слой Fe,

$$\mathbf{H}_{Fe} = -\frac{J\mathbf{m}_{Gd}}{m_{Fe}m_s d_{Fe}}.$$

Равновесное направление намагниченности в каждом из атомных слоев Gd определяется условием

$$\mathbf{m}_i \parallel \mathbf{H}_i, \quad (4)$$

а абсолютная величина —

$$m_i = m_s B_j \left(\frac{\mu H_i}{k_B T} \right), \quad (5)$$

где B_j — функция Бриллюэна для полного момента j , μ — магнитный момент на атом Gd, k_B — константа Больцмана. Направление намагниченности слоев Fe может задаваться фиксированным (в случае «закрепленного» слоя), либо определяться из условия, аналогичного (4): $\mathbf{m}_{Fe} \parallel (\mathbf{H} + \mathbf{H}_{Fe})$ (в случае «свободного» слоя). Результирующее равновесное распределение величины и направления намагниченности по слоям структуры рассчитывается численно при заданных H и T .

Полученное распределение намагниченности позволяет вычислить полный магнитный момент \mathbf{M} и энтропию S единицы объема системы. Полная намагниченность системы, очевидно, определяется формулой

$$\mathbf{M} = \frac{d_{Fe} \left(\mathbf{m}_{Fe}^{(1)} + \mathbf{m}_{Fe}^{(2)} \right) + a \sum_i \mathbf{m}_i}{d + 2d_{Fe}} \quad (6)$$

(отсюда, в частности, можно определить компоненту намагниченности M вдоль магнитного поля). Для вычисления энтропии S учтем, что слои Fe не вносят вклада в S , а энтропия единицы объема i -го слоя Gd в модели среднего поля имеет вид [22, 23]

$$s_i = \frac{m_s}{\mu} k_B \left[\ln \left(\frac{\text{sh} \left(\frac{2j+1}{2j} \frac{\mu H_i}{k_B T} \right)}{\text{sh} \left(\frac{1}{2j} \frac{\mu H_i}{k_B T} \right)} \right) - \frac{m_i}{m_s} \frac{\mu H_i}{k_B T} \right]. \quad (7)$$

Таким образом, средняя энтропия слоя Gd на единицу объема равна

$$s = \frac{a}{d} \sum_i s_i, \quad (8)$$

а полная энтропия всей системы Fe/Gd/Fe на единицу объема —

$$S = \frac{a}{d + 2d_{\text{Fe}}} \sum_i s_i. \quad (9)$$

На рис. 2 приведены примеры расчета кривых намагничивания и полевых зависимостей энтропии для системы Fe/Gd/Fe в случае, когда намагниченность первого слоя Fe фиксирована в направлении, противоположном полю, а второй слой Fe свободен. В этой ситуации, благодаря взаимодействию через прослойку Gd, в нулевом поле оказывается выгодной параллельная ориентация магнитных моментов слоев Fe. Однако при приложении определенного магнитного поля происходит переориентация свободного слоя Fe, что приводит к антипараллельной ориентации слоев Fe. При этом существенно меняется форма профиля намагниченности внутри прослойки Gd (см. ниже рис. 3). Для расчета использованы параметры, полученные в работе [10] для сверхрешетки [Fe(35 Å)/Gd(50 Å)]₁₂: $m_{\text{Fe}} = 1270$ Гс, $m_s = 1150$ Гс, $J = 40$ эрг/см², $j = 7/2$, $\mu = 7\mu_B$, $\gamma = 870$, $\zeta = 0.33$, $T_C = 200$ К; для обоих слоев железа $d_{\text{Fe}} = 35$ Å. Расчеты проведены для случаев $d = 30$ Å и $d = 50$ Å при $T = T_C = 200$ К и $T = 210$ К.

Температурные зависимости изменения энтропии единицы объема прослойки при переключении взаимной ориентации намагниченностей слоев Fe приведены в разд. 3.1 (см. ниже рис. 5). Интересно отметить, что в рассматриваемой задаче выполняется соотношение Максвелла $(dS/dH)_T = (dM/dT)_H$, на котором основаны многочисленные эксперименты по измерению магнитокалорического потенциала (см. рис. 2г). Этот факт не является тривиальным. Действительно, выполнение соотношения Максвелла для однородных материалов очевидно. В неоднородных системах, к которым принадлежит рассмотренная трехслойная структура, намагниченность является функцией координат и поэтому не может непосредственно входить в соотношение Максвелла. Однако, как нами было показано, это соотношение выполняется для намагниченности (6) и энтропии (9), относящихся ко всей системе.

3. ТЕОРИЯ ЛАНДАУ ДЛЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ВТОРОГО РОДА

Ранее мы применяли теорию Ландау для фазовых переходов к плоскостной структуре

Co₉₀Fe₁₀/Ni_xCu_{100-x}/Co₄₀Fe₄₀B₂₀ ($x \approx 70$ ат.%) [9]. В настоящей работе мы проделаем расчеты для структуры Fe/Gd/Fe, а также получим значительно более простые приближенные решения с целью их сравнения с точными и использования такого подхода для описания гранулированной среды (см. разд. 3.2).

3.1. Плоскостная структура

В рамках теории Ландау для фазовых переходов свободную энергию F , приходящуюся на единицу площади, можно записать в виде функционала [9]

$$F[m] = \int_{-d/2}^{d/2} \left(\frac{l_0^2}{2} \left(\frac{dm}{dz} \right)^2 + \frac{\alpha\tau}{2} m^2 + \frac{\beta}{4m_s^2} m^4 \right) dz + \frac{l_J}{2} (m - \sigma m_s)^2 \Big|_{z=-\frac{d}{2}} + \frac{l_J}{2} (m - m_s)^2 \Big|_{z=\frac{d}{2}}. \quad (10)$$

Здесь α , β , l_0 и l_J — феноменологические постоянные, $\tau = (T - T_C)/T_C$, $\sigma = 1$ при параллельной ориентации намагниченностей слоев Fe ($\uparrow\uparrow$), $\sigma = -1$ — при антипараллельной ($\uparrow\downarrow$). Последние два слагаемых в формуле (10) описывают обменное взаимодействие прослойки с ферромагнитными берегами (см. рис. 1). В силу малости внешнего магнитного поля мы пренебрегаем членом $-\mathbf{H} \cdot \mathbf{m}$ под знаком интеграла в формуле (10). Уравнение, отвечающее экстремуму функционала (10), и граничные условия имеют вид

$$\frac{d^2 m}{dz^2} - \frac{1}{l^2} m - \frac{\beta}{l_0^2 m_s^2} m^3 = 0, \quad (11)$$

$$\frac{dm}{dz} \Big|_{z=\frac{d}{2}} = - \frac{l_J}{l_0^2} (m - m_s) \Big|_{z=\frac{d}{2}}, \quad (12)$$

$$\frac{dm}{dz} \Big|_{z=-\frac{d}{2}} = \frac{l_J}{l_0^2} (m - \sigma m_s) \Big|_{z=-\frac{d}{2}}, \quad (13)$$

где введено обозначение $l = l_0/\sqrt{\alpha\tau}$. Уравнению (11) удовлетворяют эллиптические функции Якоби dn и sn . Эти функции хорошо изучены [24]. Будем искать решения в виде

$$m_{\uparrow\uparrow} = a_{\uparrow\uparrow} m_s \text{dn} \left(c_{\uparrow\uparrow} \left(\frac{z + z_0^{\uparrow\uparrow}}{l_0} \right), k_{\uparrow\uparrow} \right), \quad (14)$$

$$m_{\uparrow\downarrow} = \frac{\sqrt{a_{\uparrow\downarrow}} m_s}{c_{\uparrow\downarrow}} \text{sn} \left(c_{\uparrow\downarrow} \left(\frac{z + z_0^{\uparrow\downarrow}}{l_0} \right), k_{\uparrow\downarrow} \right). \quad (15)$$

Здесь $a_{\uparrow(\uparrow\downarrow)}$, $c_{\uparrow(\uparrow\downarrow)}$ и $z_0^{\uparrow(\uparrow\downarrow)}$ — постоянные, k_{\uparrow} и k_{\downarrow} — эллиптические модули. Поскольку

$$a_{\uparrow\uparrow}m_s = m_{\uparrow\uparrow}|_{z=0}, \quad a_{\uparrow\downarrow}m_s^2 = l_0^2(dm/dz|_{z=0})^2,$$

константы a_{\uparrow} и a_{\downarrow} — действительные числа (если $z_0^{\uparrow(\uparrow\downarrow)} = 0$). После подстановки $m_{\uparrow\uparrow}$ и $m_{\uparrow\downarrow}$ в уравнение (11) мы можем выразить все неизвестные постоянные через $a_{\uparrow(\uparrow\downarrow)}$. В итоге получаем

$$m_{\uparrow\uparrow} = a_{\uparrow\uparrow}m_s \operatorname{dn} \left(i a_{\uparrow\uparrow} \sqrt{\frac{\beta}{2}} \frac{z}{l_0}, \sqrt{2 \left(1 + \frac{\alpha\tau}{\beta a_{\uparrow\uparrow}^2} \right)} \right), \quad (16)$$

$$m_{\uparrow\downarrow} = -i \left(\frac{2a_{\uparrow\downarrow}}{\beta} \right)^{1/4} \eta_{\pm} m_s \times \operatorname{sn} \left(i \left(\frac{\beta a_{\uparrow\downarrow}}{2} \right)^{1/4} \frac{z}{\eta_{\pm} l_0}, \sqrt{2\tau_0 \eta_{\pm}^2 - 1} \right), \quad (17)$$

где i — мнимая единица и введены обозначения

$$\eta_{\pm} = (\tau_0 \pm (\tau_0^2 - 1)^{1/2})^{1/2}, \quad \tau_0 = \alpha\tau / (2\beta a_{\uparrow\downarrow})^{1/2}.$$

Здесь было учтено, что константы $z_0^{\uparrow(\uparrow\downarrow)}$ могут быть выбраны равными нулю. Постоянные a_{\uparrow} и a_{\downarrow} определяются численно из граничных условий. Чтобы установить, какую из констант η_{\pm} следует выбрать, рассмотрим предельный случай бесконечно толстой прослойки ($a_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0$). В этом пределе, используя определение функции $y = \operatorname{sn}(u, k)$ [25],

$$u = \int_0^y \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}} \quad (18)$$

и формулы (15) и (17), для η_+ получим

$$m = -\sqrt{\frac{2\alpha\tau}{\beta}} \frac{m_s}{\operatorname{sh} \left(\frac{\tilde{z} + \tilde{z}_0}{l} \right)}, \quad (19)$$

где $\tilde{z} = z + d/2$, а постоянная $\tilde{z}_0 = z_0^{\uparrow\downarrow} - d/2 - l \operatorname{cth}^{-1}(1)$ должна быть конечным положительным числом, определяемым из граничных условий. Формула (19) соответствует намагниченности прослойки, индуцированной только одним ферромагнитным слоем, находящимся при $\tilde{z} < 0$. Таким образом, намагниченность (17) с η_+ дает правильное предельное выражение. Для дальнейших расчетов мы будем пользоваться формулой (17) с η_+ . Заметим, что от намагниченности (16) можно так же прийти к пределу (19), но, конечно, с обратным знаком.

Получим теперь более простые, но приближенные решения уравнения (11). В случае параллельной ориентации намагниченностей боковых слоев представим намагниченность прослойки $m_{\uparrow\uparrow}$ в виде

$$m_{\uparrow\uparrow}(z) = m_0 + \xi(z), \quad \xi(0) = 0, \quad \xi \ll m_0.$$

Здесь m_0 — постоянная, $\xi(z)$ — функция координаты z . В линейном приближении по ξ уравнение (11) примет вид

$$\frac{d^2\xi}{dz^2} - \kappa^2(\xi + \xi_0) = 0, \quad (20)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{1}{l_0^2} \left(\alpha\tau + \frac{3\beta m_0^2}{m_s^2} \right), \quad \xi_0 = \frac{m_0(\alpha\tau m_s^2 + \beta m_0^2)}{\alpha\tau m_s^2 + 3\beta m_0^2}.$$

Решением этого уравнения является функция

$$\xi = \xi_0 (\operatorname{ch} \kappa z - 1). \quad (21)$$

Граничные условия (12), (13) позволяют численно определить m_0 . Если намагниченности ферромагнитных берегов антипараллельны, то, считая $\beta m_{\uparrow\downarrow}^2 / \alpha\tau m_s^2 \ll 1$, можно пренебречь нелинейным слагаемым в уравнении (11). С учетом граничных условий получим

$$m_{\uparrow\downarrow} = \frac{ll_j m_s}{l_0^2 \operatorname{ch} \frac{d}{2l} + ll_j \operatorname{sh} \frac{d}{2l}} \operatorname{sh} \frac{z}{l}. \quad (22)$$

Приближенное решение (22) можно также получить из формулы (17), формально устремляя β к нулю. Для этого выразим $\operatorname{sn}(u, k)$ через $\operatorname{dn}(u, k)$ согласно формуле $\operatorname{dn}^2(u, k) = 1 - k^2 \operatorname{sn}^2(u, k)$. Далее, используя определение функции $y = \operatorname{dn}(u, k)$ [25],

$$u = \int_1^y \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(x^2-1+k^2)}}, \quad (23)$$

придем к формуле (22). При этом $z_0^{\uparrow\downarrow} = 0$. Отметим еще, что приближенное и точное решения (21) и (16) имеют одинаковые разложения в степенные ряды (по крайней мере, до слагаемых второго порядка включительно).

Феноменологические постоянные α и β были получены путем их выражения через параметры теории среднего поля. Для отдельной пленки Gd справедлива формула (5), где вместо m_i следует взять однородную намагниченность m . Раскладывая $B_j(x)$ в ряд при $x \ll 1$, можно привести формулу (5) к уравнению $\alpha\tau m + \beta m^3 / m_s = 0$, соответствующему в теории Ландау уравнению, которому

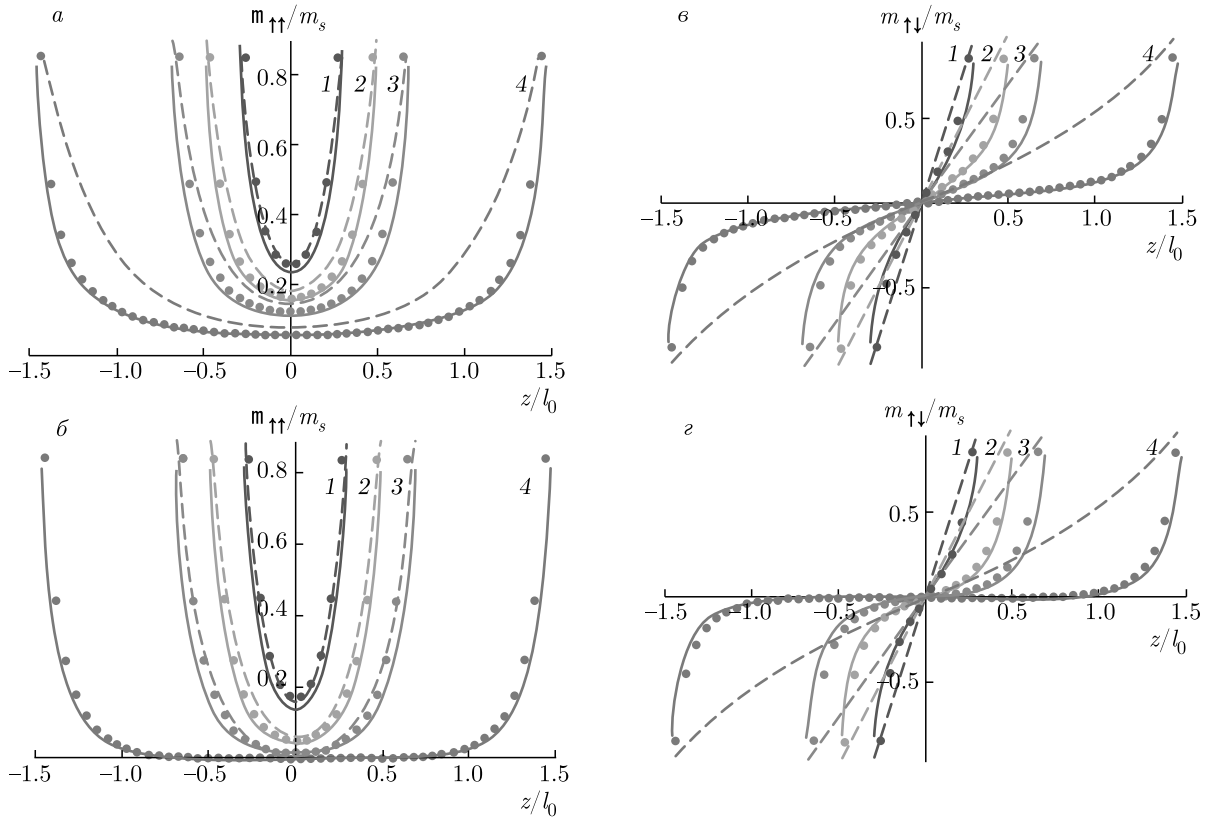


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости $m_{\uparrow\uparrow}(z)$ при $T = T_C$ (а), $T - T_C = 10$ К (б) и $m_{\uparrow\downarrow}(z)$ при $T = T_C$ (в), $T - T_C = 10$ К (г) для $d = 3$ нм (кривые 1), 5 нм (2), 7 нм (3), 15 нм (4) в структуре Fe/Gd/Fe. Сплошными линиями изображены точные решения (16) и (17), штриховыми — приближенные решения (21) и (22), точками — расчеты по теории среднего поля

удовлетворяет намагниченность отдельной пленки магнетика в отсутствие внешнего поля. Тогда для постоянных α и β получаются следующие формулы:

$$\alpha = \gamma = \frac{T_C}{c_C} \approx 870, \quad (24)$$

$$\beta = \frac{3}{10} \gamma \left(1 + \left(\frac{j}{j+1} \right)^2 \right) \approx 420, \quad (25)$$

где c_C — постоянная Кюри. Постоянную l_0 можно оценить как $l_0 = (\gamma\zeta)^{1/2} a \approx 5.1$ нм. Постоянную l_J , характеризующую взаимодействие прослойки Gd со слоями Fe, мы оцениваем как $l_J \sim J/m_s m_{Fe} \approx 280$ нм.

На рис. 3 представлены зависимости $m_{\uparrow\uparrow}(z)$ и $m_{\uparrow\downarrow}(z)$ для структуры Fe/Gd/Fe при различных толщинах прослойки и температурах. Как и следовало ожидать, между теориями существует достаточно хорошее согласие. Расхождения, однако, увеличиваются по мере возрастания намагниченности прослойки, поскольку начинает сказываться отсутствие отброшенных слагаемых более вы-

соких порядков в свободной энергии (10). Расчеты также показывают, что приближенные решения (21), (22) для многослойной структуры Fe/Gd/Fe дают довольно большую ошибку. Действительно, на рис. 3в видно, что зависимости $m_{\uparrow\downarrow}(z)$ существенно нелинейны, в то время как приближенное решение (22) при $T = T_C$ линейно по z . Увеличение корреляционной длины l_0 приводит к лучшим результатам. Так, например, для многослойной структуры $Co_{90}Fe_{10}/Ni_xCu_{100-x}/Co_{40}Fe_{40}B_{20}$ ($\alpha = 1300$, $\beta = 750$, $l_0 = 25$ нм, $l_J = 30$ нм, $m_s = 180$ эрг · Гс⁻¹ · см⁻³, $T_C = 330$ К) [9] приближенные формулы правильно описывают распределение намагниченности (рис. 4).

Перейдем к вычислению энтропии в пересчете на единицу объема прослойки, $s = -(\partial F/\partial T)/d$. Безотносительно ориентации намагниченностей ферромагнитных берегов, справедлива формула

$$s = -\frac{\alpha}{2T_C} \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} m^2 dz = -\frac{\overline{\alpha m^2}}{2T_C}, \quad (26)$$

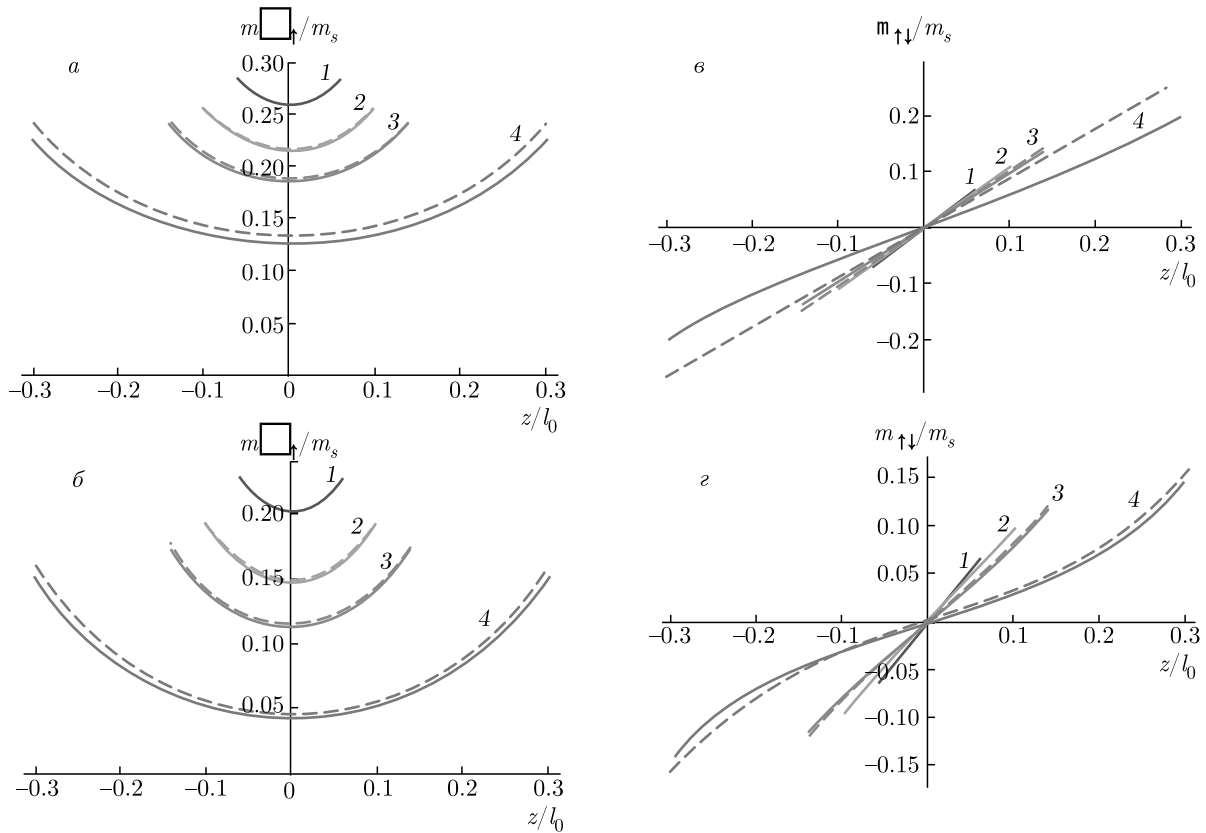


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости $m_{\uparrow}(z)$ при $T = T_C$ (а), $T - T_C = 10$ К (б) и $m_{\downarrow}(z)$ при $T = T_C$ (в), $T - T_C = 10$ К (г) для $d = 3$ нм (кривые 1), 5 нм (2), 7 нм (3), 15 нм (4) в структуре $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}/\text{Ni}_x\text{Cu}_{100-x}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Сплошными линиями изображены точные решения (16) и (17), штриховыми — приближенные решения (21) и (22)

которую можно получить путем дифференцирования свободной энергии (10) с использованием формул (11)–(13). Здесь $\overline{m^2}$ — средний квадрат намагниченности прослойки. Заметим, что формула (26) также может быть получена из связи энтропии s , внутренней U и свободной F энергий: $F = U - Ts$. Дальнейшие вычисления энтропии для случаев параллельной и антипараллельной ориентаций намагниченностей ферромагнитных берегов приводят к следующим результатам:

$$s_{\uparrow\uparrow} = -\frac{\alpha l_0 a_{\uparrow\uparrow}^2 m_s^2}{T_C c_{\uparrow\uparrow} d} \text{E} \left(\text{am} \left(\frac{c_{\uparrow\uparrow} d}{2l_0}, k_{\uparrow\uparrow} \right), k_{\uparrow\uparrow} \right), \quad (27)$$

$$s_{\uparrow\downarrow} = -\frac{\alpha a_{\uparrow\downarrow} m_s^2}{2T_C c_{\uparrow\downarrow}^2 k_{\uparrow\downarrow}^2} \times \left(1 - \frac{2l_0}{c_{\uparrow\downarrow} d} \text{E} \left(\text{am} \left(\frac{c_{\uparrow\downarrow} d}{2l_0}, k_{\uparrow\downarrow} \right), k_{\uparrow\downarrow} \right) \right), \quad (28)$$

где $\text{E}(u, k)$ и $\text{am}(u, k)$ — соответственно эллиптический интеграл второго рода и амплитуда эллиптического интеграла первого рода. В пределе большого

обмена ($l_J \rightarrow \infty$) на границах прослойки из выражений (27) и (28) при $T \sim T_C$ получаем

$$s_{\uparrow\uparrow} \approx -\frac{\alpha m_s^2}{2T_C}, \quad s_{\uparrow\downarrow} \approx 0. \quad (29)$$

Полученные формулы характеризуют максимально возможный магнитокалорический потенциал для данного материала прослойки — Gd:

$$\Delta s_{max} = \alpha m_s^2 / 2T_C \approx 3 \cdot 10^6 \text{ эрг} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}.$$

Заметим, что оценки Δs_{max} могут быть в значительной степени неточными, поскольку излагаемая теория плохо применима при больших величинах намагниченности m . На рис. 5 сплошными линиями изображены зависимости магнитокалорического потенциала $\Delta s(T) = s_{\uparrow\downarrow}(T) - s_{\uparrow\uparrow}(T)$ при различных толщинах прослойки, рассчитанные на основе формул (27) и (28) для Fe/Gd/Fe. Точками изображены соответствующие расчеты в рамках теории среднего поля на основе формулы (7). Можно видеть, что теории хорошо согласуются между собой.

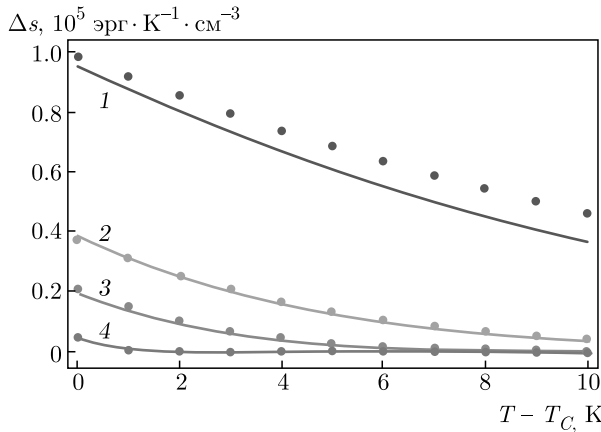


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости $\Delta s(T)$ для $d = 3$ нм (кривые 1), 5 нм (2), 7 нм (3), 15 нм (4). Сплошными линиями изображены расчеты на основе теории Ландау, точками — на основе теории среднего поля. Приведенные зависимости соответствуют изменению магнитного поля, при котором осуществляется переключение взаимной ориентации намагниченностей ферромагнитных слоев ($H \in (0, H_0)$, $H_0 \approx 100$ Э)

Зная величину магнитокалорического потенциала, можно оценить адиабатическое изменение температуры ΔT всей структуры при смене взаимной ориентации намагниченностей боковых слоев с параллельной до антипараллельной (см., например, работу [26]):

$$\Delta T = T_f - T = -\frac{Td}{(d + 2d_{\text{Fe}})c} \Delta s. \quad (30)$$

Здесь T_f — конечная температура, c — теплоемкость в пересчете на единицу объема системы, которая, вообще говоря, включает в себя вклады от решеточной и магнитной подсистем. Покажем, что вкладом магнитной подсистемы можно пренебречь, так что согласно закону Дюлонга–Пти $c \approx 1.2 \cdot 10^7$ эрг · К⁻¹ · см⁻³. Используя формулы (27) и (28), найдем магнитные вклады в теплоемкость при постоянном поле:

$$c_{\uparrow\uparrow(\uparrow\downarrow)} = T \left(\frac{\partial s_{\uparrow\uparrow(\uparrow\downarrow)}}{\partial T} \right)_H. \quad (31)$$

На рис. 6 изображены зависимости $c_{\uparrow\uparrow(\uparrow\downarrow)}(T)$, полученные численно для Fe/Gd/Fe. Можно видеть, что даже при $T = T_C$ магнитные вклады в теплоемкость $c_{\uparrow\uparrow(\uparrow\downarrow)}$ почти на порядок меньше вклада решеточной подсистемы. Приведем теперь оценки адиабатического изменения температуры для Fe/Gd/Fe (рис. 7). Мы не будем здесь уделять внимания тому факту, что в непосредственной окрестности точки перехода прослойка может перейти в ФМ-фазу

при изменении температуры вследствие приложения внешнего поля.

Таким образом, нам удалось получить профили намагниченности прослойки и магнитокалорические потенциалы в рамках двух подходов. Оба подхода хорошо согласуются между собой, несмотря на то, что при таких больших значениях намагниченности прослойки теорию Ландау, казалось бы, не следует использовать. Приведенные оценки изменения температуры системы при адиабатическом размагничивании в окрестности температуры Кюри для рассматриваемых толщин прослойки составляют 0.1–0.3 К. Это на порядок меньше $\Delta T \approx 3$ К объемного Gd при его полном размагничивании, начиная с $H = 1$ Тл [26]. Вместе с тем в случае структуры Fe/Gd/Fe переключение взаимной ориентации намагниченностей слоев Fe требует приложения магнитного поля величиной всего в несколько сотен эрстед (см. рис. 2), что дает выигрыш на 1–2 порядка по приложенному полю по сравнению с объемным Gd. Таким образом, эффективность магнитного охлаждения в рассматриваемой системе может существенно повыситься.

3.2. Гранулированная среда

Перейдем теперь к изучению магнитокалорических свойств среды, представляющей собой аморфную матрицу из «слабого» ферромагнетика, содержащую гранулы из «сильного» ферромагнетика (рис. 8). Последние представляют собой монокристаллы с одноосной магнитной анизотропией, характеризующейся постоянной K . Роль гранул состоит в намагничивании матрицы посредством обменного взаимодействия подобно тому, как ферромагнитные берега в плоскостной структуре намагничивают прослойку при параллельной ориентации их намагниченностей. Магнитным состоянием системы также можно управлять внешним полем.

Будем считать, что все N гранул отличаются друг от друга только направлениями осей легкого намагничивания и имеют шарообразную форму с объемом $V_g = (4/3)\pi R^3$. Система помещена в однородное магнитное поле \mathbf{H} , направленное вдоль оси z . Тогда свободную энергию можно записать в виде

$$F[\mathbf{m}] = E_A + E_H + F_0[\mathbf{m}], \quad (32)$$

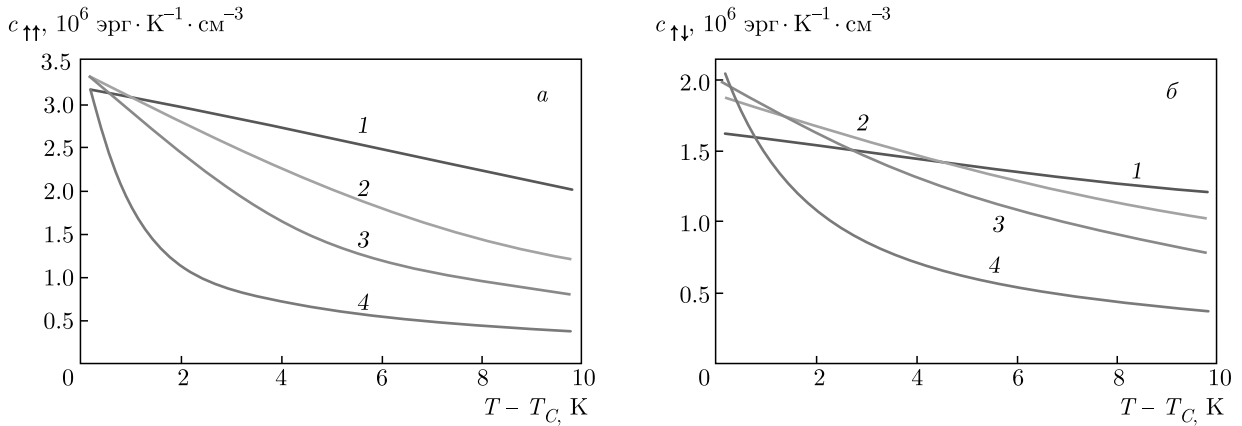


Рис. 6. Зависимости $c_{\uparrow\uparrow(\downarrow)}(T)$ при $d = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3), 15 нм (4)

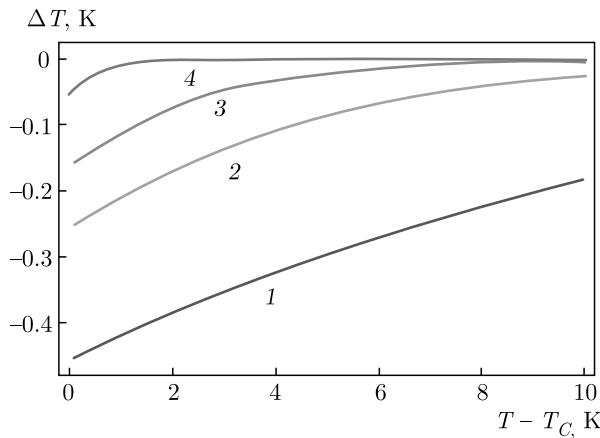


Рис. 7. Зависимости $\Delta T(T)$ для $d = 3$ нм (кривые 1), 5 нм (2), 7 нм (3), 15 нм (4). Приведенные зависимости соответствуют изменению магнитного поля, при котором осуществляется переключение взаимной ориентации намагниченностей ферромагнитных берегов ($H \in (0, H_0)$, $H_0 \approx 100$ Э)

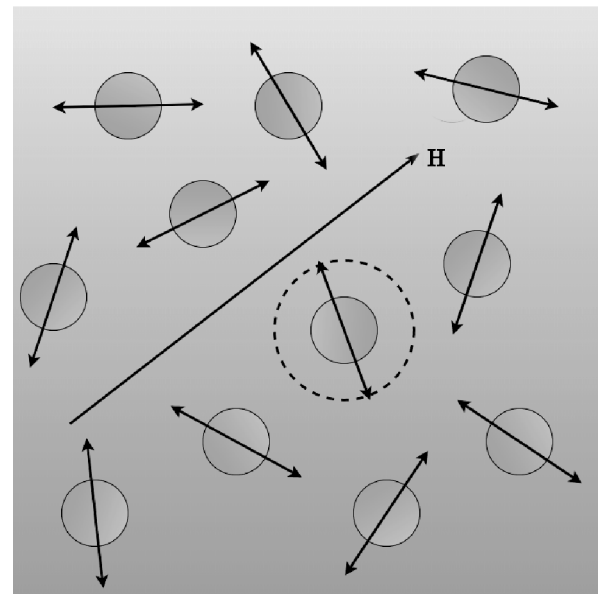


Рис. 8. Схематическое изображение гранул из «сильного» ферромагнетика, находящихся в матрице из «слабого» ферромагнетика. Двусторонними стрелками изображены оси легкого намагничивания. Штриховой окружностью изображена ячейка радиусом λ . Поле \mathbf{H} направлено вдоль оси z

$$F_0[\mathbf{m}] = \int \left(\frac{l_0^2}{2} \sum_{a=1}^3 \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x_a} \right)^2 + \frac{\alpha\tau}{2} \mathbf{m}^2 + \frac{\beta}{4m_s^2} \mathbf{m}^4 \right) dV_m + \frac{l_J}{2} \sum_{i=1}^N \int (\mathbf{m} - \mathbf{m}_{si})^2 d\sigma_i, \quad (33)$$

$$E_A = -\frac{KV_g}{M^2} \sum_{i=1}^N (\mathbf{M}_i \cdot \mathbf{n}_i)^2, \quad (34)$$

$$E_H = -\mathbf{H} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{M}_i, \quad (35)$$

где E_A и E_H — соответственно энергия анизотропии и энергия Зеемана гранул; σ_i , \mathbf{n}_i и \mathbf{M}_i ($|\mathbf{M}_i| = M$) — соответственно площадь поверхности, единичный вектор, направленный вдоль оси легкого намагничивания, и намагниченность i -й гранулы. Постоянный вектор \mathbf{m}_{si} параллелен или антипараллелен вектору \mathbf{M}_i (в зависимости от знака обменного взаимодействия на границы гранулы), $|\mathbf{m}_{si}| = m_s$. Интегрирование в первом слагаемом формулы (33) ведется

по объему матрицы V_m . Мы снова пренебрегаем членом $-\mathbf{H} \cdot \mathbf{m}$ под знаком интеграла первого слагаемого формулы (33). В рамках нашей модели слагаемые (34), (35) не зависят от температуры, поэтому не внесут вклада в энтропию и магнитокалорический потенциал системы. Уравнение, отвечающее экстремуму функционала (33), и граничное условие имеют вид

$$\Delta \mathbf{m} - \frac{1}{l^2} \mathbf{m} - \frac{\beta}{l_0^2 m_s^2} \mathbf{m}^3 = 0, \quad (36)$$

$$\sum_{i=1}^N \int \left((\mathbf{e}_i \cdot \nabla) \mathbf{m} - \frac{l_J}{l_0^2} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_{si}) \right) d\sigma_i = 0. \quad (37)$$

Здесь направление единичного вектора \mathbf{e}_i совпадает с направлением внешней нормали к поверхности i -й гранулы. Дальнейшее решение в общем виде затруднительно из-за отсутствия сферической симметрии и наличия сложного граничного условия (37), связывающего намагниченность матрицы на поверхностях всех гранул и векторы \mathbf{m}_{si} .

Чтобы продвинуться дальше, разделим объем системы на ячейки Вороного [27]. Они представляют собой многогранники, содержащие внутри себя одну гранулу. Все точки поверхностей этих многогранников ближе к своим внутренним гранулам, чем ко всем остальным. Будем считать, что намагниченность матрицы \mathbf{m}_i внутри i -й ячейки индуцируется в основном i -й гранулой, а на границах ячеек можно вводить граничные условия, которые будут описывать взаимодействие намагниченностей соседних ячеек. Это позволит из уравнения (37) получить отдельные для каждой ячейки граничные условия на поверхностях гранул. Однако этих упрощений недостаточно. Ячейки Вороного мы заменим на одинаковые сферы радиусом λ , равным половине среднего расстояния между центрами ближайших гранул (рис. 8). В силу возникшей сферической симметрии уравнение (36) и граничное условие (37) примут более простой вид:

$$\frac{d^2 \mathbf{m}_i}{dR_i^2} + \frac{2}{R_i} \frac{d\mathbf{m}_i}{dR_i} - \frac{1}{l^2} \mathbf{m}_i - \frac{\beta}{l_0^2 m_s^2} \mathbf{m}_i^3 = 0, \quad (38)$$

$$\left. \frac{d\mathbf{m}_i}{dR_i} \right|_{R_i=R} = \frac{l_J}{l_0^2} (\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_{si}) \Big|_{R_i=R}, \quad (39)$$

где введено обозначение $R_i = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$, \mathbf{r}_i — радиус-вектор центра i -й гранулы. Условие на границе ячейки будет зависеть от взаимной ориентации намагниченностей гранул. Если приложить к системе магнитное поле $H > K/M$, величина которого порядка 10 Э [28], то намагниченности гранул будут

сонаправлены этому полю. Тогда можно ввести следующее условие на границе ячейки:

$$\left. \frac{d\mathbf{m}_i^{\uparrow\uparrow}}{dR_i} \right|_{R_i=\lambda} = 0. \quad (40)$$

Мы обозначили намагниченность i -й ячейки в этом случае как $\mathbf{m}_i^{\uparrow\uparrow}$. Если внешнее поле отсутствует, то в силу случайности направлений легких осей гранул намагниченность матрицы в среднем равна нулю. Тогда можно ввести следующее граничное условие для намагниченности $\mathbf{m}_i^{\uparrow\downarrow}$ в i -й ячейке:

$$\mathbf{m}_i^{\uparrow\downarrow} \Big|_{R_i=\lambda} = 0. \quad (41)$$

Конечно, рассматривая система обладает гистерезисом и при перемагничивании в состоянии с выключенным внешним полем может иметь ненулевую среднюю намагниченность. Вопрос о способах достижения полного размагничивания системы выходит за рамки данной статьи (см., например, работу [29]). Ясно, что «усредненные» граничные условия (40), (41) выполняются тем лучше, чем больше корреляционный радиус парамагнитной матрицы. Для решения уравнения (38) применим подход, описанный в разд. 3.1 для плоскостной структуры. Намагниченность $\mathbf{m}_i^{\uparrow\uparrow}$ будем искать в виде

$$\mathbf{m}_i^{\uparrow\uparrow} = \mathbf{m}_{0i} + \boldsymbol{\xi}_i, \quad |\boldsymbol{\xi}_i| \ll m_s, \quad \boldsymbol{\xi}_i(\lambda) = 0.$$

Сохраняя только линейные слагаемые по $\boldsymbol{\xi}_i$, получим

$$\frac{d^2 \boldsymbol{\xi}_i}{dR_i^2} + \frac{2}{R_i} \frac{d\boldsymbol{\xi}_i}{dR_i} - \kappa^2 (\boldsymbol{\xi}_i + \boldsymbol{\xi}_{0i}) = 0, \quad (42)$$

где $\boldsymbol{\xi}_{0i} = \mathbf{m}_{0i} (\alpha \tau m_s^2 + \beta m_0^2) / (\alpha \tau m_s^2 + 3\beta m_0^2)$, $|\mathbf{m}_{0i}| = m_0$. Решением линейного уравнения (42) с учетом граничного условия (40) является функция

$$\boldsymbol{\xi}_i = \boldsymbol{\xi}_{0i} \left(\frac{1}{\kappa R_i} (\kappa \lambda \operatorname{ch} \kappa (\lambda - R_i) - \operatorname{sh} \kappa (\lambda - R_i)) - 1 \right). \quad (43)$$

Постоянная \mathbf{m}_{0i} определяется численно из уравнения (39). Для нахождения намагниченности $\mathbf{m}_i^{\uparrow\downarrow}$ пренебрежем нелинейным слагаемым в уравнении (38). Это можно сделать, если выполняется условие

$$\frac{\beta}{\alpha \tau} \left(\frac{\mathbf{m}_i^{\uparrow\downarrow}}{m_s} \right)^2 \ll 1. \quad (44)$$

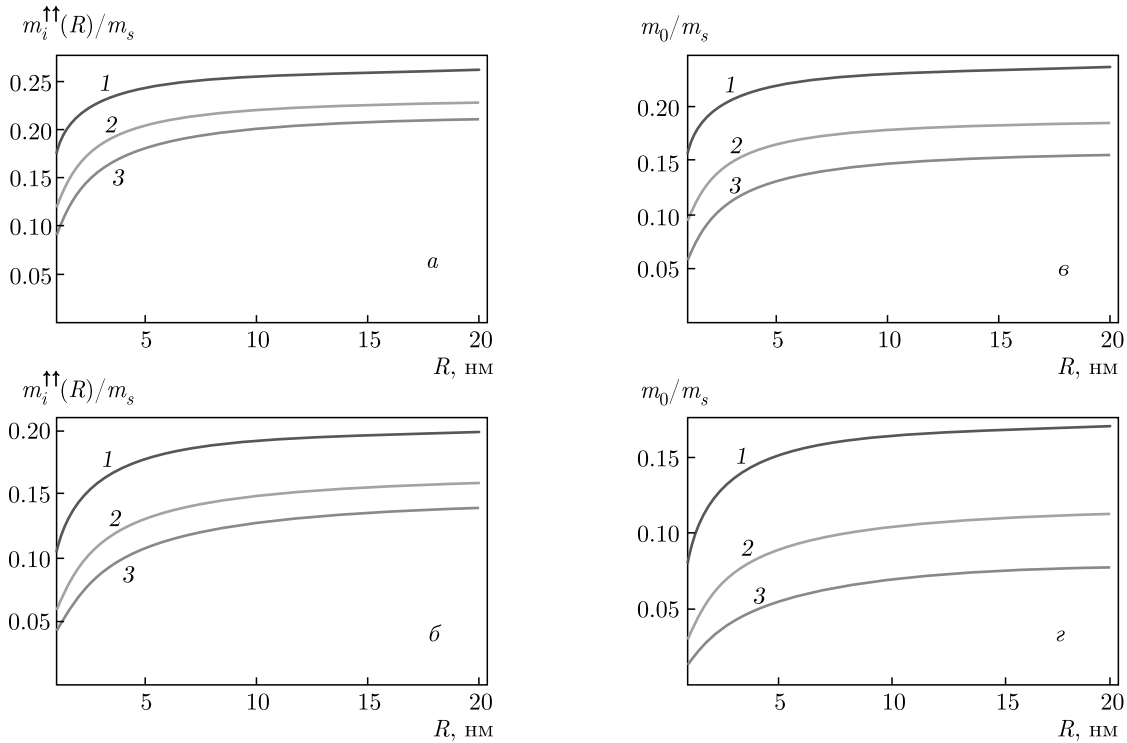


Рис. 9. Зависимости $m_i^{\uparrow\uparrow}(R)$ при $T - T_C = 3$ К (а), $T - T_C = 15$ К (б) и $m_0(R)$ при $T - T_C = 3$ К (е), $T - T_C = 15$ К (з) для $L = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3). Структура на основе $\text{Ni}_x\text{Cu}_{100-x}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

Тогда с учетом граничных условий получим

$$m_i^{\uparrow\downarrow} = \frac{m_{si} l_J R^2 \operatorname{sh} \frac{\lambda - R_i}{l}}{l_0^2 R_i \left(\left(1 + \frac{l_J R}{l_0^2} \right) \operatorname{sh} \frac{\lambda - R}{l} + \frac{R}{l} \operatorname{ch} \frac{\lambda - R}{l} \right)}. \quad (45)$$

В этом разделе все дальнейшие расчеты будут проделаны для матрицы $\text{Ni}_x\text{Cu}_{100-x}$ ($x \approx 70$ ат.%) и гранул $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Для матрицы Gd и гранул Fe приведенные приближенные решения некорректны. Это связано с большой величиной взаимодействия на границе Fe и Gd, что приводит к нарушению условий применимости приближенных решений. Мы также будем считать, что все феноменологические параметры для плоскостойких структур совпадают с соответствующими параметрами гранулированных сред.

Рассмотрим вопрос о влиянии радиуса гранул на намагниченность в ячейке при условии постоянства среднего расстояния L между поверхностями соседних гранул, $L = 2(\lambda - R)$. Если радиус гранул мал, так что $l_J R / l_0^2 \ll 1$, то для любых L справедливо $m_i^{\uparrow\downarrow}(R) / m_s \ll 1$. В обратном слу-

чае, $l_J R / l_0^2 \gg 1$, возможны два варианта. Если $l_0 \sqrt{\alpha \tau} \operatorname{cth}(L/2l) / l_J \ll 1$, то $m_i^{\uparrow\downarrow}(R) \approx m_s$. Если, напротив, $l_0 \sqrt{\alpha \tau} \operatorname{cth}(L/2l) / l_J \gg 1$, то $m_i^{\uparrow\downarrow}(R) / m_s \ll 1$. Анализ величины $m_i^{\uparrow\downarrow}$ несколько осложнен из-за необходимости прибегать к численным вычислениям постоянной m_0 . Мы приводим зависимости $m_i^{\uparrow\downarrow}(R)$ и m_0 от радиуса R для различных температур и средних расстояний между поверхностями гранул (рис. 9). Мы видим, что увеличение размеров гранул с сохранением L приводит как к увеличению $m_i^{\uparrow\downarrow}$, так и к увеличению $m_i^{\uparrow\downarrow}$ при некотором отношении других параметров. На данном этапе трудно сказать, какое это окажет влияние на магнитокалорический потенциал системы. Однако ясно, что увеличение размера гранул более 7–10 нм не имеет смысла.

На рис. 10 изображены зависимости $m_i^{\uparrow\downarrow}(R_i)$ и $m_i^{\uparrow\downarrow}(R_i)$ при различных средних расстояниях между поверхностями ближайших гранул и при различных температурах. Радиус гранул $R = 10$ нм. Зависимости магнитокалорического потенциала $\Delta s(T)$ для гранулированной среды, полученные численно, изображены на рис. 11 для различных L и R . Увеличение радиуса гранул R , как можно видеть, приводит к увеличению Δs . Здесь мы ограничиваемся по-

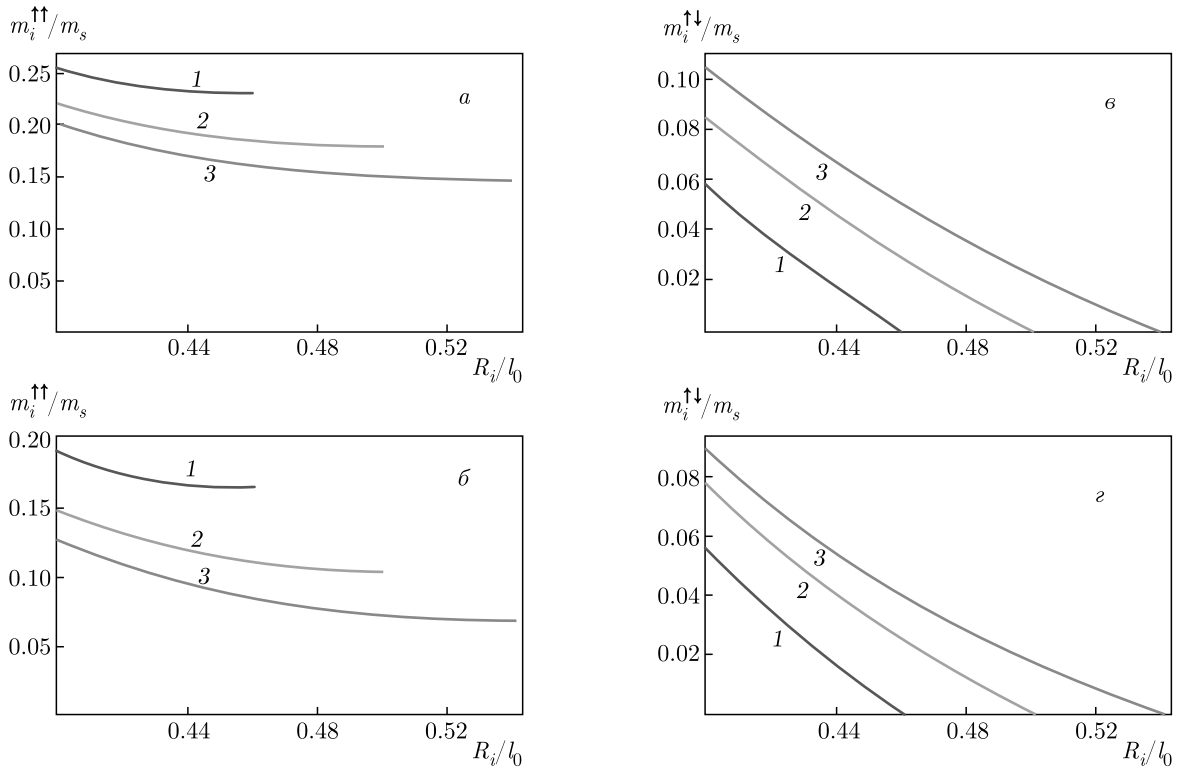


Рис. 10. Зависимости $m_i^{\uparrow\uparrow}(R_i)$ при $T - T_C = 3$ К (а), $T - T_C = 15$ К (б) и $m_i^{\uparrow\downarrow}(R_i)$ при $T - T_C = 3$ К (в), $T - T_C = 15$ К (г) для $L = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3). Структура на основе $Ni_xCu_{100-x}/Co_{40}Fe_{40}B_{20}$

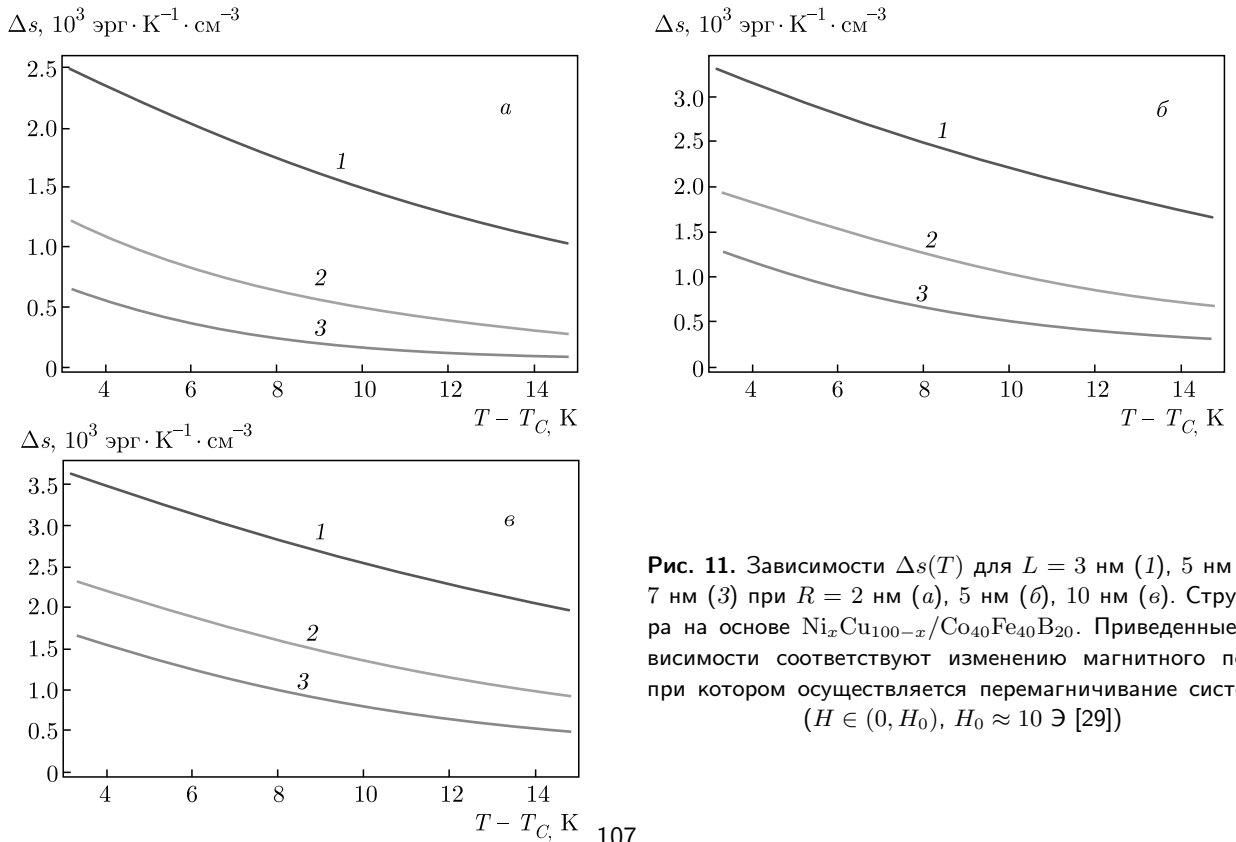


Рис. 11. Зависимости $\Delta s(T)$ для $L = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3) при $R = 2$ нм (а), 5 нм (б), 10 нм (в). Структура на основе $Ni_xCu_{100-x}/Co_{40}Fe_{40}B_{20}$. Приведенные зависимости соответствуют изменению магнитного поля, при котором осуществляется перемagnичивание системы ($H \in (0, H_0)$, $H_0 \approx 10$ Э [29])

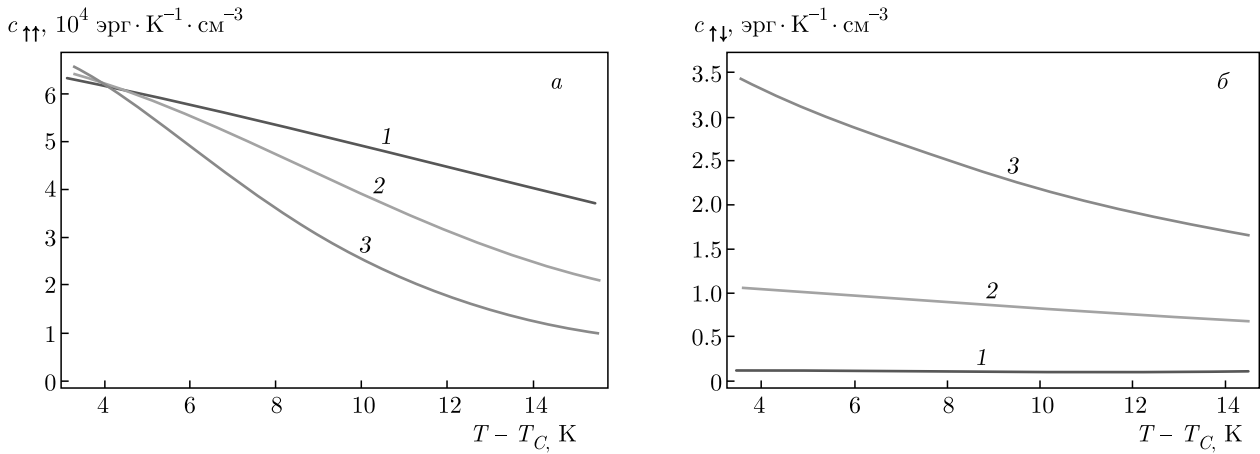


Рис. 12. Зависимости $c_{\uparrow\uparrow(\uparrow\downarrow)}(T)$ для $L = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3) при $R = 10$ нм. Структура на основе $\text{Ni}_x\text{Cu}_{100-x}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

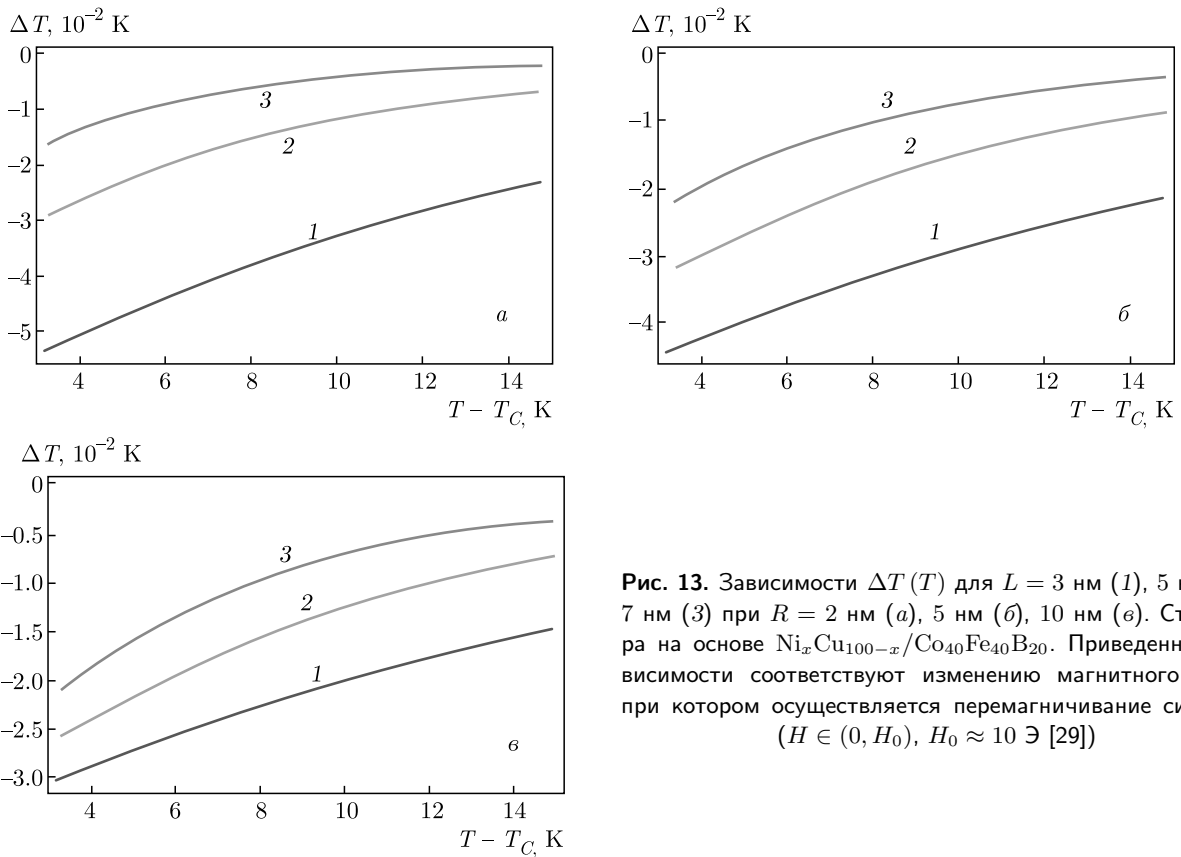


Рис. 13. Зависимости $\Delta T(T)$ для $L = 3$ нм (1), 5 нм (2), 7 нм (3) при $R = 2$ нм (а), 5 нм (б), 10 нм (в). Структура на основе $\text{Ni}_x\text{Cu}_{100-x}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Приведенные зависимости соответствуют изменению магнитного поля, при котором осуществляется перемагничивание системы ($H \in (0, H_0)$, $H_0 \approx 10$ Э [29])

строением решения вне окрестности точки перехода, там, где можно применять приближенные формулы (43) и (45), на которых основаны вычисления Δs .

Приведем теперь расчеты вкладов в теплоемкость от магнитной подсистемы в пересчете на единицу объема матрицы (рис. 12). В отсутствие внешнего поля теплоемкость оказывается на четыре порядка меньше, чем в состоянии параллельной ориентации намагниченности всех гранул. Это мож-

но объяснить значительно меньшей температурной чувствительностью намагниченности ячейки в отсутствие поля. Мы снова видим, что магнитным вкладом в теплоемкость можно пренебречь. Тогда адиабатическое изменение температуры системы примет вид

$$\Delta T = T_f - T = -\frac{T(\lambda^3 - R^3)}{\lambda^3 c} \Delta s. \quad (46)$$

На рис. 13 изображены зависимости $\Delta T(T)$ при различных L и R . При достаточно высокой плотности гранул ($L = 3-5$ нм) наблюдается увеличение ΔT с уменьшением R , несмотря на увеличение Δs . Приведенные оценки ΔT достаточно малы, что связано со сравнительно небольшой величиной взаимодействия l_J .

Таким образом, развитый в разд. 3.1 приближенный подход был обобщен на гранулированную среду. Полученные для гранулированной среды магнитокалорические потенциалы сравнимы с соответствующими потенциалами трехслойной структуры [9].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе теории Ландау и теории среднего поля нами было показано, что магнитокалорический потенциал в плоскостростой структуре Fe/Gd/Fe может достигать достаточно больших значений. Так, например, $\Delta s \approx 10^5$ эрг · К⁻¹ · см⁻³ для тонкой прослойки толщиной 3 нм при критической температуре, что в три раза меньше магнитокалорического потенциала объемного Gd, соответствующего полному размагничиванию (начиная с $H = 1$ Тл) при $T \sim T_C$ [26]. Оценки адиабатического изменения температуры на порядок меньше результата для объемного Gd при тех же условиях. Однако чтобы переключить взаимную ориентацию намагниченностей ферромагнитных берегов, необходимо приложить поле величиной всего в несколько сотен эрстед, что дает выигрыш на 1-2 порядка по приложенному полю. Обе приведенные теории хорошо согласуются между собой. Теория Ландау имеет ограничения (например, должно быть $\tau \ll 1$), но позволяет получить аналитические формулы. Нами также были получены оценки Δs для гранулированной среды (гранулы Co₄₀Fe₄₀B₂₀, матрица Ni_xCu_{100-x}, $x \approx 70$ ат. %). Эти оценки оказались близки к магнитокалорическому потенциалу аналогичной плоскостростой системы [9].

Заметим, что гранулированная структура имеет ряд преимуществ по отношению к плоскостростой. Во-первых, ей легче придать макроскопический объем, что необходимо для использования в холодильных устройствах. Во-вторых, в реальных экспериментах кроме самой прослойки и двух соседних с ней ферромагнитных слоев присутствуют и другие слои, а также подложка. Все эти элементы являются «лишними» в смысле уменьшения магнитокалорического потенциала в пересчете на объем всей системы. Для усиления магнитокалорического

эффекта в обменно-связанных магнитных системах необходим поиск пар материалов с еще большей величиной обменного взаимодействия на границе раздела. Сам твердотельный хладагент должен обладать, с одной стороны, значительным внутренним обменным взаимодействием, с другой, — большой намагниченностью насыщения.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00356), а также с использованием средств государственного бюджета по государственному заданию на 2019–2021 гг. (№ 0035-2019-0022-С-01). Расчеты магнитокалорического эффекта по методу среднего поля выполнены в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Актуальные проблемы физики низких температур».

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Weiss and A. Piccard, *J. Phys. Theor. Appl.* **7**, 103 (1917).
2. A. M. Tishin and Y. I. Spichkin, *The Magnetocaloric Effect and its Application*, Bristol and Philadelphia, USA (2003).
3. V. K. Pecharsky and K. A. Gschneidner, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4494 (1997).
4. А. А. Фраерман, И. А. Шерешевский, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 693 (2015).
5. D. Schwenk, F. Fishman, and F. Schwabl, *Phys. Rev. B* **38**, 11618 (1988).
6. S. N. Vdovichev, N. I. Polushkin, I. D. Rodionov et al., *Phys. Rev. B* **98**, 014428 (2018).
7. D. M. Polischuk, Yu. O. Tykhonenko-Polischuk, E. Holmgren et al., *Phys. Rev. Mater.* **2**, 114402 (2018).
8. N. I. Polushkin, I. Y. Pashenkin, E. Fadeev et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **491**, 165601 (2019).
9. M. A. Kuznetsov, I. Y. Pashenkin, N. I. Polushkin et al., *J. Appl. Phys.* **127**, 183904 (2020).
10. A. B. Drovosekov, N. M. Kreines, A. O. Savitsky et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 115802 (2017).
11. R. E. Camley, *Phys. Rev. B* **35**, 3608 (1987).
12. R. E. Camley and D. R. Tilley, *Phys. Rev. B* **37**, 3413 (1988).

13. R. E. Camley, Phys. Rev. B **39**, 12316 (1989).
14. M. Sajjeddine, P. Bauer, K. Cherifi et al., Phys. Rev. B **49**, 8815 (1994).
15. N. Hosoi, H. Hashizume, and N. Ishimatsu, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 5289 (2002).
16. P. N. Lara, J. Ding, J. E. Pearson et al., Phys. Rev. B **96**, 024418 (2017).
17. T. D. C. Higgs, S. Bonetti, H. Ohldag et al., Sci. Rep. **6**, 30092 (2016).
18. R. E. Camley, *Handbook of Surface Science*, North-Holland, Amsterdam (2015), Vol. 5, Ch. 6, pp. 243–295.
19. А. Б. Дровосеков, Д. И. Холин, Н. М. Крейнс, ЖЭТФ **158**, 151 (2020).
20. Y. Choi, D. Haskel, R. E. Camley et al., Phys. Rev. B **70**, 134420 (2004).
21. A. B. Drovosekov, A. O. Savitsky, D. I. Kholin et al., J. Magn. Magn. Mater. **475**, 668 (2019).
22. Д. Смарт, *Эффективное поле в теории магнетизма*, Мир, Москва (1968), с. 17.
23. J. A. Tuszynski and W. Wierzbicki, Amer. J. Phys. **59**, 555 (1991).
24. Н. И. Ахиезер, *Элементы теории эллиптических функций*, Наука, Москва (1970), с. 91.
25. А. М. Журавский, *Справочник по эллиптическим функциям*, Изд-во АН СССР, Москва–Ленинград (1941), сс. 69, 72.
26. A. Smith, C. R. H. Bahl, R. Bjørk et al., Adv. Energy Mater. **2**, 1288 (2012).
27. V. S. Kumar and V. Kumaran, J. Chem. Phys. **123**, 114501 (2005).
28. F. Yildiz, S. Kazan, B. Aktas et al., J. Magn. Magn. Mater. **305**, 24 (2006).
29. P. Allia, M. Coisson, M. Knobel et al., Phys. Rev. B **60**, 12207 (1999).

ФОНОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ШОТТКИ-ПОДОБНЫХ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПАРАМАГНИТНОЙ ПРИРОДЫ В КРИСТАЛЛАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ГРАНАТОВ

А. В. Таранов^{a}, Е. Н. Хазанов^{a**}, Е. В. Чарная^b*

*^a Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук
125009, Москва, Россия*

*^b Санкт-Петербургский государственный университет
199034, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 16 июля 2020 г.,
после переработки 20 августа 2020 г.
Принята к публикации 30 августа 2020 г.

Рассмотрены особенности взаимодействия слабонеравновесных фононов с низкоэнергетическими возбуждениями парамагнитной природы редкоземельных ионов иттриевого ряда в структуре твердых растворов редкоземельных гранатов в области гелиевых температур. Экспериментально исследовано взаимодействие неравновесных фононов с низкоэнергетическими возбуждениями Ho^{3+} и Tb^{3+} , обусловленными локальными электрическими полями кристаллической решетки. В ряду крамерсовых ионов, когда природа низкоэнергетических возбуждений обусловлена снятием вырождения основного уровня парамагнитного иона за счет локальных магнитных полей соседних ионов, взаимодействие в системе неравновесных фононов с низкоэнергетическими возбуждениями наблюдалось практически только в Er-содержащих твердых растворах и отсутствовало в структурах, содержащих редкоземельные ионы Gd^{3+} , Dy^{3+} , и Yb^{3+} . Показано, что в модели двухуровневых систем эффективность взаимодействия и транспортные характеристики фононов тепловых частот зависят от типа редкоземельного иона, энергии и спектральных особенностей двухуровневых систем, моментов электронов на $4f$ -оболочке, спин-решеточной релаксации.

DOI: 10.31857/S0044451021010090

1. ВВЕДЕНИЕ

Наличие ионов редкоземельных (РЗ) металлов в структуре твердых диэлектриков определяет широкое разнообразие физических свойств материалов и методов их исследования. При низких температурах это прежде всего возможность формирования магнитоупорядоченных фаз [1], создание различных состояний, индуцированных внешним магнитным полем [2–4], возникновение шоттки-подобных возбуждений, определяющих характер низкотемпературных термодинамических и кинетических характеристик фононов тепловых частот [5]. Базовыми методами исследования особенностей РЗ-ионов в структуре различных материалов являются методы ЭПР

и ЯМР [6, 7]. Анализ транспортных характеристик фононов в области гелиевых температур позволяет исследовать природу низкоэнергетических колебательных состояний, вклад различных механизмов в рассеяние фононов тепловых частот [8], а также установить связь кинетических характеристик фононов в условиях нестационарного процесса их распространения с данными стационарных низкотемпературных измерений теплоемкости [5].

Разнообразие свойств парамагнитных ионов обусловлено электронной структурой внутренней $4f$ -оболочки и обладает определенной регулярностью в зависимости от степени ее заполнения [6]. Кристаллическое поле частично или полностью снимает вырождение основного уровня магнитного иона, расщепляя каждый терм на мультиплет штарковских уровней. Динамические электрические поля могут возбуждать переходы между штарковскими уровнями, что лежит в основе созда-

* E-mail: taranov@cplire.ru

** E-mail: khazanov@cplire.ru

ния лазерных сред в широком диапазоне энергий [9]. Большие значения магнитокалорического момента материалов, содержащих примеси парамагнитных ионов, позволяет использовать их в магнитных рефрижераторах [10, 11].

Если суммарный механический момент электрона обусловлен только суммарным спиновым моментом парамагнитного иона, а вклад орбитального момента отсутствует, то при этом возможно лишь слабое взаимодействие как со статическими (слабое штарковское расщепление), так и динамическими (слабая связь с колебаниями решетки, медленная спин-решеточная релаксация) электрическими полями. Энергия штарковских уровней, как правило, превышает десятки и сотни градусов Кельвина. Расщепление крамерсовых дублетов в нулевом магнитном поле составляет не более 13 К. Именно крамерсовы ионы, а также штарковские уровни с энергией менее 10 К в основном и определяют особенности термодинамических и кинетических характеристик фононов в области гелиевых температур.

Цель работы состоит в анализе особенностей термодинамических и транспортных характеристик фононов тепловых частот в области гелиевых температур в твердых растворах диэлектриков с примесями редкоземельных металлов иттриевого ряда.

В работе использован термин «шоттки-подобные возбуждения», поскольку, в отличие от классической аномалии Шоттки в нулевом магнитном поле, природа исследуемых в работе низкоэнергетических возбуждений обусловлена наличием локальных магнитных полей ближайших парамагнитных ионов, которые приводят к расщеплению крамерсового дублета.

2. МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе приведены результаты экспериментального исследования транспортных характеристик неравновесных фононов (НФ) и теплоемкости $C(T)$ в области гелиевых температур в монокристаллах твердых растворов $Y_{3-x}Re_xAl_5O_{12}$ (YAG:Re), где Re = Er, Gd, Ho, Dy, Tb; $Tm_{3-x}Er_xAl_5O_{12}$ (TmAG:Er); $Gd_3Ga_5O_{12}$ (GGG) и GGG:Er.

Измерения теплоемкости $C(T)$ в образцах проводились с помощью комплекса для измерения физических свойств PPMS-9+Ever Cool-II фирмы Quantum Design в интервале температур 1.9–220 К.

Методика исследования кинетических характеристик фононов состоит в нагреве коротким импуль-

сом тока ($t < 100$ нс) пленки металла (Au) на одном из торцов и регистрации сигнала широкополосным сверхпроводящим болометром на основе пленки Sn на противоположной грани исследуемого образца. Размер образцов в направлении распространения теплового импульса менялся от 0.1 до 1 см. Исследования проводились в температурном диапазоне 2.2–3.8 К. Образцы в процессе измерения были полностью погружены в жидкий гелий, что обеспечивало эффективный теплоотвод от пленки инжектора и малую инерционность болометра. Превышение температуры T_h инжектора фононов над температурой T_0 термостата было таково, что $\Delta T = T_h - T_0 \ll T_0$, т. е. фононы являются слабонеравновесными, а исследуемый образец имеет температуру термостата. Выделяемая в пленке инжектора мощность в импульсе не превышала 0.1 Вт/мм². При степени легирования образцов более 5% НФ распространялись, как правило, в режиме диффузии. В общем случае, при наличии нескольких механизмов рассеяния НФ, измеряемой величиной является $t_m(T)$ — время регистрации болометром максимума сигнала $S(t)$. Регистрируемые болометром сигналы измерялись в пределах линейного участка характеристики болометра. При упругом рассеянии регистрируемые сигналы хорошо описывались решением нестационарного уравнения диффузии

$$\Delta T(t) \propto t^{-1/2} \exp\left(-\frac{L^2}{4D_0(T)t}\right) \quad (1)$$

(«плоский» источник), где ΔT — разность температуры, регистрируемой болометром, и температуры термостата, L — длина образца в направлении распространения НФ, D_0 — коэффициент диффузии. При этом время $t_{m0}(T)$ прихода максимума диффузионного сигнала в случае только упругого рассеяния однозначно связано с коэффициентом диффузии:

$$t_{m0}(T) = \frac{L^2}{2D_0(T)},$$

где $D_0 = v^2\tau_0(\omega)/3$, v — средняя по поляризации скорость звука, $\tau_0(\omega) \propto T^{-4}$ — время упругого рассеяния НФ. Данный подход позволяет исследовать температурные зависимости кинетических характеристик в режиме диффузии, изменяя температуру термостата. В области гелиевых температур ($T_0 < 4$ К) неупругие фонон-фононные взаимодействия, обусловленные ангармонизмом кристаллической решетки, в сравнительно коротких образцах маловероятны. Экспериментальные измерения [12] и теоретические оценки дают значение примерно 10^{-2} с. Поэтому эффективность

рассеяния НФ в условиях эксперимента определялась в основном упругим рассеянием фононов, связанным с взаимозамещением РЗ-ионов на додекаэдрических *s*-позициях кристаллической решетки твердого раствора [13] и наличием низкоэнергетических возбуждений. Температурный интервал измерений был ограничен снизу λ -точкой гелия, а сверху — температурой сверхпроводящей пленки болометра. Особенности эксперимента, связанные с увеличением температуры инжектора (увеличением энергии НФ) и с формированием особенностей транспорта в результате комбинации эффективного упругого рассеяния и неупругого рассеяния, обусловленного ангармонизмом кристаллической решетки, рассмотрены в работе [14]. Незначительный нагрев инжектора фононов ($\Delta T = 0.1\text{--}0.2$ К), малое время наблюдения (размер образцов) и высокая концентрация РЗ-ионов в данной работе имели целью исключить фонон-фононные взаимодействия, обусловленные ангармонизмом, чтобы проанализировать только взаимодействия НФ с двухуровневой системой (ДУС).

Наличие в исследуемом диапазоне температур низкоэнергетических шоттки-подобных возбуждений может давать свой вклад в рассеяние фононов теплового импульса. Длина l_R и время τ_R пробега фононов в режиме диффузии относительно неупругого взаимодействия с низкоэнергетическими возбуждениями рассмотрены в работе [15] и могут быть оценены из выражения $l_R \approx v\sqrt{\tau_0(\omega)\tau_R(\omega)}$ [16] или аналогичного

$$l_R \approx \sqrt{D_0(\omega)\tau_R(\omega)}. \quad (2)$$

Данный процесс означает, что фонон частоты ω , пройдя расстояние l_R , может многократно упруго рассеяться, прежде чем провзаимодействует с ДУС. При этом если $t_{m0}/\tau_R \gg 1$, то транспорт НФ будет преимущественно определяться их взаимодействием с ДУС, в противном случае — преимущественно упругим рассеянием. При $t_{m0}/\tau_R \sim 1$ в относительно длинном образце регистрируемый сигнал позволяет наблюдать особенность, связанную с взаимодействием НФ с ДУС на фоне упругого рассеяния фононов дефектами структуры. Пример подобного наблюдения представлен на рис. 1, когда зарегистрированные болометром сигналы $S(t)$ для разных температур в образце $Y_{2.7}Tb_{0.3}Al_5O_{12}$ ($L = 1$ см, энергия низколежащего уровня $\Delta = 5.76$ К) обусловлены только упругим взаимодействием, $t_{m0}(T) < 4 \cdot 10^{-5}$ с. На задних фронтах регистрируемых сигналов, изображенных на вставке, на зависимости $S(t) \propto t^{-1/2}$, характерной для режи-

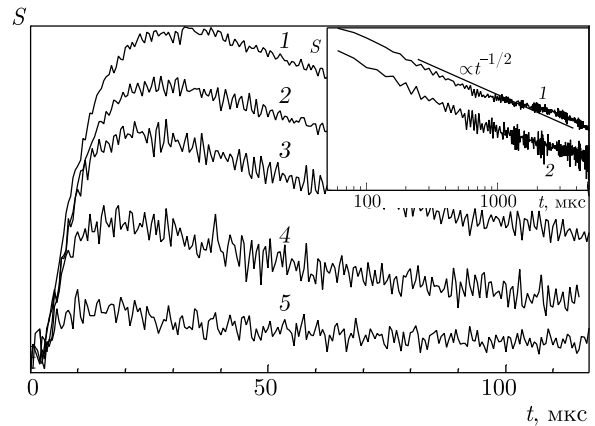


Рис. 1. Сигналы НФ в образце $Y_{2.7}Tb_{0.3}Al_5O_{12}$ ($L = 1$ см): $T = 3.8$ К (1); 3.6 К (2); 3.4 К (3); 3 К (4); 2.7 К (5). Вставка — задние фронты в двойном логарифмическом масштабе из работы [8]: $T = 3.8$ К (1) и $T = 3$ К (2)

ма классической диффузии (1), отражено появление особенности, обусловленной взаимодействием НФ с ДУС на временах больше 10^{-3} с. В отсутствие упругого рассеяния, в условиях баллистического распространения, наблюдение данного взаимодействия было бы затруднено в относительно коротких образцах $L < 1$ см.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 2 приведены температурные зависимости $C(T)$ для ряда концентраций твердых растворов монокристаллов $YAG:Re$ ($Re = Er, Gd, Ho, Dy$), $TmAG:Er$ [10], GGG и $GGG:Er$. Видно, что в низкотемпературной части диапазона характер зависимостей $C(T) \propto T^{-2}$ отражает вклад в суммарную теплоемкость шоттки-подобных возбуждений на фоне первых возбужденных штарковских уровней ионов Er^{3+} [10], Dy^{3+} , Gd^{3+} , Tm^{3+} [11] и Ho^{3+} [10]. Ионы Er^{3+} , Dy^{3+} , Gd^{3+} имеют кramerсову природу, что при отсутствии внешнего магнитного поля может приводить к снятию вырождения основного уровня иона за счет локальных магнитных полей ближайших соседей.

Для некрамерсова иона Ho^{3+} в YAG наличие низколежащего штарковского уровня с энергией $\Delta \approx 5.7$ К было определено в работе [10]. В модели ДУС вклад данного низкоэнергетического возбуждения в суммарную теплоемкость в исследуемом диапазоне температур (в предположении, что выше лежащие уровни не вносят значительного вклада) можно описать выражением

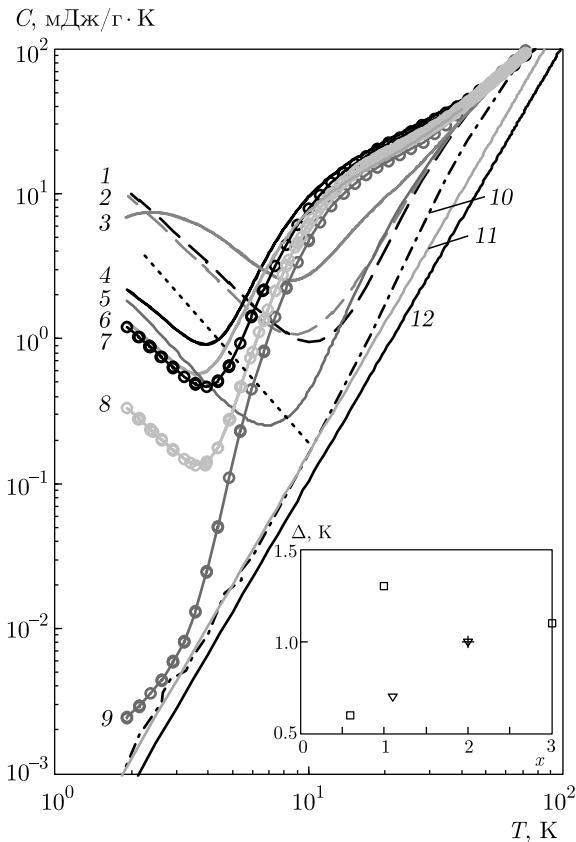


Рис. 2. (В цвете онлайн) Температурные зависимости теплоемкости для ряда составов твердых растворов: GGG (1); GGG : Er5 % (2); $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$ (3); $Er_3Al_5O_{12}$ (4); $Y_2Dy_1Al_5O_{12}$ (5); $Y_2Er_1Al_5O_{12}$ (6); $Tm_1Er_2Al_5O_{12}$ (7); $Tm_2Er_1Al_5O_{12}$ (8); $Tm_3Al_5O_{12}$ (9); $Y_3Al_5O_{12}$ (10); оценки фононного (дебаевского) вклада в теплоемкость для $Er_1Y_2Al_5O_{12}$ (11) и $Er_3Al_5O_{12}$ (12). Пунктирная прямая — зависимость $C(T) \propto T^{-2}$. Вставка — зависимость энергии расщепления крамерсова дублета Δ основного уровня иона Er^{3+} в различных матрицах РЗ-гранатов [10,11]: YAG (\square); TmAG (∇); HoAG ($+$)

$$C(T) = R \frac{(\Delta/T)^2 e^{-\Delta/T}}{(1 + e^{-\Delta/T})^2}, \quad (3)$$

где R — газовая постоянная. Для образца $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$ максимум приведенной на рис. 2 зависимости $C(T)$ находится при $T_{max} = 0.417\Delta = 2.4$ К.

Для крамерсовых ионов все не так однозначно. Энергия ДУС зависит от концентрации твердого раствора. На вставке к рис. 2 приведена концентрационная зависимость энергии расщепления Δ основного уровня иона Er^{3+} в YAG, HoAG [10] и TmAG [11] в нулевом внешнем магнитном поле. В работе [17] при понижении температуры в диапазоне 93 мК–8 К в образце $Y_2Er_1Al_5O_{12}$ широкий, ха-

рактерный для крамерсова расщепления, максимум теплоемкости наблюдался при $T_{max} = 266 \pm 30$ мК.

В работе [5] было показано, что при распространении НФ в образцах твердых растворов YAG : Re с различной концентрацией низкоэнергетических возбуждений мерой эффективности взаимодействия НФ с ДУС различной природы помимо времени регистрации максимума сигнала $t_m(T)$ являются длина l_R и время τ_R свободного пробега НФ при взаимодействии с ДУС. При этом если в условиях эксперимента $t_{m0}/\tau_R \gg 1$, то $t_m(L) \propto L$, а $\tau_R \propto T^{-5}/n$ (n — концентрация РЗ-ионов). Линейная зависимость $t_m(L) \propto L$ свидетельствует о наличии неупругого процесса во взаимодействии НФ с ДУС [15]. Характер транспорта НФ при этом может быть подобен режиму квазидиффузии [16], когда на фоне интенсивного упругого рассеяния НФ в режиме диффузии при увеличении температуры (энергии) фононов становятся возможны неупругие процессы распада фононов за счет ангармонизма кристаллической решетки. В этом случае зависимость $t_m(L)$ также близка к линейной [14].

На рис. 3 приведены нормированные на размер образца температурные зависимости $t_m(T)/L$. В исследуемом диапазоне температур зависимости $t_m(T) \propto T^{-2}$ отражают зависимости $C(T)$ (см. рис. 2). Из сопоставления характера температурных зависимостей на рис. 2 и 3 можно предположить, что в области гелиевых температур рассеяние НФ также определяется наличием низкоэнергетических возбуждений.

В работе [18] было получено выражение для эффективного времени регистрации максимума сигнала, которое отражает связь кинетических характеристик с данными теплоемкости при условиях $C_{ils} \gg C_{ph}$ в образцах того же состава:

$$\frac{t_m(T)}{t_{m0}} \propto \frac{C_{ils}(T)}{C_{ph}(T)}, \quad (4)$$

где C_{ils} — теплоемкость, связанная с ДУС, C_{ph} — фононная (дебаевская) теплоемкость. Значение t_{m0} однозначно связано со временем упругого рассеяния, хорошо поддается расчету согласно работе [13] и, как будет показано ниже на рис. 8, может быть определено для любой концентрации примеси замещения. Единственной оценочной величиной в выражении (3) является $C_{ph}(T)$. При низких температурах

$$C_{ph}(T) = \frac{12\pi^4}{5} NR \left(\frac{T}{T_D} \right)^3, \quad (5)$$

где $N = 20$ — число атомов в формульной единице, T_D — температура Дебая.

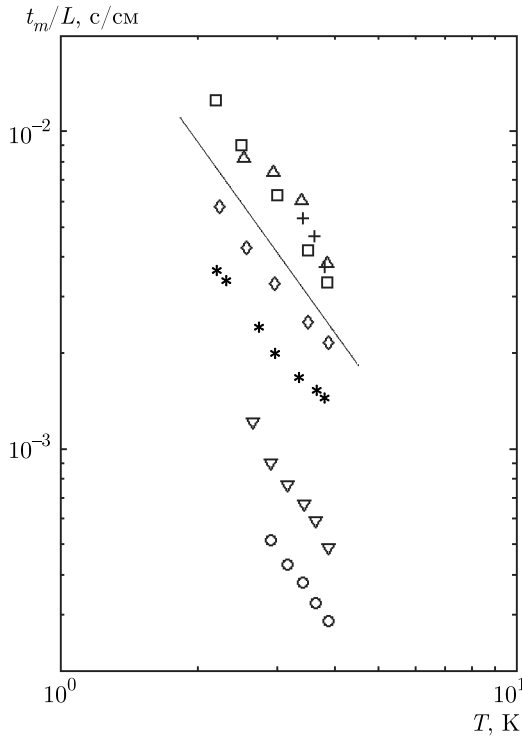


Рис. 3. Температурные зависимости $t_m(T)$, нормированные на длину L образца, в ряде Er- и Ho-содержащих монокристаллов твердых растворов алюмогранатов: $\text{Er}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.22$ см (\square); $\text{Y}_2\text{ErAl}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.25$ см (*); $\text{Tm}_2\text{ErAl}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.39$ см (\circ); $\text{TmEr}_2\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.39$ см (∇); $\text{Y}_{1.5}\text{Er}_{1.5}\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.6$ см (\diamond); $\text{Y}_{1.5}\text{Ho}_{1.5}\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.3$ см (Δ); $\text{Y}_{2.5}\text{Tb}_{0.5}\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (+). Прямая линия — зависимость $t_m \propto T^{-2}$

Выражение (4) отражает связь кинетических и термодинамических характеристик независимых измерений. Так, для приведенных на рис. 3 образцов Er-содержащих твердых растворов YAG:Er и TmAG:Er при $T = 3$ К отношения правой и левой частей этого выражения лежат в интервале 1–2.5. Близость к равенству правой и левой частей в выражении (4) для сравнительно коротких образцов может означать, что в условиях эксперимента — нестационарного процесса распространения теплового импульса — возможно установление равновесия в системе НФ–ДУС в образце определенной длины. Определение конкретных условий возникновения равновесия в системе НФ–ДУС в условиях нестационарного процесса требует дополнительных исследований и в данный момент не рассматривается. Выражение (4) не содержит напрямую значений кинетических характеристик величин τ_R и l_R , которые отражают особенности взаимодействия НФ с ДУС, обусловленные природой конкретного пара-

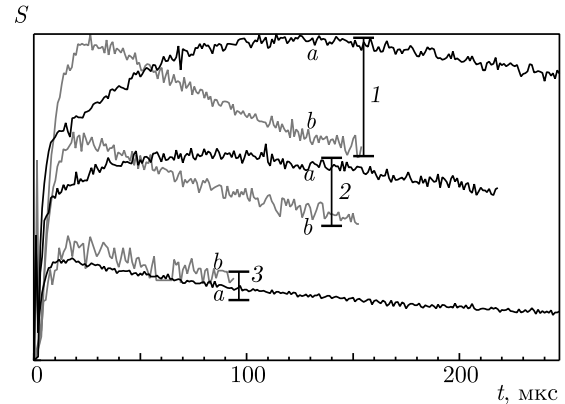


Рис. 4. (В цвете онлайн) Сигналы НФ в образцах $\text{Y}_{2.8}\text{Er}_{0.2}\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (a), $\text{Y}_{2.8}\text{Lu}_{0.2}\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (b) при $T = 3.83$ К (1), 3.43 К (2), 2.91 К (3)

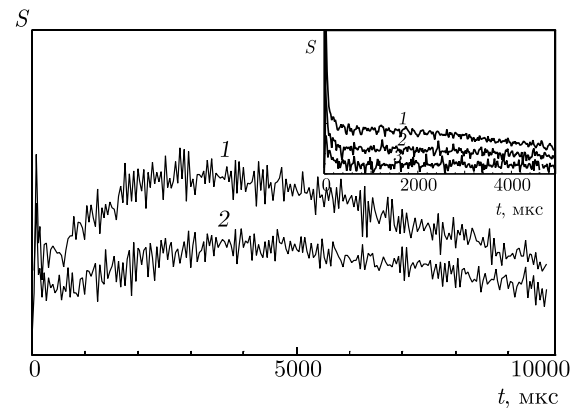


Рис. 5. Сигналы НФ в образцах $\text{Y}_{2.5}\text{Tb}_{0.5}\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $L = 0.75$ см при $T = 3.8$ К (1), 3.6 К (2) из работы [8]. На вставке — то же для $L = 0.6$ см и $T = 3.8$ К (1), 3.6 К (2), 3.0 К (3)

магнитного иона в структуре твердого раствора. Ниже приведены примеры независимой оценки значений l_R и τ_R в ряде твердых растворов РЗ-гранатов.

На рис. 4 приведены регистрируемые болометром сигналы в образцах $\text{Y}_{2.8}\text{Er}_{0.2}\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Y}_{2.8}\text{Lu}_{0.2}\text{Al}_5\text{O}_{12}$ одной геометрии ($L = 0.68$ см) и концентрации [19]. Незначительное различие масс РЗ-ионов в YAG:Re означает один и тот же уровень упругого рассеяния НФ, а следовательно, и значений $D_0(T)$. Совпадение временных зависимостей сигнала в образцах YAG:Er_{0.2} и YAG:Lu_{0.2} при $T = 2.91$ К позволяет определить значения $l_R = 0.68$ см и $\tau_R = 10^{-5}$ с; согласно выражению (2) имеем $l_R \approx \sqrt{D_0\tau_R}$.

Оценка величин l_R и τ_R при $T = 3$ К в образце $\text{Y}_{2.5}\text{Tb}_{0.5}\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (штарковский уровень иона Tb^{3+} в

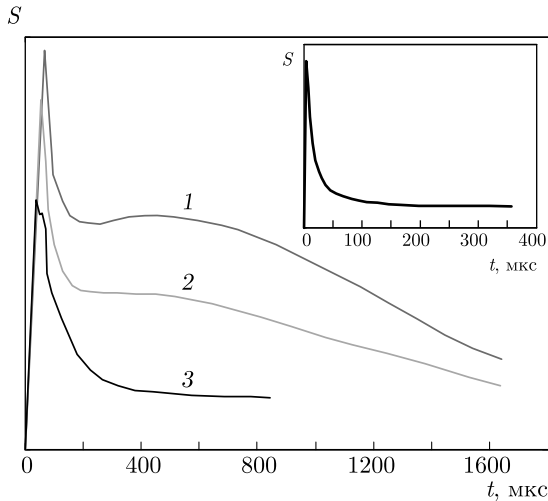


Рис. 6. (В цвете онлайн) Сигналы НФ в образцах GGG:Er5%, $L = 0.4$ см: 1 — $T = 3.8$ К; 2 — $T = 3.4$ К; 3 — $T = 2.93$ К. Вставка — образец $L = 0.2$ см, $T = 3.0$ К

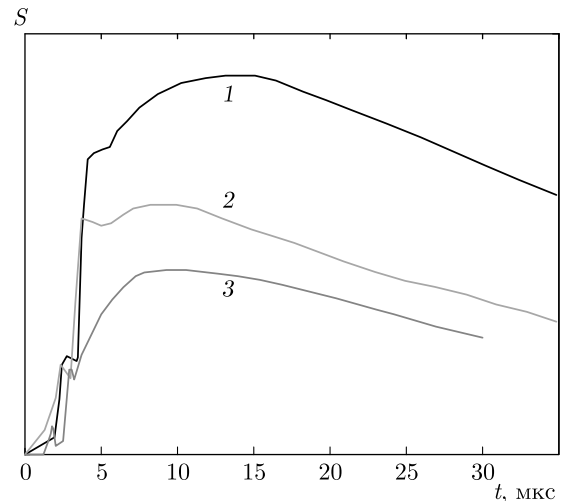


Рис. 7. (В цвете онлайн) Сигналы НФ в беспримесных образцах YAG и GGG, $L = 1$ см: 1 — GGG, $T = 3.8$ К; 2 — GGG, $T = 3.4$ К; 3 — YAG, $T = 3.4$ К

YAG, $\Delta = 5.76$ К [20]) выполнена на основании результатов, приведенных на рис. 5, когда в отличие от данных, представленных на рис. 1, при увеличении концентрации Tb^{3+} взаимодействие НФ с ДУС становится определяющим и основная часть энергии НФ сосредоточена в системе ДУС. Оценка проведена по пропаданию сигнала, связанного с рассеянием на ДУС, при последовательном уменьшении размера образца до 0.6 см; получена величина $\tau_R = 2.4 \cdot 10^{-5}$ с. При этом в образце $Y_{2.5}Er_{0.5}Al_5O_{12}$ при $T = 3$ К значение $\tau_R = 4 \cdot 10^{-6}$ с и, согласно зависимости $\tau_R \propto T^{-5}$, меньше в 6 раз. Это же справедливо и по отношению к составу $Y_{1.5}Ho_{1.5}Al_5O_{12}$ с близким значением нижнего штарковского уровня $\Delta \approx 5.7$ К. Подобную активность ион Er^{3+} проявляет и в других твердотельных матрицах: иттриевых моноалюминатах [21], катион-вакансионных гранатах, структурах флюорита [22].

Выше на рис. 2 приведены температурные зависимости $C(T)$ в беспримесном GGG и образце GGG:Er5%. В обоих случаях наблюдается значительный вклад в суммарную теплоемкость низкоэнергетических возбуждений в области гелиевых температур.

В GGG:Er5% помимо крамерсова расщепления основного уровня мультиплет $^4I_{15/2}$ иона Er^{3+} расщепляется на 8 крамерсовых дублетов, из которых 4 нижних имеют энергии 0, 44.6, 63.3 и 90.6 К [23]. Данные значения энергий находятся за пределами доступного в эксперименте диапазона энергий фононов. На рис. 6 приведены регистрируемые болометром сигналы в образце GGG:Er5%, $L = 0.4$ см, а

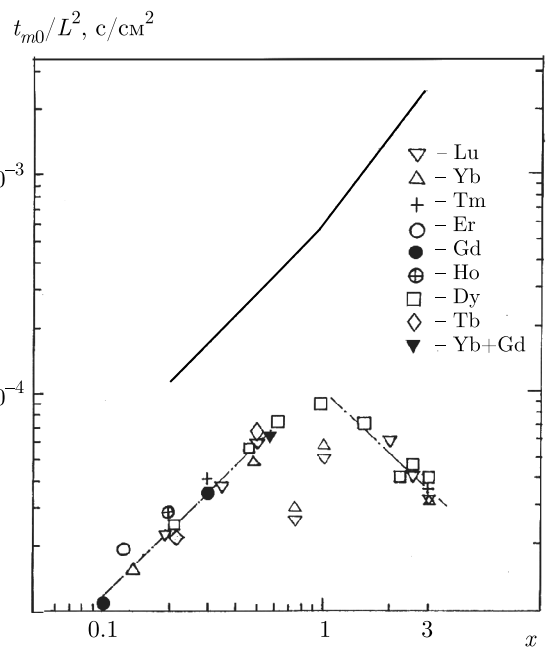


Рис. 8. Концентрационные зависимости нормированного на L^2 времени упругого рассеяния НФ ($T = 3.4$ К) в твердых растворах YAG:Re. Сплошная линия — зависимость $t_m(x)/L^2$ в YAG:Er

также для образца $L = 0.2$ см при $T = 3$ К (на вставке), когда взаимодействием НФ с ДУС уже можно пренебречь. При этом оценка $\tau_R = 1.6 \cdot 10^{-6}$ с на порядок меньше, чем в YAG:Er для близкого по составу $Y_{2.8}Er_{0.2}Al_5O_{12}$.

На рис. 7 представлены сигналы НФ в беспримесных образцах $L = 1$ см матриц GGG и YAG. Ха-

рактар сигналов в обоих случаях (время регистрации диффузионного максимума сравнимо с временем баллистического сигнала) обусловлен упругим рассеянием НФ на нестехиометрических дефектах, позициях замещения $Ga \leftrightarrow Gd$ в GGG (менее 8 %) и $Al \leftrightarrow Y$ в YAG (менее 4 %) в октаэдрическом окружении кислорода [24]. Таким образом, взаимодействие НФ с низкоэнергетическими возбуждениями в GGG полностью отсутствует, в отличие от данных по теплоемкости (см. рис. 2). Низкоэнергетические возбуждения в GGG, обусловленные спиновым мультиплетом $^8S_{7/2}$ иона Gd^{3+} (0, 1.5, 2.4 и 4.4 К), были определены из данных по теплоемкости в работе [21] и находятся в пределах исследуемого в работе диапазона температур. Отсутствие взаимодействия их с тепловыми импульсами фононов в условиях эксперимента наблюдалось также в монокристаллах YAG:Gd, о чем свидетельствуют данные на рис. 8, где при $T = 3.4$ К на нормированной на L^2 зависимости $t_{m0}(x)$ приведены результаты только упругого рассеяния НФ в образцах ряда твердых растворов YAG:Re. То же необходимо отметить и для образцов $Y_{2.4}Yb_{0.4}Gd_{0.2}Al_5O_{12}$, содержащих кримерсов ион Yb^{3+} , для которого отсутствует расщепление основного уровня в нулевом внешнем магнитном поле и в других матрицах [25].

Отсутствие взаимодействия НФ с низкоэнергетическими возбуждениями в Gd-содержащих твердых растворах в данном случае связано с заполненной ровно наполовину $4f$ -оболочкой кримерсова иона Gd^{3+} ; при этом орбитальная часть момента равна нулю. Именно модуляцией орбитального движения электронов фононами обусловлено взаимодействие с ДУС. Однако данное свойство иона Gd^{3+} , ограничивающее связь колебаний решетки со спинами, не проявилось в аналогичных экспериментах в стекле пентафосфата гадолиния [25].

На рис. 9 наряду с данными для плавленого кварца из работы [26] приведены температурные зависимости $t_m(T)$ в ряде стекол пентафосфатов на основе парамагнитных ионов Ce-ряда ReP_5O_{14} ($Re = Ce, Sm, Gd$). Для стекол и стеклоподобных материалов, например, сегнетоэлектриков-релаксоров, в области температур, предшествующей «плато» в теплопроводности имеем $t_m(T) \propto T^n$, где $n > 4$. Для плавленого кварца $t_m(T) \propto T^5$ [26]. На рис. 9 при близких абсолютных значениях t_m для плавленого кварца, SmP_5O_{14} и CeP_5O_{14} при понижении температуры в образцах пентафосфата наблюдается слабый вклад в рассеяние НФ, обусловленный взаимодействием с низкоэнергетическими возбуждениями. При этом для иона

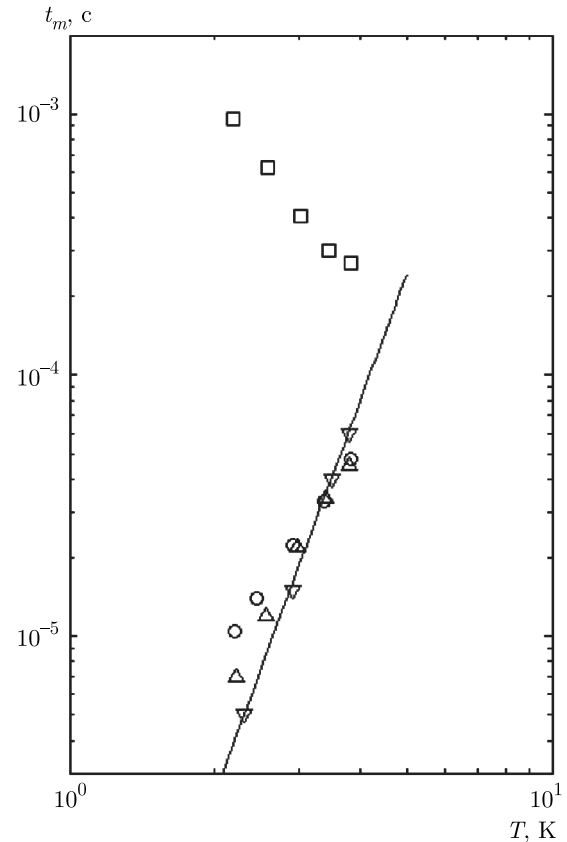


Рис. 9. Температурные зависимости времени прихода максимума сигнала НФ в ряде стекол РЗ-пентафосфатов и в плавленом кварце: SmP_5O_{14} (○); GdP_5O_{14} (□); CeP_5O_{14} (△); SiO_2 (▽). Прямая линия — зависимость $t_m \propto T^5$

Gd^{3+} характер зависимости подобен наблюдаемым в Er-содержащих монокристаллах твердых растворов YAG.

Для кримерсова иона Dy^{3+} в YAG зависимость $C(T)$ на рис. 2 приведена только для образца $Y_2Dy_1Al_5O_{12}$ с энергией расщепления основного состояния $\Delta = 1.6$ К. При этом следующий дублет отделен от основного более чем на 80 К и, так же как в предыдущих случаях, находится за пределами области частот НФ, инжектируемых в исследуемый образец.

До настоящего момента мы ограничивались при обсуждении экспериментальных результатов сравнительным анализом длины и времени взаимодействия (захвата) НФ с ДУС парамагнитной природы, оставляя за рамками обсуждения спин-решеточную релаксацию, которая ответственна за обмен с термостатом. Это может быть допустимо только в том случае, когда время спин-решеточной релаксации сравнимо или больше характерного времени экспе-

римента. Если для крамерсовых ионов Er^{3+} , Tb^{3+} [27] и Gd^{3+} [28] при средней температуре измерений транспортных характеристик фононов, $T = 3 \text{ K}$, время спин-решеточной релаксации больше 10^{-3} с , то для иона Dy^{3+} , по данным работ [27, 29], оно составляет 10^{-9} – 10^{-7} с , что намного меньше τ_0 и τ_R . Столь быстрая релаксация затрудняет возможность накопления и дополнительной задержки НФ в исследуемом образце. Этот результат для иона Dy^{3+} в YAG нашел свое отражение среди данных рис. 8, где результаты для всего ряда концентраций YAG:Dy лежат на зависимости, характеризующей упругое рассеяние НФ. Однако процесс взаимодействия НФ с ДУС неупругий, что в условиях эксперимента может приводить к трансформации инжектируемого в образец фононного спектра. Факт малого времени спин-решеточной релаксации (менее τ_0) может исключить возможность наблюдать эффект упорядочения в структуре YAG:Dy при концентрации Dy 25%, «замывая» наблюдаемую для YAG:Re (Lu, Yb) особенность [30, 31]. Судя по результатам, представленным на рис. 8, в условиях эксперимента крамерсов ион Yb^{3+} в структуре YAG также проявляет только упругое рассеяние.

Таким образом, температурные зависимости теплоемкости $C(T)$ и транспортные характеристики фононов тепловых частот в твердых растворах РЗ-гранатов в области гелиевых температур в значительной мере определяются наличием шоттки-подобных низкоэнергетических возбуждений. При этом практически для всех парамагнитных ионов Y-ряда — Gd^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , Ho^{3+} , Er^{3+} (кроме Tm^{3+} , Lu^{3+} и Yb^{3+}) — значения низкотемпературной теплоемкости в нулевом внешнем магнитном поле на 2–3 порядка величины превышают значение фононной (дебаевской) теплоемкости. В то же время эффективность взаимодействия НФ с низкоэнергетическими возбуждениями в модели ДУС помимо концентрации твердого раствора зависит от типа конкретного РЗ-иона, значений и распределения ДУС по энергии, величины составляющей механического момента иона, времени спин-решеточной релаксации. Так, для крамерсова иона Gd^{3+} в монокристаллах твердых растворов YAG:Gd и галлий-гадолиниевом гранате GGG взаимодействие НФ с низкоэнергетическими возбуждениями отсутствует, не наблюдается оно и для всего состава твердых растворов YAG:Dy. Это означает, что рассеяние НФ определяется только упругим рассеянием на позициях замещения $\text{Y} \leftrightarrow \text{Gd}$ и $\text{Y} \leftrightarrow \text{Dy}$. В случае иона Gd^{3+} факт отсутствия взаимодействия в системе НФ–ДУС можно

объяснить нулевой спин-орбитальной составляющей магнитного момента иона. Для крамерсова иона Dy^{3+} спин-орбитальный момент не равен нулю, однако значения спин-решеточной релаксации, согласно различным источникам, на 2–3 порядка величины меньше времени упругого рассеяния НФ. В случае иона Yb^{3+} малое значение эффективного магнитного момента иона не приводит к заметному снятию вырождения основного уровня в нулевом внешнем магнитном поле и, как следствие, для составов YAG:Gd и YAG:Gd,Yb на рис. 8 наблюдается только упругое рассеяние НФ. По этой же причине отсутствует вклад иона Yb^{3+} в низкотемпературную теплоемкость в нулевом внешнем магнитном поле в монокристалле пентафосфата $\text{YbP}_5\text{O}_{14}$ [25]. Для иона Er^{3+} наблюдается эффективное взаимодействие НФ–ДУС. Для некрамерсовых ионов Ho^{3+} и Tb^{3+} природа ДУС — низколежащие штарковские уровни с энергией $\Delta \approx 6 \text{ K}$ относительно основного уровня иона. Высокая эффективность (меньшие значения τ_R при взаимодействии НФ с ДУС) для иона Er^{3+} , в отличие от Ho^{3+} и Tb^{3+} , при близких значениях магнитного момента обусловлена широким распределением значений энергии ДУС по спектру, что характерно для крамерсовой природы иона, когда локальное магнитное поле на позиции иона определяется разноудаленными соседями Er.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-07-00191).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Nagata, H. Sasaki, K. Suzuki et al., J. Phys. Chem. Sol. **62**, 1123 (2001).
2. K. Kamazawa, D. Louca, R. Morinaga et al., Phys. Rev. B **78**, 064412 (2008).
3. Е. В. Шевченко, Е. В. Чарная, Е. Н. Хазанов и др., ФТТ **59**, 717 (2017).
4. E. V. Shevchenko, E. V. Charnaya, M. K. Lee et al., Phys. Lett. A **381**, 330 (2017).
5. Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов и др., ЖЭТФ **154**, 826 (2018).
6. А. Абрагам, Б. Блيني *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, т. 1, Мир, Москва (1972).

7. В. М. Микушев, Е. В. Чарная, *Ядерный магнитный резонанс в твердом теле*, Изд-во Санкт-Петербургского ун-та (1995).
8. Е. Н. Хазанов, А. В. Таранов, Е. В. Шевченко и др., *ЖЭТФ* **148**, 56 (2015).
9. А. А. Каминский, *Лазерные кристаллы*, Наука, Москва (1975).
10. E. V. Shevchenko, E. V. Charnaya, E. N. Khazanov et al., *J. Alloys Comp.* **717**, 183 (2017).
11. Е. В. Чарная, Е. В. Шевченко, Е. Н. Хазанов и др., *Радиотехника и электр.* **64**, 819 (2019).
12. С. Н. Иванов, А. Г. Козорезов, А. В. Таранов и др., *ЖЭТФ* **100**, 1591 (1991).
13. S. N. Ivanov, E. N. Khazanov, T. Paszkiewicz et al., *Z. Phys. B* **99**, 535 (1996).
14. С. Н. Иванов, Е. Н. Хазанов, *ЖЭТФ* **88**, 294 (1985).
15. И. Б. Левинсон, *Письма в ЖЭТФ* **37**, 157 (1983).
16. Д. В. Казаковцев, И. Б. Левинсон, *Письма в ЖЭТФ* **27**, 194 (1978).
17. A. Kushino, Y. Aoki, N. Y. Yamasaki et al., *J. Appl. Phys.* **90**, 5812 (2001).
18. Е. И. Саламатов, *ФТТ* **44**, 5, 935 (2002).
19. S. N. Ivanov, E. N. Khazanov, A. G. Kozorezov et al., *Phys. Lett. A* **159**, 279 (1991).
20. G. A. Slack and D. W. Oliver, *Phys. Rev. B* **4**, 592 (1971).
21. И. Е. Лезова, О. В. Карбань, А. В. Таранов и др., *ЖЭТФ* **157**, 90 (2020).
22. С. Н. Иванов, А. Г. Козорезов, Е. Н. Хазанов и др., *ЖЭТФ* **100**, 1591 (1991).
23. J. B. Gruber, D. K. Sardar, B. Zandi et al., *J. Appl. Phys.* **93**, 3137 (2003).
24. Ю. И. Воронько, А. А. Соболев, *Труды ФИАН* **98**, 41 (1977).
25. И. Е. Лезова, Е. И. Саламатов, А. В. Таранов и др., *ЖЭТФ* **156**, 918 (2019).
26. Е. И. Саламатов, А. В. Таранов, Е. Н. Хазанов, *ЖЭТФ* **148**, 308 (2015).
27. G. H. Larson and C. D. Jeffries, *Phys. Rev. B* **141**, 461 (1966).
28. V. A. Atsarkin, V. V. Demidov, G. A. Vasneva et al., *Phys. Rev. B* **61**, R14944(R) (2000).
29. J. C. Gill, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 1066 (1963).
30. С. Н. Иванов, Е. Н. Хазанов, А. В. Таранов, *Письма в ЖЭТФ* **40**, 20 (1984).
31. P. Y. Efitsenko, E. N. Hazanov, S. N. Ivanov et al., *Phys. Lett. A* **147**, 135 (1990).

ОБ ОЦЕНКЕ ПАРАМЕТРОВ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ–ПАР МЕТАЛЛОВ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИЗОЭНТРОПИЧЕСКОМУ РАСШИРЕНИЮ УДАРНО-СЖАТЫХ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ

*А. Н. Емельянов**, *Д. В. Шахрай*, *В. В. Ким*

*Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 7 августа 2020 г.,
после переработки 21 августа 2020 г.
Принята к публикации 24 августа 2020 г.

Представлены результаты экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов (Cu, W, Nb), на основании которых были определены термодинамические параметры и электропроводность. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что некоторые пористые металлы после ударного сжатия и расширения имеют двухфазную структуру. Это существенно меняет характер испарения и оценку параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар, полученную из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов, а также объясняет большое различие в оценках параметров критической точки для большой группы металлов (U, W, V, Co, Mo, Ta и др.), полученных различными методами.

DOI: 10.31857/S0044451021010107

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1], посвященной оценкам параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар урана, обсуждается большое различие этих оценок, полученных разными методами (с помощью калорических и термических уравнений состояния). Авторы работы [1] указывают на то, что эта проблема присуща целой группе металлов (U, W, V, Co, Mo, Ta), «плохих» по терминологии авторов, в отличие от «хороших» металлов (Al, Cu, Pb, Cs), у которых эти оценки, полученные разными методами, практически совпадают. В настоящей работе на основании полученных экспериментальных данных по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов обсуждаются причины сильного различия в оценках параметров критической точки «плохих» металлов, полученных различными методами.

Метод изоэнтропического расширения ударно-сжатых материалов на протяжении длительного

периода используют для исследования термодинамических свойств металлов в околоскритической области фазового перехода жидкость–пар [2–5]. Эта экспериментальная методика, в отличие от экспериментов по электрическому взрыву проводников [6–9], дает удовлетворительную воспроизводимость результатов от эксперимента к эксперименту. Пористые образцы в экспериментах по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых материалов используют для получения околоскритических состояний с помощью ударно-волновых генераторов сравнительно небольшой мощности и в плоской геометрии. Это позволяет проводить одномерные гидродинамические расчеты и оценивать термодинамические параметры исследуемых материалов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

В этой работе были проведены эксперименты по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов (меди, вольфрама, ниобия) в плоской геометрии. На рис. 1 представлена схема экспериментальной сборки. Образцы располагались на стальном дне кюветы. Ударное сжатие осуществля-

* E-mail: emelyanov@fcp.ac.ru

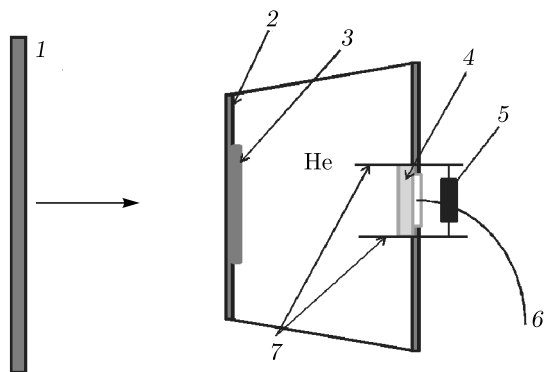


Рис. 1. Схема экспериментальной сборки для исследования термодинамических параметров и электропроводности металлов после ударного сжатия и расширения в гелиевую среду: 1 — ударник; 2 — дно; 3 — образец; 4 — окно; 5 — шунт; 6 — кварцевый световод; 7 — электроды

лось стальным ударником, разогнанным продуктами детонации до скоростей 5–7 км/с. Исследуемые образцы после ударного сжатия расширялись в гелиевую среду с различным начальным давлением (от 0.5 до 150 атм.). Излучение от исследуемого образца через кварцевый световод регистрировалось с помощью оптических многоканальных пирометров на основе пин-диодов. Гелий имеет высокий потенциал ионизации, во всех проведенных экспериментах остается прозрачным и позволяет регистрировать излучение с поверхности образца. Скорость ударной волны в гелии определялась оптическим базисным методом [4], т. е. измерялось время между скачком температуры на экспериментальной записи (рис. 2а), связанным с выходом ударной волны на свободную поверхность образца (t_{rel}), и вторым скачком температуры, связанным с взаимодействием ударной волны с окном экспериментальной сборки (t_{int}). Зная расстояние между поверхностью образца и окном экспериментальной сборки, можно определить скорость ударной волны, предполагая, что она постоянна. Массовая скорость и конечное давление расширения металла рассчитывались с помощью уравнения состояния гелия, основанного на химической модели плазмы [10].

В экспериментах использовали плоские пористые образцы меди ($m = 2.3$), ниобия ($m = 1.56$) и вольфрама ($m = 2.6, 3.1$), средний размер частиц для всех материалов около 10 мкм, пористость $m = \rho_0/\rho$ (ρ — плотность образца, ρ_0 — плотность при нормальных условиях). Образцы представляли собой диски диаметром 15–20 мм и толщиной 300–400 мкм, которые изготавливались прессованием исходного порошка до необходимой конечной пористо-

сти в стандартной пресс-форме и методом склеивания металлических порошков спиртовым раствором поливинилбутираля с последующим отжигом (содержание клея в образце после отжига составляло 0.05 % по массе). Для регистрации электропроводности расширенных металлов в экспериментальную сборку были введены электроды. В эксперименте через электроды пропускался импульс тока 9.5 А и регистрировалось падение напряжения на электродах. Подробно методика определения электропроводности описана в работе [11].

На рис. 2 представлены записи изменений сопротивления меди и напряжения разбаланса измерительного моста для вольфрама. В работе [11] были проведены измерения электропроводности расширенной меди и получена зависимость электропроводности от плотности. Плотность расширенной меди оценивали по времени контакта исследуемого образца с электродами (t_a) до момента контакт электродов со стальным дном сборки (t_b) (рис. 2). Таким образом, определялось усредненное по толщине образца значение плотности. Такой метод оценки плотности образцов является нестандартным и требует дополнительного пояснения.

Исследуемый образец после ударного сжатия расширяется в газовом барьере (гелии). При контакте образца с измерительными электродами регистрируется падение напряжения, которое меняется до момента взаимодействия измерительных электродов с дном экспериментальной сборки (t_b). В эксперименте регистрируются скорость образца и продолжительность его контакта с измерительными электродами. Одним из ограничений использования этой методики является сопротивление образца. Оно должно быть много больше сопротивления дна экспериментальной сборки.

Вторым существенным обстоятельством при оценке плотности является тот факт, что скорость образца имеет распределение по толщине образца. Экспериментально можно определить только скорость свободной поверхности образца. Для корректной оценки толщины образца и, соответственно, плотности необходимо знать распределение скорости по толщине образца. Чтобы оценить распределение скорости и плотности по толщине образца, было проведено численное моделирование каждого эксперимента с помощью одномерного гидрокода, в основе которого лежит модификация численного метода индивидуальных частиц [12]. Метод позволяет рассчитывать сложные течения с множеством границ раздела, большими градиентами плотности и давления. Для замыкания

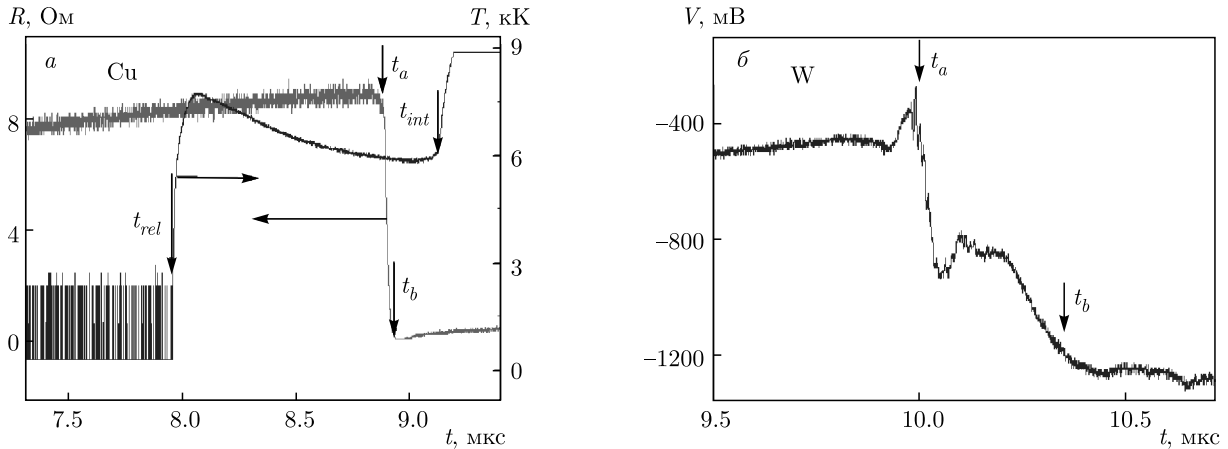


Рис. 2. а) Яркостная температура, полученная из экспериментальной записи интенсивности излучения для длины волны 900 нм, и электрическое сопротивление медного образца (конечное давление 1.3 ГПа, начальная пористость $m = 2.3$). б) Напряжение V разбаланса измерительного моста при измерении электрического сопротивления вольфрама (конечное давление 0.325 ГПа, начальная пористость $m = 3.1$)

системы уравнений Эйлера и определения термодинамических параметров использовались уравнения состояния из работ [13, 14]. Результаты расчета использовали для оценки толщины образца и функции распределения плотности во время контакта образца с измерительными электродами. Плотность оценивали по формуле

$$\rho = \rho_0 d_i \left(m \int_{t_a}^{t_b} U dt \right)^{-1}, \quad (1)$$

где d_i — начальная толщина образца, U — массовая скорость. Гидродинамический расчет позволяет определить функцию распределения скорости по толщине образца (рис. 3), затем эта функция нормируется на определяемую из эксперимента массовую скорость свободной поверхности образца. Разные слои образца имеют разную скорость, и плотность образца также неоднородна по толщине (рис. 3). Для оценки плотности образца вблизи свободной поверхности брали отношение плотности на свободной поверхности к усредненной плотности из гидродинамического расчета и умножали на плотность, полученную из экспериментальных данных по формуле (1).

Результаты оценки плотности ρ для меди для разных давлений P в области входа изоэнтропы в двухфазную область представлены на рис. 4а. Имеет место хорошее согласие с расчетными значениями плотности. Хорошо виден перегиб на кривой в координатах P – ρ . Точка перегиба по давлению совпадает с точкой перегиба на диаграммах меди в координатах P – U (рис. 4б) и P – T (рис. 5).

Аналогичным способом была проведена оценка плотности для вольфрама и ниобия, однако получено сильное различие (в 3–4 раза) оценки плотности на основе экспериментальных данных в сравнении с оценкой с помощью гидродинамического расчета (табл. 1). Одним из объяснений обнаруженного различия в оценках плотности вольфрама из газодинамического расчета и из экспериментальных данных является предположение, что при расширении вольфрама помимо основной фазы расширенного вольфрама образуется еще одна малоплотная фаза. Другими словами, ударно-сжатый пористый вольфрам при расширении представляют собой двухфазную смесь в отличие от меди. Это предположение подтверждают оценки электропроводности расширенного вольфрама, которая (табл. 1) на два порядка ниже электропроводности вольфрама в околоритической области фазового перехода жидкость–пар из литературных источников [15, 16], полученных в экспериментах по электровзрыву.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ранее в наших работах [17, 18] по изоэнтропическому расширению ударно-сжатого пористого ниобия, вольфрама и молибдена в гелиевую среду были получены P – T -диаграммы на изоэнтропах разгрузки и были зарегистрированы anomalously высокие температуры при разгрузке этих металлов в двухфазную область жидкость–пар (рис. 5). Для объяснения наблюдаемых высоких температур была предложена модель, описанная в работе [17]. В

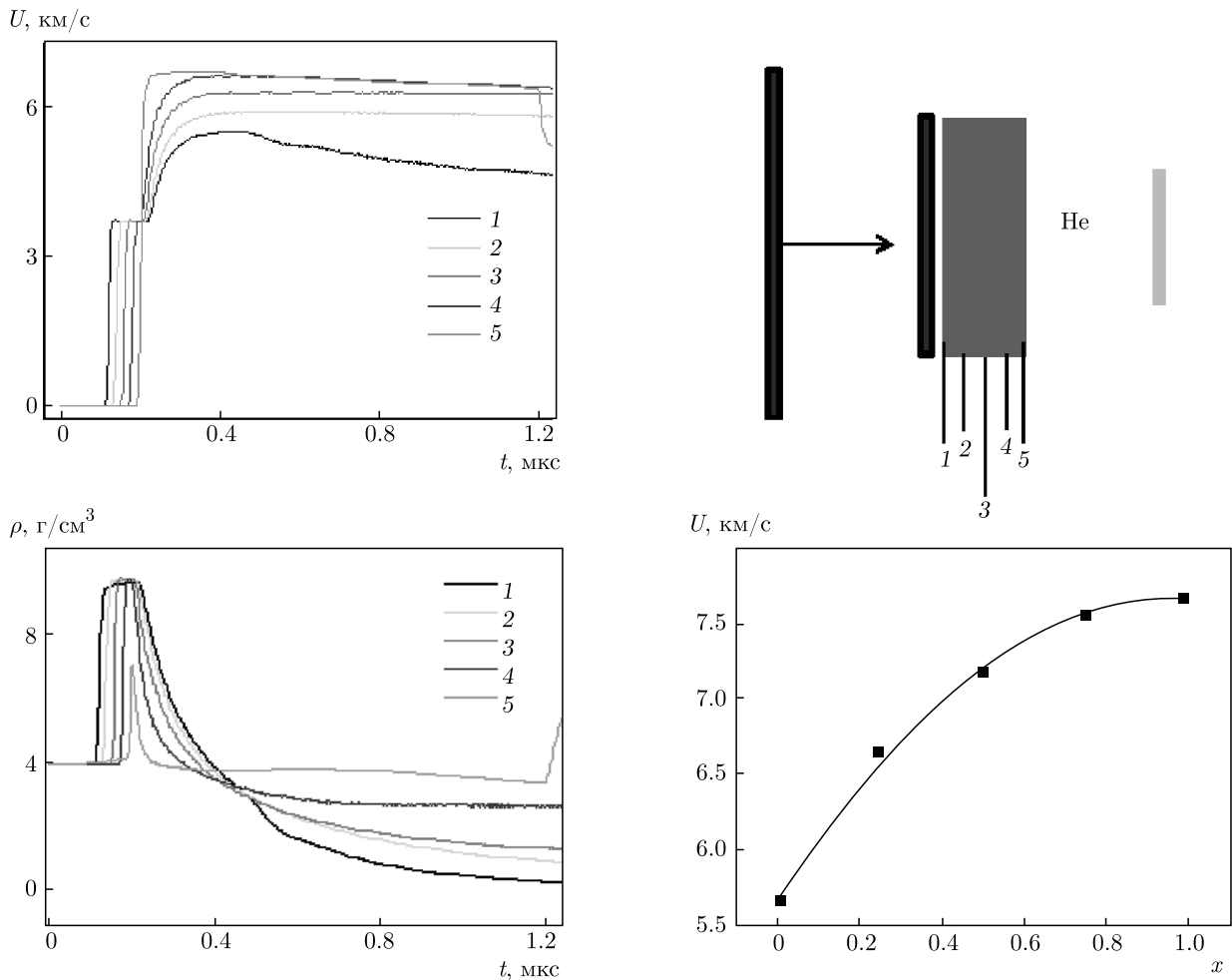


Рис. 3. (В цвете онлайн) Результаты моделирования экспериментов по ударному сжатию и расширению пористой меди ($m = 2.3$). На схеме показаны положения маркеров (1,2,3,4,5) для вывода профилей (зависимости от времени) скорости и плотности при расширении меди в гелиевую среду (0.0185 г/см^3) и изменение скорости в разных точках по толщине образца во время контакта образца с измерительными электродами (x — толщина образца, нормированная на единицу)

рамках этой модели предполагалось, что пористый металл имеет открытые поры, заполненные гелием, которые не схлопываются при ударном сжатии, а газ в порах сжимается до давления сжатия металла в режиме многократного ударного сжатия. В соответствии с этой моделью различие в сжимаемости сжатого в порах газа и окружающего металла приводит при разгрузке к различию в давлении и температуре газа в порах и в металле.

Таким образом, на основании результатов проведенных экспериментов и оценок плотности можно сделать вывод, что ударно-сжатые пористые металлы при расширении могут иметь две фазы — расширенный металл и так называемые горячие точки [18], представляющие собой смесь горячего металла и газа, поскольку при выходе ударной волны на по-

верхность поры возможны струеобразование и вынос металла в газовую среду [19]. Сжатие пористой среды и образование горячих точек хорошо изучено в работах по инициированию детонации пористых взрывчатых веществ [20]. Предполагается, что при сжатии поры имеют место вязкопластические течения на поверхности поры, которые и приводят к образованию горячих точек, т. е. произойдет ли образование таких точек, зависит от вязкости материала.

На рис. 5 видно, что температура меди после ударного сжатия и расширения не превосходит температуру барьерного газа, рассчитанную по уравнению состояний химической плазмы [10]. В то же время для вольфрама, ниобия и молибдена после ударного сжатия и расширения при разгрузке в двух-

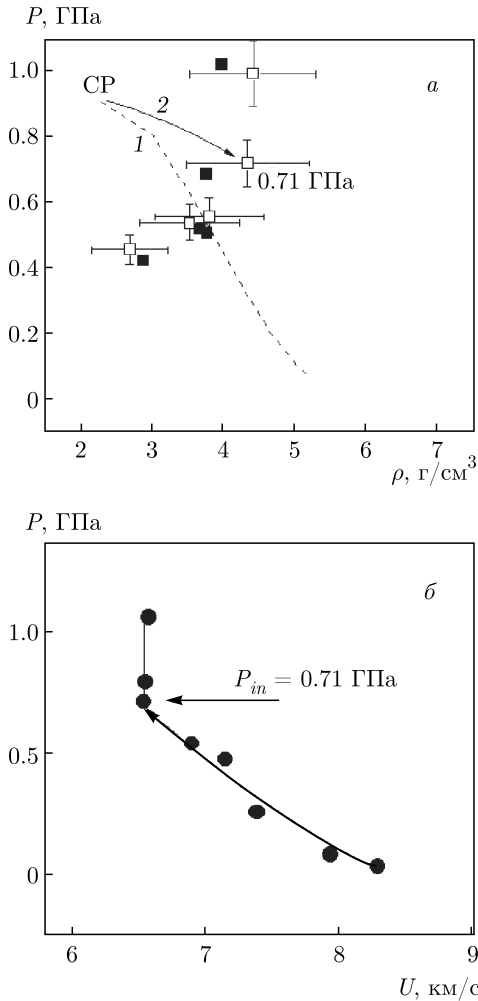


Рис. 4. а) P - ρ -диаграмма изоэнтропы меди ($m = 2.3$) после ударного сжатия и расширения в гелиевую среду, СР — критическая точка [4]; 1 — бинодаль [4]; 2 — точка входа изоэнтропы в двухфазную область (экспериментальные данные); □ — эксперимент; ■ — расчет; б) P - U -диаграмма изоэнтропы меди ($m = 2.3$)

фазную область жидкость–пар были зарегистрированы аномально высокие температуры. В однофазной области (область сверхкритического флюида) регистрируемая температура близка к температуре барьерного газа для всех металлов. Одним из свойств сверхкритических флюидов является способность сорбировать газы. Вероятно, горячий газ растворяется в металле, горячие точки не образуются, и высокая температура не регистрируется при разгрузке в однофазную область [18]. Также обращает на себя внимание тот факт, что регистрируемая температура поверхности образца близка к температуре барьерного газа в однофазной области. Это связано с гидродинамической неустойчивостью поверхности металла при выходе ударной волны на

свободную поверхность и перемешиванием металла с барьерным газом [19, 21], в результате чего вблизи поверхности металла формируется излучающий слой с температурой, близкой к температуре барьерного газа.

Такого рода особенности при ударном сжатии и расширении пористых металлов присущи не только нашим экспериментам. Так, в работах [3–5, 22, 23] для достижения околоскритических состояний фазового перехода жидкость–пар металлов также использовались пористые образцы, а границ двухфазной области достигали при разгрузке в газовые барьеры. Однако в этих экспериментах регистрировались, как правило, только динамические характеристики, т. е. экспериментально были получены P - U -диаграммы изоэнтроп расширения в околоскритической области фазового перехода жидкость–пар. На рис. 6 представлены такие диаграммы для молибдена по данным разных авторов [17, 22]. Экспериментальные точки лежат существенно выше расчетных значений, полученных с помощью моделирования и широкодиапазонных уравнений в предположении, что при ударном нагружении сжатие происходит до беспористого состояния. Для изоэнтроп изначально пористых вольфрама и урана [5, 18, 23], так же как и для молибдена, на P - U -диаграмме зарегистрировано несовпадение экспериментально полученных точек и расчетных кривых, полученных с помощью уравнений состояния при расширении в двухфазную область. В экспериментах по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов, как установлено в работе [17], при скоростях ударника ударно-волнового генератора 5–7 km/s имеет место неполное сжатие пор и при расширении кроме расширенного металла существует вторая фаза, в которой при расширении давление выше, чем в металле (так как газ и металл имеют разную динамическую жесткость и, расширяясь, металл разгружается быстрее, чем газ). Наличие второй фазы с избыточным давлением приводит к более высокой скорости расширения, что мы и наблюдаем на P - U -диаграммах расширенных металлов.

При конструировании широкодиапазонных уравнений состояния (см., например, работы [4, 10, 11]) используют различные экспериментальные данные, в том числе по адиабатическому нагреву металлов (электровзрыв). Но при описании двухфазной области в этих уравнениях состояния опираются на эксперименты по изоэнтропической разгрузке ударно-сжатых пористых металлов (как правило, изоэнтропы в этих экспериментах достигают

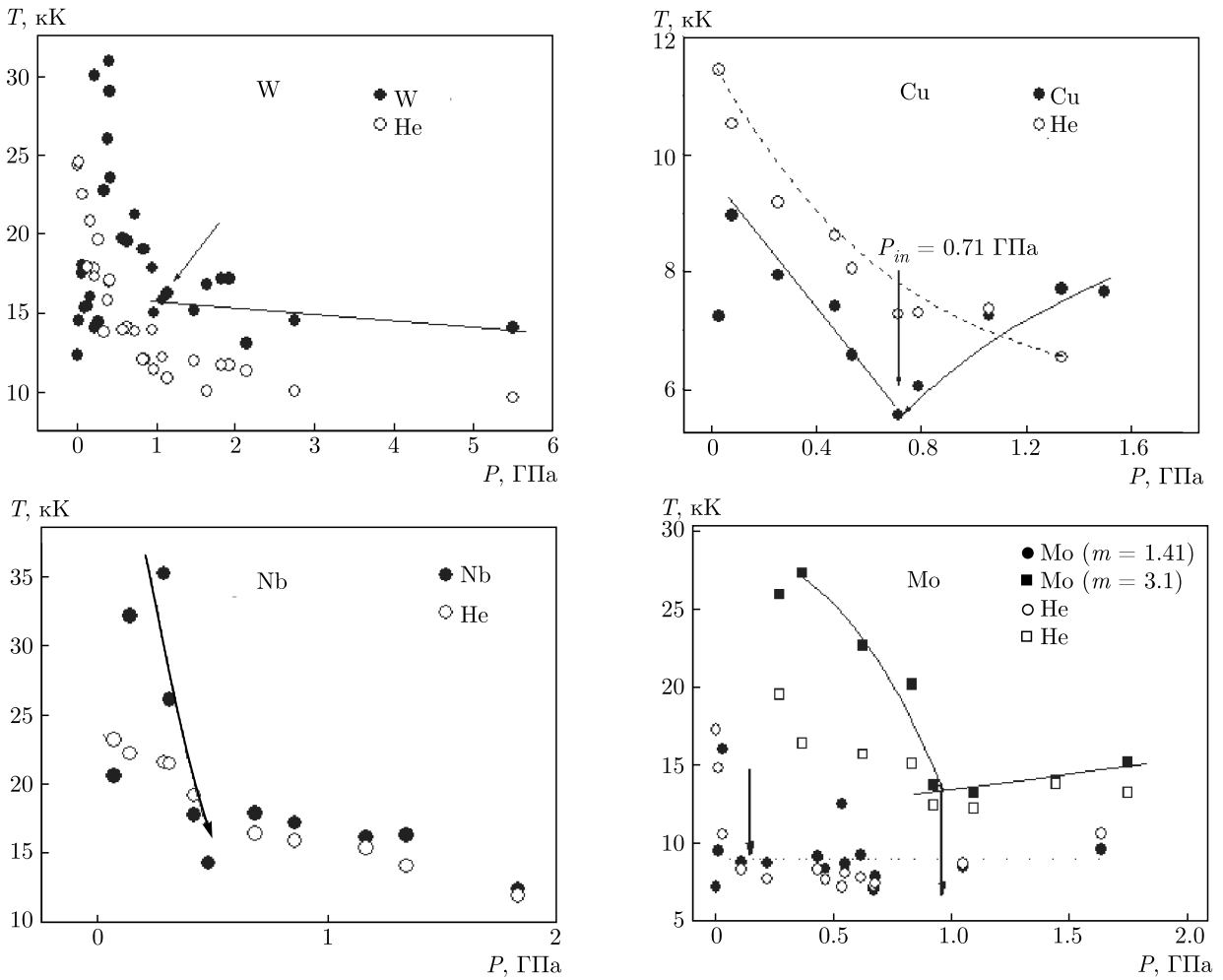


Рис. 5. P-T-диаграммы изоэнтропы расширения меди ($m = 2.3$), вольфрама ($m = 3.04$) [18], ниобия ($m = 1.56$) [18], молибдена ($m = 3.1, 1.41$) [18] и результаты расчета температуры барьерного газа с помощью уравнения состояния химической плазмы [10]. Стрелками отмечен вход изоэнтроп в двухфазную область

Таблица 1. Зависимости давления и электропроводности от плотности для расширенных вольфрама и ниобия

Металл	m	Эксперимент		Расчет		Удельная электропроводность, $(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$
		$\rho, \text{г/см}^3$	$P, \text{ГПа}$	$\rho, \text{г/см}^3$	$P, \text{ГПа}$	
W	2.68	1.47	0.28	7.05	0.38	—
	2.53	2.53	0.29	6.83	0.33	—
	2.58	3.93	0.38	6.87	0.432	—
	3.1	2.34	1.36	7.62	0.924	182
	3.07	3.04	1.39	7.04	0.99	281
	3.1	1.08	0.325	4.94	0.25	154
Nb	1.87	1.31	0.458	4.81	0.1	—

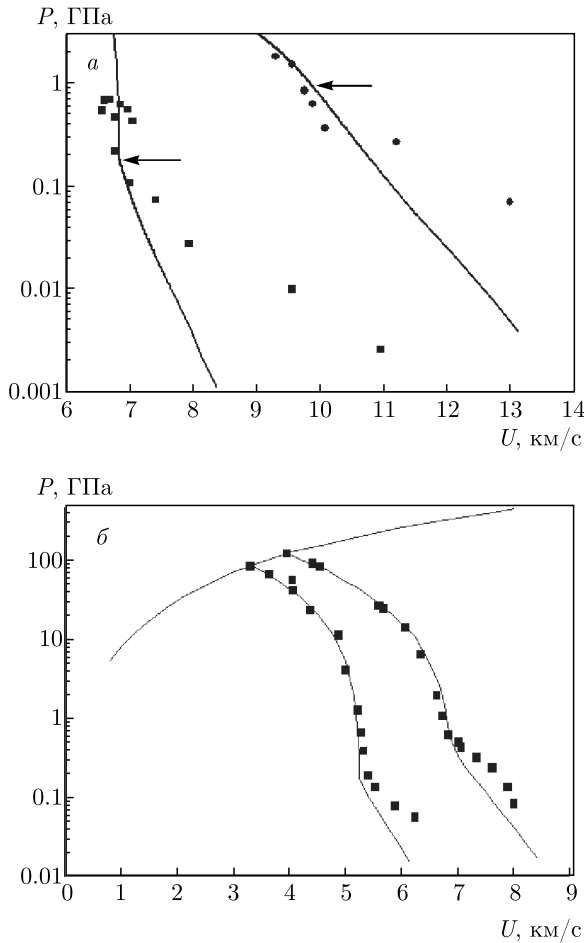


Рис. 6. P - U -диаграммы изоэнтроп расширения молибдена: а) [17]: ● — $m = 3.1$; ■ — $m = 1.41$; сплошные кривые — расчет по уравнению состояний; стрелками отмечена точка входа изоэнтропы в двухфазную область. б) [14]: 1 — $m = 2.31$, экспериментальные точки на изоэнтропах расширения из работы [22], линии — расчет по уравнению состояний из работы [14]

двухфазной области при разгрузке в газовые барьеры [3–5, 22, 23]). Вероятно, в «плохих» металлах при ударном сжатии их из пористого состояния и при расширении образуются две фазы (так же как и в наших экспериментах), которые имеют разные температуры и плотности. Наличие двух фаз при расширении ударно-сжатых пористых металлов в околокритической области фазового перехода жидкость–пар существенно меняет характер испарения и параметры критической точки.

В работе [24] методом квантовой молекулярной динамики (КМД) представлены расчеты термодинамических свойств расширенного вольфрама, в том числе в околокритической области фазового перехода жидкость–пар. Дана оценка темпера-

туры и давления в критической точке, которая существенно ниже оценки, полученной из полуэмпирических уравнений состояния [13, 14], опирающихся при описании двухфазной области жидкость–пар на эксперименты по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов [3, 5]. Можно предположить, что в экспериментах по изоэнтропическому расширению ударно-сжатого изначально пористого вольфрама при расширении в околокритической области фазового перехода жидкость–пар происходит расслоение на две фазы — расширенный вольфрам и фаза вольфрам + гелий, которая имеет более высокую температуру и более низкую плотность по сравнению с температурой и плотностью расширенного вольфрама, полученных с помощью гидродинамического моделирования с использованием широкодиапазонных уравнений состояния [13, 14], а также более низкую (в 100 раз) электропроводность по сравнению с экспериментами по электровзрыву [15, 16]. Эта ситуация аналогична фазовым переходам в двухкомпонентных смесях [25] или случаю, когда при испарении происходит расслоение вещества на две или большее количество фаз. При этом, как правило, имеет место неконгруэнтное испарение [26], и кривая сосуществования фаз жидкость–пар на P - T -диаграмме — это не линия, которая заканчивается в критической точке, а целая область сосуществования жидкости и пара [25, 26].

Таким образом, можно предположить, что при изоэнтропическом расширении ударно-сжатого пористого вольфрама происходит неконгруэнтное испарение. Это предположение позволяет объяснить, почему оценки, полученные из экспериментов по электрическому взрыву и с помощью моделирования методом КМД, отличаются от оценок, полученных из уравнений состояния, опирающихся на эксперименты по ударному сжатию и расширению пористого вольфрама. В случае моделирования методом КМД и экспериментов по электровзрыву проволоки и фольги имеет место конгруэнтное испарение. А при ударном сжатии и расширении металла в газовые барьеры при сжатии пор, заполненных барьерным газом, формируется двухфазная структура, и испарение является неконгруэнтным. Поэтому оценки параметров критической точки существенно различаются [1, 24].

В работе [1] сравнивали P - T -диаграммы урана и двуокиси урана. При конгруэнтном испарении кривая насыщения на P - T -диаграмме в координатах $\lg P$ и $1/T$ — прямая линия, которая заканчивается в критической точке. При неконгруэнтном испарении (например, для UO_2 [26]) имеет место отклонение от

Таблица 2. Оценки параметров критической точки вольфрама

P_c , ГПа	T_c , К	Ссылка
1.18	15750	[13]
1.2 ± 0.15	15900 ± 700	[18]
0.6 ± 0.09	12200 ± 200	[24]
0.58 ± 0.05	13660 ± 800	[27]
0.337 ± 0.085	13400 ± 1400	[9]
1.3	12500	[8]
1.1 ± 0.2	16000 ± 1000	[7]
0.745	12400	[29]
1.48	18540	[28]
	13500 ± 1000	Наша оценка

прямой, и критическая точка не лежит на прямой. Для вольфрама кривая насыщения в координатах $\lg P$ и $1/T$ представлена в работе [24]. Оценки параметров критической точки, полученные в этой работе методом КМД, и некоторые оценки по данным из экспериментов по электровзрыву лежат на прямой, а оценки параметров критической точки, полученные с помощью полуэмпирических уравнений состояния, опирающихся на эксперименты по изоэнтропическому расширению, отклоняются от прямой в координатах $\lg P$ и $1/T$. Это подтверждает предположение о неконгруэнтности испарения при изоэнтропическом расширении ударно-сжатых пористых металлов.

В табл. 2 представлены оценки параметров критической точки вольфрама, полученные разными авторами. Оценки параметров критической точки методом КМД, оценки газотермическим методом на образцах в виде фольги [27] и большинство оценок, полученных из экспериментов по электровзрыву металлических проволочек (например, при оценке температуры критической точки [8, 9, 29]), близки. В то же время они отличаются от оценок, полученных из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатого пористого вольфрама и из уравнений состояния, опирающихся на такие эксперименты [13, 18].

При малом начальном давлении «плохие» металлы ведут себя как хорошие, малоплотная фаза не образуется, испарение конгруэнтное. На приведенном выше рис. 5 хорошо видно, что при малых давлениях регистрируемые температуры уменьшаются. Если предполагать, что при расширении металлы

достигают спинодали (так как скорости расширения высокие), то по регистрируемым температурам при малых давлениях можно оценить температуру критической точки металла при конгруэнтном испарении, поскольку температура на спинодали даже при нулевом давлении (T_0) отличается от температуры критической точки (T_c) на величину около 10 % ($T_0 = 0.9T_c$) [30]. Полученная таким образом оценка температуры критической точки вольфрама (табл. 2) близка к температуре критической точки, полученной из экспериментов по электровзрыву металлических проволочек [8, 9, 29], газотермическим методом [27] и методом КМД [24].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Большинство данных о границах двухфазной области жидкость–пар для металлов получены методом изоэнтропического расширения на пористых образцах и при разгрузке в газовые барьеры [3]. Результаты экспериментов при расширении ударно-сжатого пористого вольфрама свидетельствуют о том, что регистрируется состояние, которое имеет более высокую температуру и более низкую плотность по сравнению с температурой и плотностью расширенного вольфрама, полученных с помощью моделирования с использованием широкодиапазонных уравнений состояния [13, 14], а также более низкую электропроводность по сравнению с данными экспериментов по электровзрыву. Это позволяет предположить, что в экспериментах по изоэнтропическому расширению ударно-сжатого изначально пористого вольфрама при расширении в околоскритической области фазового перехода жидкость–пар происходит расслоение на две фазы и имеет место неконгруэнтное испарение. Большое различие в оценках параметров критической точки вольфрама из литературных источников можно объяснить различными механизмами испарения вольфрама в зависимости от способа получения околоскритических состояний фазового перехода жидкость–пар.

Для пористого ниобия после ударного сжатия и расширения также получена плотность ниже расчетной плотности. Можно предположить, что для всех «плохих» [1] металлов оценки параметров критической точки, полученные из полуэмпирических уравнений состояния, опирающиеся на эксперименты по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов, будут выше по температуре и давлению в отличие от оценок,

полученных методом КМД, из-за формирования двухфазной структуры, образующейся при ударном сжатии пористой среды. Для меди и других «хороших» металлов при ударном сжатии двухфазная структура не образуется, поэтому оценки, полученные разными методами, совпадают.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Госзадания № 0089-2019-0001 «Экспериментальное и теоретическое исследование теплофизических характеристик и процессов в веществе в экстремальных состояниях» и при поддержке гранта Президиума РАН в рамках Программы «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии» и гранта Министерства науки и высшего образования «Энергетика экстремальных состояний вещества».

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Iosilevsky and V. Gryaznov, *J. Nucl. Mater.* **344**, 30 (2005).
2. В. Е. Фортов, И. Т. Якубов, *Неидеальная плазма*, Энергоатомиздат, Москва (1994).
3. М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, Р. Ф. Трунин, В. Е. Фортов, *Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии*, Изд-во ИХФЧ РАН, Черноголовка (1996).
4. Л. В. Альтшуллер, А. В. Бушман, М. В. Жерноклетов, *ЖЭТФ* **78**, 741 (1980).
5. Л. Ф. Гударенко, О. Н. Гущина, М. В. Жерноклетов, А. Б. Медведев, Г. В. Симаков, *ТВТ* **38**, 1185 (2000).
6. С. В. Коваль, Н. И. Кускова, С. И. Ткаченко, *ТВТ* **35**, 876 (1997).
7. A. D. Rakhel, A. Kloss, and H. Hess, *Int. J. Thermophys.* **23**, 1369 (2002).
8. H. Hess, A. Kloss, A. Rakhel, and H. Schneidenbach, *Int. J. Thermophys.* **20**, 1279 (1999).
9. W. Fucke and U. Seydel, *High Temp.–High Press.* **12**, 419 (1980).
10. В. К. Грязнов, *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, Вводный том 1 под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000).
11. A. N. Emelyanov, D. V. Shakh-ray, and A. A. Golyshchev, *High Temp.–High Press.* **46**, 381 (2017).
12. В. В. Ким, Дисс. канд. физ.-мат. наук, ИИХФ РАН, Черноголовка (2005).
13. V. E. Fortov and I. V. Lomonosov, *Open Plasma Phys. J.* **3**, 122 (2010).
14. I. V. Lomonosov, Дисс. док. физ.-мат. наук, ИИХФ РАН, Черноголовка (2000).
15. A. W. DeSilva and G. B. Vunni, *Phys. Rev. E* **83**, 037402 (2011).
16. A. Kloss, T. Motzke, R. Grossjohann, and H. Hess, *Phys. Rev. E* **54**, 5851 (1996).
17. A. N. Emelyanov, A. A. Pyalling, and V. Ya. Ternovoi, *Int. J. Thermophys.* **26**, 1985 (2005).
18. A. N. Emelyanov, *High Temp.–High Press.* **44**, 483 (2015).
19. Н. А. Иногамов, А. Ю. Демьянов, Э. Е. Сон, *Гидродинамика перемешивания*, Изд-во МФТИ, Долгопрудный (1999).
20. С. А. Бордзиловский, С. М. Караханов, В. Ф. Лобанов, *Горение и взрыв* **23**, 132 (1987).
21. А. А. Пяллинг, В. К. Грязнов, С. В. Квитов, Д. Н. Николаев, В. Я. Терновой, А. С. Филимонов, В. Е. Фортов, М. Дорник, Д. Х. Х. Хоффман, К. Штокль, *ТВТ* **36**, 33 (1998).
22. М. В. Жерноклетов, А. Б. Медведев, В. Г. Симаков, *Хим. физика* **14**, 49 (1995).
23. М. В. Жерноклетов, *ТВТ* **36**, 231 (1998).
24. D. V. Minakov, A. M. Paramonov, and P. R. Levashov, *Phys. Rev. B* **97**, 024205 (2018).
25. Р. Рид и Т. Шервуд, *Свойства газов и жидкостей*, Наука, Москва (1971).
26. C. Ronchi, I. L. Iosilevski, and E. Yakub, *Equation of State of Uranium Dioxide*, Springer, London (2004).
27. V. Ya. Ternovoi, V. E. Fortov, A. S. Filimonov, A. A. Pyalling, D. N. Nikolaev, and Y. E. Gordon, *High Temp.–High Press.* **34**, 73 (2002).
28. D. A. Young and B. J. Alder, *Phys. Rev. A* **3**, 364 (1971).
29. E. M. Apfelbaum and V. S. Vorob'ev, *J. Phys. Chem. B* **113**, 3521 (2009).
30. В. П. Скрипов, *Метастабильные жидкости*, Наука, Москва (1972).

ХАРАКТЕРИСТИКИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ МЕХАНИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ В ЛОТКЕ

В. Г. Полников^{a*}, Ф. Цяо^b

^a *Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук
117019, Москва, Россия*

^b *First Institute of Oceanography of Ministry of Natural Resources
266061, Qingdao, China*

Поступила в редакцию 31 марта 2020 г.,
после переработки 18 июля 2020 г.
Принята к публикации 18 июля 2020 г.

В ветроволновом лотке выполнены измерения трех компонент скорости течений u_i ($i = x, y, z$), индуцированных механическими волнам, которые генерировались волнопродуктором для трех вариантов доминантных частот f_0 и набора значительных высот волн H_s для каждой частоты. С целью изучения степени анизотропии индуцированной волнами турбулентности и оценивания скорости ее диссипации ε рассчитаны стандартные отклонения σ_i и частотные спектры $S_i(f)$ для компонент измеренных течений. По предложенной процедуре фильтрации рассчитаны характеристики σ_{iF} и $S_{iF}(f)$ для турбулентных составляющих течений, в которых отфильтрованы волновые движения. Показано, что величины σ_i проявляют сильную анизотропию, степень которой варьирует с изменением параметров волн. Для турбулентных составляющих течений имеет место соотношение $\sigma_{xF} \approx \sigma_{yF} \geq (1.5-3)\sigma_{zF}$, означающее существенную анизотропию турбулентности в случаях горизонтального и вертикального движений. Полуфеноменологический подход позволяет для величин σ_{iF} найти аналитическое представление через параметры волн. Спектры турбулентных составляющих для горизонтальных компонент скорости $S_{xF}(f)$ и $S_{yF}(f)$ в области частот $f > 2f_0$ близки по форме и интенсивности и, как правило, имеют степенной закон убывания интенсивности « -1.6 ± 0.1 ». В том же диапазоне частот интенсивность спектров вертикальной компоненты скорости $S_{zF}(f)$ на порядок меньше и убывает по закону « -2.0 ± 0.1 ». Степенные участки трактуются как аналоги колмогоровских спектров, обусловленных передачей энергии от орбитальных движений механических волн вверх по частотам. Предложена феноменологическая модель спектра с законом убывания « -2 », позволяющая по интенсивности степенного участка $S_z(f)$ определять величину скорости диссипации кинетической энергии турбулентности ε . Получены оценки ε и построена ее параметризация. Приводятся обсуждение и возможная интерпретация полученных результатов.

DOI: 10.31857/S0044451021010119

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение динамики течений верхнего слоя воды, на поверхности которой присутствуют механические или ветровые волны, имеет длинную историю, начинающуюся со знаменитой работы Стокса [1] и продолжающуюся в работах Лонге–Хиггинса [2], а также в совокупности работ Ламли и Террея с соавторами [3–5]. Развитие этих исследований за последние полвека подробно описано в недавнем обзоре [6]. Причина такого интереса обусловлена боль-

шим разнообразием физических процессов в системе движений в верхнем слое воды (волны, течения, турбулентность), доступностью различных измерений в такой системе и развитым теоретическим инструментарием, широко представленным, например, в статьях и книгах [1–10]. Кроме того, результаты изучения динамики верхнего слоя востребованы и с практической точки зрения. Процессы в верхнем слое важны для описания циркуляций, влияющих на морскую индустрию, для расчета теплогазообмена атмосферы и океана, для контроля распространения примеси, а также для учета вертикального перемешивания, влияющего на крупномасштабную циркуляцию в целом, а с ней — на погоду и климат Земли [11].

* E-mail: polnikov@mail.ru

Исследование характеристик турбулентности, обусловленной присутствием волновых движений в верхнем слое воды, представляет собой отдельное направление общей тематики, отмеченной выше. Турбулентность в воде реализуется вследствие неустойчивости волновых орбитальных движений, возникающей при больших числах Рейнольдса, в данном случае определяемых соотношением [12] $Re \equiv a^2 \omega_p / \nu$, где a — средняя амплитуда волн, ω_p — частота пика спектра волн, а ν — кинематическая вязкость воды. Если принять, что крутизна гравитационных волн $\delta = ak_p = a\omega_p^2/g$ (g — ускорение силы тяжести, k_p — волновое число пика спектра) на поверхности воды имеет порядок 0.1, то при типичном значении $\nu \approx 10^{-6}$ м²/с величина Re превышает величину 10^3 уже при значениях a более 1 см, т. е. условия возникновения турбулентности, вызванной волнами, легко достижимы. Распространенность явления служит стимулом к широкому эмпирическому и теоретическому изучению турбулентности, индуцированной волнами (см., например, работы [13–21]).

В то же время теоретическое понимание процесса генерации турбулентности волнами пока не до конца ясно. Например, аналитическая теория [16] и численное моделирование [17–19] показывают, что для развития турбулентности под взволнованной поверхностью требуется наличие некоторой затравочной стохастичности течений (фоновой турбулентности). Однако количественное уточнение величины фоновой турбулентности пока не известно, также как не известны точно и зависимости интенсивности наведенной волнами турбулентности от параметров волн и законы ее убывания с глубиной. Учитывая сказанное, далее мы не будем касаться проблемы природы турбулентности, вызванной волнами, сосредоточив внимание на ее эмпирических проявлениях.

Несмотря на значительные успехи, достигнутые к настоящему времени, многие особенности турбулентности, вызванной волнами на воде, требуют дальнейшего изучения. В нашей работе мы ограничимся лишь анализом анизотропии дисперсий компонент скорости в слоях воды, расположенных на глубине порядка десятка высот волн, и связанных с ними спектральных характеристик течений, рассчитанных с целью обнаружения участков спектра колмогоровского типа [7] и оценивания по ним скорости диссипации турбулентности [4–6, 13–15].

В этом направлении следует отметить следующие известные результаты. Наиболее важными из ранних работ являются исследования, проведенные в работах [3–5]. Так, в работе [4] был применен метод линейной фильтрации волновых компонент (в кратком исполнении) и на примере течений, наведенных ветровыми волнами, было показано, что спектры для горизонтальных и вертикальных компонент течений имеют участки степенного убывания вида $S_{z,x}(f) \propto f^{-5/3}$. В работе [3] была обоснована применимость гипотезы «замороженной турбулентности» Тейлора для трактовки указанных спектров как аналогов колмогоровских спектров с целью оценки скорости диссипации турбулентности (СДТ) ε . Детальное исследование СДТ в течениях, наведенных ветровыми волнами в озере Онтарио, было проведено в работе [5]. В частности, в ней была установлена параметризация величины ε от скорости трения u_* , амплитуды a_0 волн на поверхности и глубины z измерений вида

$$\varepsilon = \text{const} \cdot u_*^3 a_0 / z^2. \quad (1)$$

Такая же зависимость была установлена и в лотке [20] при наличии ветровых волн и сильных ветрах. Поиск подобных зависимостей дает ориентир для проверки теоретических моделей типа [16–18], что представляет большой интерес и для случая механических волн на воде.

Относительно анизотропии стандартных отклонений (СтО) компонент скорости течений в ранних работах [3–5] ничего не сказано, поскольку в них эмпирика подтверждала изотропию СтО на глубинах порядка 1–2 м. Позднее эмпирически [19] и численно [18, 19] было показано, что СтО горизонтальных компонент скорости вблизи взволнованной поверхности воды, σ_x и σ_y , не равны между собой. При этом СтО поперечных горизонтальных турбулентных компонент скорости, σ_y , превышают таковые для продольных компонент, σ_x . Наблюдаются и обратные соотношения [21]; есть эмпирические данные и о полной изотропии СтО для всех компонент турбулентных составляющих течений непосредственно под волнами [15]. По-видимому, причина такой неоднозначности кроется в методике выделения самих турбулентных составляющих, т. е. в методике фильтрации волновых движений. Ввиду указанной неоднозначности в описании характера анизотропии наведенной волнами турбулентности этот вопрос нуждается в дальнейшем изучении. При этом существенную роль играет решение задачи о фильтра-

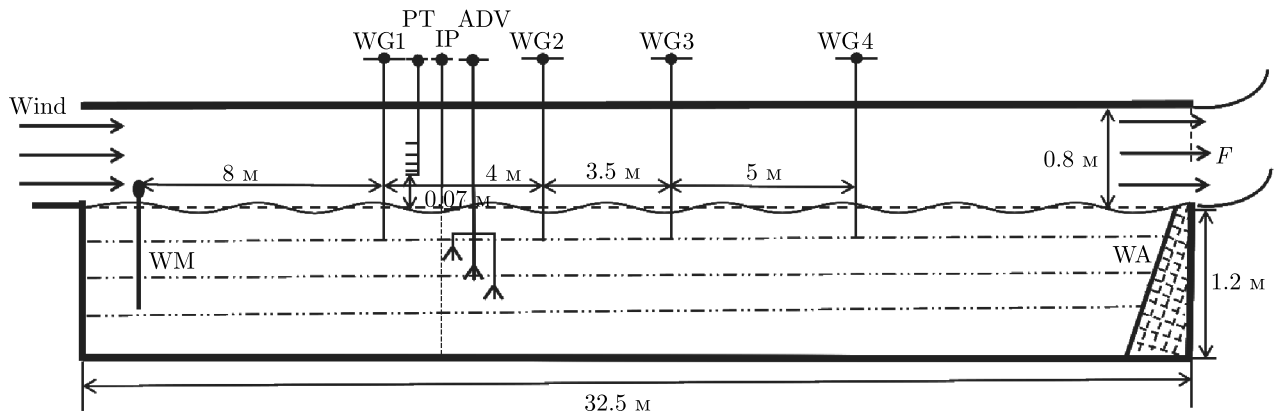


Рис. 1. Эскиз лотка и расположения оборудования: WG — волновые датчики; PT — трубки Пито; ADV — набор акустических доплеровских велосиметров; IP — набор инструментов для вбрасывания в лоток поплавков или красителей; WM — волнопродуктор; WA — волнопоглотитель; F — вентилятор. Внутренняя ширина лотка 1 м

ции волновых движений, который был затронут еще в работе [4], но не раскрыт до конца. Далее мы специально остановимся на этом вопросе.

В отношении спектральных характеристик компонент скорости, $S_i(f)$ ($i = x, y, z$), эмпирические результаты работ [13–15], выполненных в различных лабораторных условиях для механических волн, близки к результатам работ [4, 5]. Отметим только, что в указанных работах изучались лишь продольные компоненты турбулентных составляющих скорости течений, u_x . В высокочастотной области убывания спектров установлены участки вида $S_x(k) \propto k^{-5/3}$ [13] (k — волновое число) или $S_x(f) \propto f^{-5/3}$ [14, 15] (f — циклическая частота), что авторами трактуется как классический спектр Колмогорова — Обухова [7]. Такая трактовка позволила им получить оценки СДТ ε и даже некоторые их зависимости от параметров системы.

Так, в работе [13] была установлена зависимость ε от амплитуды волн a_0 на поверхности воды вида

$$\varepsilon(a_0) \propto a_0^3. \quad (2)$$

В работе [15] при измерениях в системе координат, отслеживающей уровень воды, для монохроматических волн и малых глубин ($|z| < 3a_0$) была установлена зависимость

$$\varepsilon(z) \propto |z|^{-m}. \quad (3)$$

В области гребней для зависимости (3) найдено значение $m = 2$, а в области ложбин — $m = 1/3$. Установлено, что по мере приближения к поверхности воды значение $m = 1$.

В порядке обсуждения следует отметить, что зависимости (2), (3), в отличие от параметризации (1), не полны в силу отсутствия согласованности размерностей их левой и правой частей. Кроме того, обе зависимости получены лишь для глубин z порядка высоты волн a_0 , а оценки параметра m явно привязаны к фазам орбитального движения [15]. Эти результаты неприменимы для описания турбулентности в слое воды под взволнованной поверхностью, имеющем порядок доминантной длины волны $\lambda_p = 2\pi/k_p$. Такая неполнота имеющихся результатов служит стимулом для дальнейших исследований.

В данной работе изучаются указанные выше характеристики течений, наведенных механическими волнами, генерированными волнопродуктором в лотке. Основная цель заключается в выявлении и детальном описании характера анизотропии наведенной волнами турбулентности. Спектральные характеристики течений анализируются на предмет их формы, выявления в ней степенных участков убывания и оценивания по ним СДТ.

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Измерения выполнялись в ветроволновом лотке Первого института океанографии, расположенного в г. Циндао, КНР. Размеры лотка по длине, ширине и высоте составляют $32 \times 1 \times 2$ м³, глубина слоя воды $D = 1.2$ м. Эксперимент выполнялся как для механических волн, генерируемых волнопродуктором,

так и для ветровых волн. Однако, в силу принципиальной разницы в динамике процессов в верхнем слое воды для указанных видов волн, здесь будут приведены результаты только для случая механических волн.

Общая геометрия лотка и расположение оборудования приведены на рис. 1. Для волновых измерений использовались емкостные волновые датчики (WG). Трубки Пито (PT) и три акустических доплеровских velocиметра (ADV) применялись для измерения соответственно профилей ветра и скорости течений. Места расположения датчиков WG1–WG4 далее обозначаются как точки измерений P1–P4.

Исследовались два типа механических волн: регулярные (квазимонохроматические) волны и стохастические волны с широкой спектральной полосой, типа спектров Пирсона–Московица (PM) или JONSWAP (J) [8]. В обоих случаях задавались три доминантные частоты волнопродуктора $f_0 = 1.5, 1.0, 0.7$ Гц, и три–пять значений программируемой значительной высоты волн H_s для каждой частоты f_0 . Измерения проводились при установлении стационарного состояния системы (более 5 мин работы волнопродуктора).

Все волновые записи имели длительность 10 мин и частоту дискретизации 50 Гц. Параллельно проводилась визуальная регистрация степени обрушения волн в процентах (отношение числа обрушившихся гребней к их общему числу, прошедшему за 1–2 мин через контролируемый участок наблюдений размерами порядка метра).

В табл. 1 приведены параметры волн, полученные из оценок спектров возвышений поверхности $S_\eta(f)$. Здесь $a_0 = \sqrt{2 \int S_\eta(f) df}$ — средняя амплитуда волн, f_p — частота пика спектра $S_\eta(f)$, $k_p = (2\pi f_p)^2/g$ — волновое число пика спектра и $\delta = a_0 k_p$ — средняя крутизна волн. Величина B_r — интенсивность обрушений волн, заданная в процентах и отражающая отношение числа обрушившихся гребней к общему числу гребней волн, прошедших через фиксированный участок наблюдения порядка метра за 1–2 мин. Величины H_s и f_0 — параметры волнопродуктора, означающие ожидаемую значительную высоту волн и частоту доминантного пика их спектра. Далее эти параметры будут использованы при параметризации характеристик турбулентности.

Три компоненты скоростей течений u_i ($i = x, y, z$) измерялись акустическими доплеровскими изме-

рителями течений (ADV) на трех горизонтах: $z = -10, -20, -30$ см (ось z направлена вверх с началом отсчета на среднем уровне воды). Частота измерений составляла 100 Гц на глубинах $z = -10, -20$ см и 128 Гц при $z = -30$ см, что вызвано техническими причинами.

Обработка данных измерений проводилась в оболочке MATLAB. Для оценки частотных спектров $S(f)$ использовались методы авторегрессии, обеспечивающие минимальную погрешность [22]. Вследствие огромной величины выборки (более 1000 главных периодов волн), 95% доверительных интервалов для оценок спектров в билогарифмических координатах составляют всего [+10%, -12%]. В силу их малости (по сравнению с изменчивостью спектров $S(f)$ на 4–6 порядков) нанесение этих интервалов на рисунки спектров малоинформативно. Отмеченные интервалы соответствуют стандартным отклонениям для спектральных интенсивностей примерно 3% и 5% [22], что и определяет их точность.

3. МЕТОД ФИЛЬТРАЦИИ ВОЛНОВЫХ КОМПОНЕНТ

На примере регулярной волны, заданной волнопродуктором с параметрами $H_s = 5$ см и $f_0 = 1.0$ Гц, на рис. 2 приведены временные ряды компонент течений $u_x(t)$ и $u_z(t)$ для глубины $z = -10$ см в точке P2 = 12 м. Видно, что волновой характер движений превалирует; на спектре течений он проявляется в виде резкого пика (рис. 3). Интенсивность спектра течения ожидаемо убывает с глубиной, а ширина его пика сужается с ростом $|z|$ в силу затухания волновых компонент (см., например, $S_z(f)$ на рис. 3а).

При этом значение спектра в пике на 4–5 порядков превышает интенсивность $S_z(f)$ на частотах вдали от частоты f_p пика спектра (которая близка к f_0). Для фиксированной частоты f_0 и горизонта z ширина спектра растет с высотой волны H_s (рис. 3б). Очевидно, что для выделения турбулентных составляющих необходима процедура фильтрации волновых движений.

Проблему фильтрации мы решаем следующим образом. Представим скорость u_i в виде суммы:

$$u_i = u_{iW} + u_{iT}, \quad (4)$$

в которой u_{iW} — волновая составляющая скорости, а u_{iT} — турбулентная. Традиционно [7, 8], предполо-

Таблица 1. Номера экспериментов и параметры механических волн двух типов в точке P2 = 12 м

№ эксперимента	H_s , см; Br, %	$f_0 = 1.5$ Гц									
		Регулярные волны				Нерегулярные волны (PM)					
		a_0 , см	f_p , Гц	k_p , рад/м	δ	№ эксперимента	H_s , см; Br, %	a_0 , см	f_p , Гц	$Sk_p S$, рад/м	δ
I	3; 0	1.36	1.49	8.9	0.12	XII	3; 0	0.86	1.13	5.13	0.041
II	5; 5	2.13	1.49	8.9	0.19	XIII	5; 0	1.26	0.98	3.82	0.048
III	7; 30	2.76	1.48	8.9	0.25	XIV	7; 0	1.56	1.01	4.1	0.064
IV	10; 50	3.20	1.48	8.8	0.28	XV	10; 0	1.89	0.79	2.5	0.047
$f_0 = 1.0$ Гц											
		Регулярные волны				Нерегулярные волны (PM)					
	H_s , см; Br, %	a_0 , см	f_p , Гц	k_p , рад/м	δ	№ эксперимента	H_s , см; Br, %	a_0 , см	f_p , Гц	k_p , рад/м	δ
V	3; 0	1.03	1.0	4.0	0.04	Для $H_s < 10$ см нет данных					
VI	5; 0	1.74	1.0	4.0	0.07						
VII	7; 5	2.45	1.0	4.0	0.10	XVI	10; 0	1.90	0.74	2.2	0.042
VIII	10; 20	3.48	1.0	4.0	0.14	XVII	15; 5	2.25	0.70	1.86	0.07
IX	15; 35	5.03	1.0	4.0	0.20	XVIII	15(J); 95	3.42	0.89	3.32	0.11
$f_0 = 0.7$ Гц											
		Регулярные волны				Нерегулярные волны (J)					
	H_s , см; Br, %	a_0 , см	f_p , Гц	k_p , рад/м	δ	№ эксперимента	H_s , см; Br, %	a_0 , см	f_p , Гц	k_p , рад/м	δ , без/ разм.
X	15; 0	3.70	0.7	1.97	0.073	XIX	15(J); 5	2.83	0.71	2.0	0.057
XI	20; 0	4.80	0.7	1.97	0.095	Для $H_s = 20$ см нет данных					

Примечание. Номера экспериментов указаны римскими цифрами; безразмерная величина параметра обрушений гребней волн Br дана с точностью до 5%; сокращения PM и J означают форму спектра, генерированного волнопродуктором (см. разд. 2).

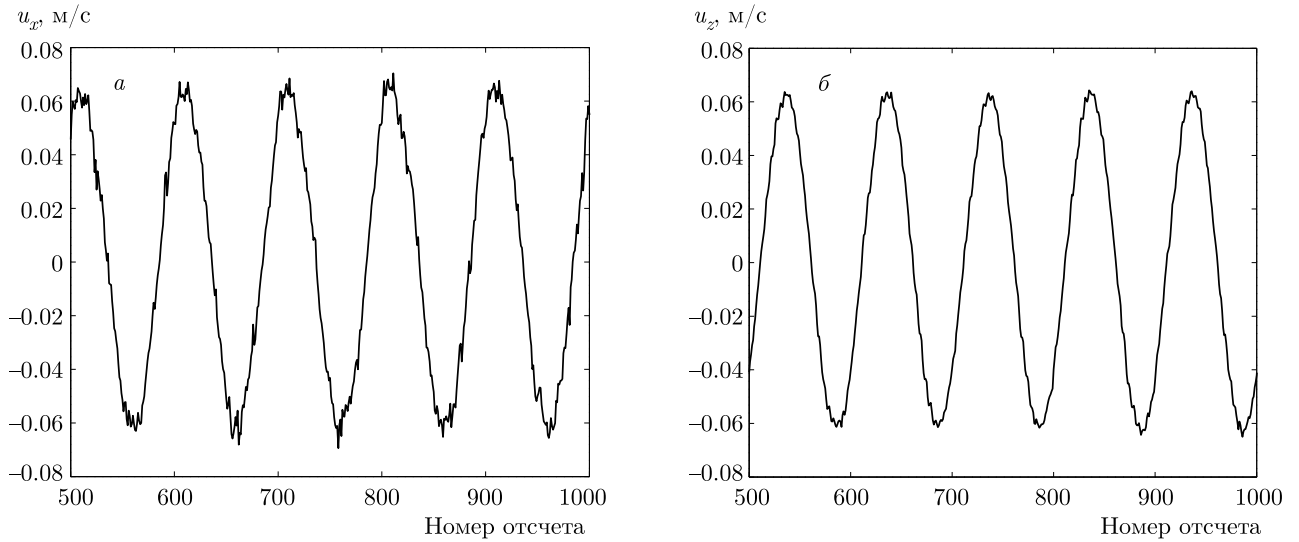


Рис. 2. Временные ряды компонент скорости в точке P2 = 12 м на глубине $z = -10$ см для регулярной волны с параметрами волнопродуктора $H_s = 5$ см и $f_0 = 1.0$ Гц: а — $u_x(t)$; б — $u_z(t)$

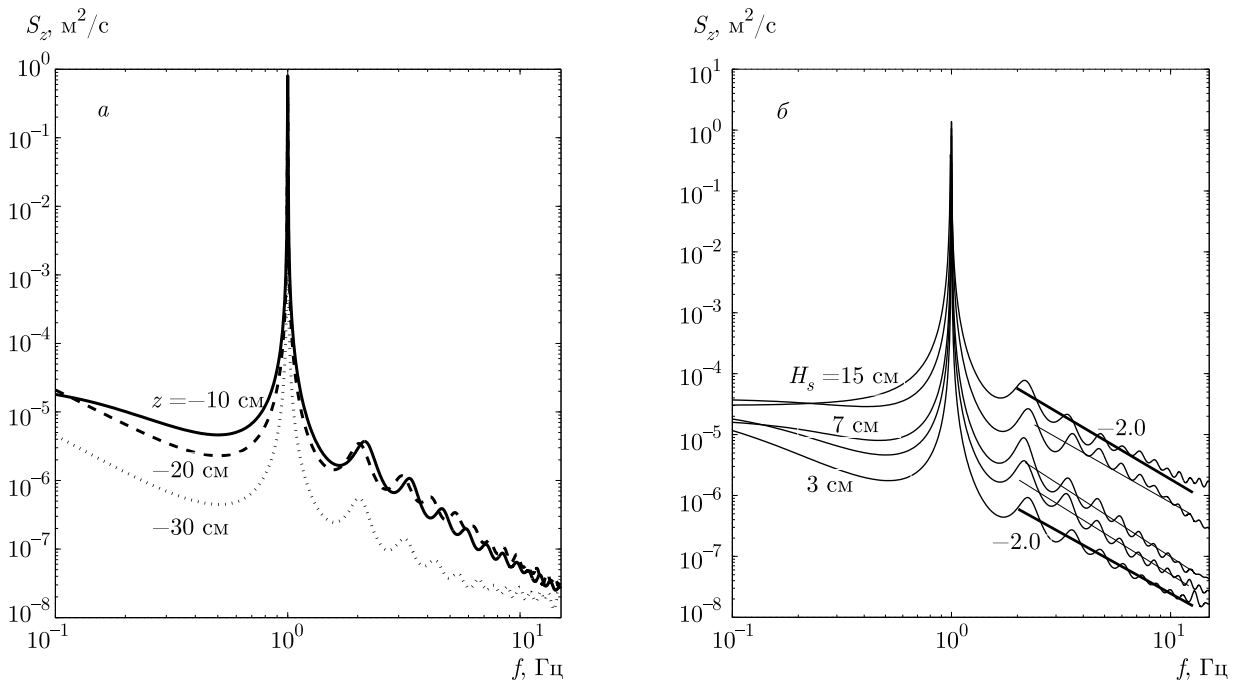


Рис. 3. Спектры $S_z(f)$ при $f_0 = 1.0$ Гц: а — $H_s = 5$ см и $z = -10, -20, -30$ см; б — $H_s = 3-15$ см и $z = -10$ см. Отрезки прямых и цифры при них указывают степенной закон убывания спектров

жив отсутствие корреляции между этими составляющими, в рамках потенциальной теории для спектра течений $S_{ui}(\omega, z)$ на глубине z получим [23]

$$S_{ui}(\omega, z) = S_{iW}(\omega, z) + S_{iT}(\omega, z). \quad (5)$$

Здесь и далее для теоретических соотношений принято использование угловой частоты $\omega = 2\pi f$ и волнового числа $k = \omega^2/g$, определяемого дисперсионным соотношением для гравитационных волн. Заметим, что аналогичная «линейная фильтрация» была

предпринята еще в работе [4], однако далее формулы (5) она не была детализирована.

В выражении (5) S_{iT} — спектр i -й компоненты турбулентных флуктуаций скорости на глубине z , а

$$S_{iW}(\omega, z) = \omega^2 S_{\eta i}(\omega, z) \equiv \equiv \omega^2 S_{\eta}(\omega) \exp[-2\omega^2 z/g] I_i[S_{\eta}(\omega, \theta)] \quad (6)$$

— спектр i -й компоненты волновых орбитальных движений (скоростей), приведенных по потенциальной теории к глубине z ; $S_{\eta}(\omega)$ — одномерный спектр временного ряда возвышений поверхности $\eta(t)$; $I_i[S_{\eta}(\omega, \theta)]$ — интеграл по углу θ от двумерного частотно-углового спектра волн на поверхности $S_{\eta}(\omega, \theta)$, зависящий от компоненты i орбитальной скорости волн. Согласно (5), искомый спектр турбулентных пульсаций скорости, $S_{iT}(\omega, z)$, следует из спектра измеряемой скорости $S_{ui}(\omega, z)$ за вычетом теоретического слагаемого $S_{iW}(\omega, z)$, форма которого сама по себе представляет интерес. (Далее индекс « i » пускается, а термины «волновые» и «орбитальные» движения являются синонимами.)

Расчеты спектра орбитальных движений $S_W(f, z)$ по формуле (6) выявляют в их поведении два эффекта. Во-первых, спектр орбитальных движений $S_W(f, z)$ заметно шире, чем спектры возвышений поверхности $S_h(f)$ (рис. 4а). Во-вторых, пик спектра $S_W(f, z)$ больше пика спектра течений $S_u(f, z)$, но много уже него, а интенсивность боковых ветвей спектра волновых движений $S_W(f, z)$ на порядок меньше интенсивности спектра измеряемых течений $S_u(f, z)$ (рис. 4б). По этой причине теоретический спектр далеко не полностью компенсирует реальные волновые составляющие спектра течений $S_u(f, z)$, которые по своему происхождению занимают широкую полосу частот $[f_H - f_L]$ в области доминантного пика спектра течений на частоте f_p (рис. 4б).

Перечисленные особенности спектра волновых орбитальных движений и их сравнение со спектрами наведенных волнами течений отмечаются впервые. Видно, что простое вычитание $S_W(f, z)$ из $S_u(f, z)$, согласно формуле (5), будет приводить к существенной изрезанности (вплоть до отрицательных значений) искомого спектра турбулентности $S_T(f, z) = S_u(f, z) - S_W(f, z)$ в области частоты f_p , что физически не приемлемо. Поэтому требуется особая техника выполнения фильтрации волновых движений,

обеспечивающая монотонность убывания спектра турбулентности.

На рис. 4б видно, что волновые компоненты могут быть отфильтрованы путем простого «отсечения» главного пика спектра течений $S_u(f, z)$ программно-числовым образом. С учетом этого замечания, для получения спектра турбулентности $S_T(f, z)$ предлагается следующая процедура фильтрации (отсечения): 1) за уровень отсечения берется значение спектра на частоте f_L максимальной кривизны линии спектра $S_u(f, z)$, расположенной ниже частоты f_p его пика (см. рис. 4б) — эта точка принимается за начало пика волновых движений; 2) для частот $f > f_L$ уровень отфильтрованного спектра остается постоянным вплоть до частоты f_H , где этот уровень пересекает исходный спектр течений $S_u(f, z)$; 3) в областях $f < f_L$ и $f > f_H$ интенсивность спектра течений $S_u(f, z)$ остается прежней, так как в них спектр волновых движений на порядок ниже спектра течений. Пример такой фильтрации приведен на рис. 4б для спектра течений $S_z(f)$ при $z = -10$ см и параметрах волнопродуктора $H_s = 5$ см, $f_0 = 1.0$ Гц.

Выбор частоты f_L в данной работе осуществлялся визуально, но при большом объеме данных он может быть автоматизирован, что никак не влияет на результат фильтрации. Действительно, применение указанной фильтрации для спектров течений всех имеющихся данных показывает, что она захватывает диапазон частот в пределах $0.5f_p < f < 1.5f_p$, границы которого в каждом отдельном случае зависят от параметров волн H_s , f_p и глубины горизонта z . Однако для наших целей основной интерес представляют результаты фильтрации спектра в оставшихся областях частот.

На рис. 4б видно, что на фиксированной глубине z спектр волновых орбитальных движений резко убывает по мере удаления от частоты пика f_p . Поэтому низко- и высокочастотные участки ($f < 0.5f_p$ и $f > 1.5f_p$) отфильтрованного спектра, который нами отождествляется со спектром турбулентных течений, практически совпадают с таковыми для спектра измеренных течений. Это позволяет использовать указанные участки спектра измеренных течений для дальнейшего анализа законов убывания интенсивности спектра турбулентных составляющих.

Отметим специально, что по методу фильтрации спектры $S_T(f, z)$ и $S_F(f, z)$ тождественны не столько физически, сколько математически. Поэтому далее мы предпочитаем использовать именно обозна-

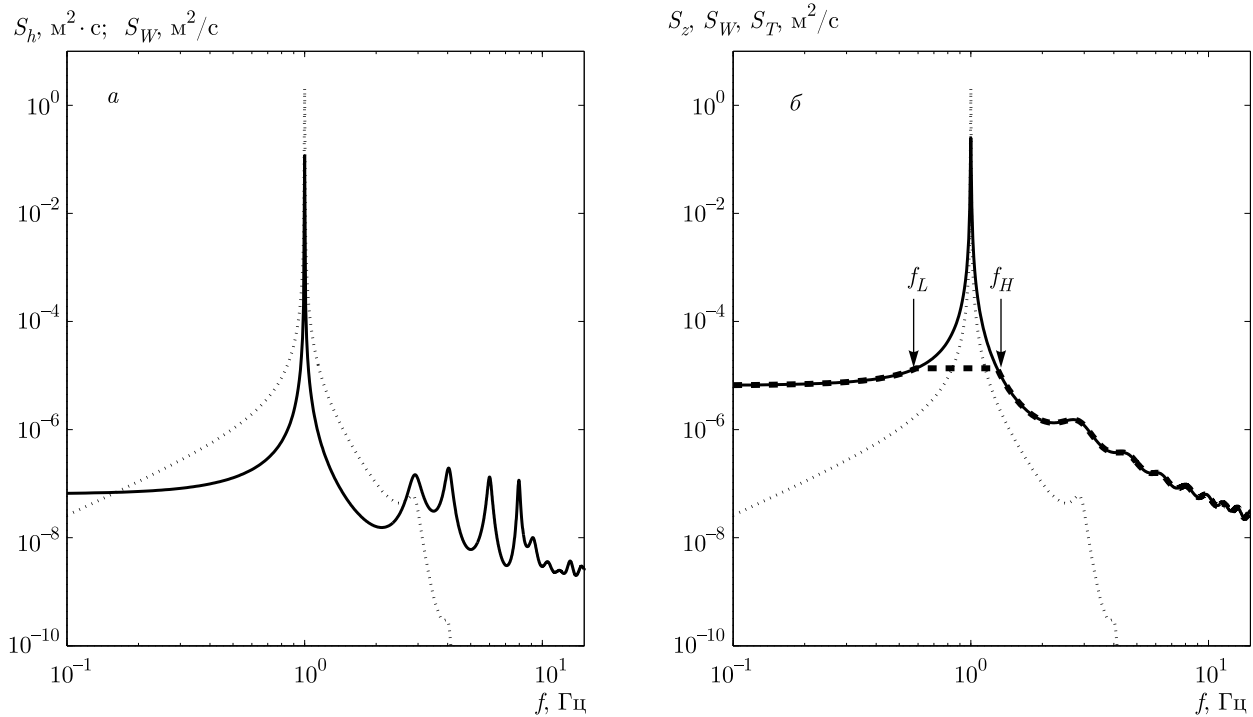


Рис. 4. а) Спектр возвышений $S_h(f)$ (сплошная) и спектр волновых орбитальных движений $S_W(f)$ (пунктирная) при $z = -10$ см. б) Спектры течений на горизонте $z = -10$ см: $S_z(f)$ (сплошная), орбитальных движений $S_W(f)$ (пунктирная) и отфильтрованных турбулентных движений $S_T(f)$ (штриховая). Параметры волн: $H_s = 5$ см, $f_0 = 1.0$ Гц

чение $S_F(f, z)$ для описания турбулентных составляющих течений и для оценки СтО турбулентных пульсаций σ_F (см. разд. 4).

Из сказанного выше видно, что процедура фильтрации приводит к возникновению понятия ширины спектра течений, которое далее будет неоднократно использоваться. Для его однозначности введем следующее определение: ширина Δf_i спектра i -й компоненты течений $S_i(f)$ есть величина горизонтального отрезка на оси частот $[f_{Hi} - f_{Li}]$, появляющаяся в спектре $S_{iF}(f)$ в результате фильтрации волновых движений (рис. 4б).

В заключение раздела отметим, что средние значения компонент течений $U_i = \langle u_i \rangle$, наведенных волнами (далее — «регулярных» течений) в данной работе не приводятся и не рассматриваются по причине их хаотичной изменчивости с изменением параметров волн H_s, f_p и глубины горизонта измерений z , что существенно снижает достоверность оценок U_i . Этот факт обусловлен наличием возвратных («фоновых») течений U_{iB} , сопоставимых, в нашем случае, по величине с оценками регулярных течений U_i .

Поле возвратных течений, как известно, определяется полем волновых движений и геометрией бассейна [2, 6]. Далее предполагается, что в силу малости градиентов фоновых течений U_{iB} по сравнению с таковыми для орбитальных волновых движений, они слабо влияют на интегральные турбулентные характеристики течений u_i типа их СтО, а также на интенсивность и форму спектров фильтрованных компонент, по которым определяются величины СтО σ_{iF} и СДТ ε .

4. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ АНИЗОТРОПИИ ТЕЧЕНИЙ

4.1. Общие результаты

Оценки стандартных отклонений σ_i и σ_{iF} временных рядов компонент течений $u_i(t)$ будем называть интегральными оценками турбулентности, наведенной волнами в воде. В таком случае различие величин σ_i (или σ_{iF}) для различных компонент ($i = x, y, z$) характеризует степень анизотропии рассматриваемых течений. В принятом здесь подхо-

де величины σ_i и σ_{iF} определяются по формулам спектрального анализа:

$$\sigma_i^2 = \int_{f_{min}}^{f_{max}} S_i(f) df, \tag{7}$$

$$\sigma_{iF}^2 = \int_{f_{min}}^{f_{max}} S_{iF}(f) df,$$

в которых интегралы по спектру соответствуют определению СтО для стационарных рядов [3, 5]. Пределы интегрирования снизу определяются нижней частотной границей оценки спектров, а сверху — границей появления измерительных шумов в высокочастотной области спектра. В нашей работе принято $f_{min} = 0.01$ Гц и $f_{max} = 15$ Гц. Результаты оценок σ_i и σ_{iF} по формулам (7) в случае регулярных механических волн показаны на рис. 5–7 для различных параметров волн и глубин. Аналогичные результаты для нерегулярных механических волн не приводятся, чтобы не перегружать текст.

Анализ всех полученных оценок СтО для измеренных и отфильтрованных течений выполнен раздельно, поскольку они описывают разные течения. Основные выводы такого анализа для обоих видов механических волн приведены в разд. 4.2 и 4.3.

4.2. Стандартные отклонения измеренных течений

1. СтО рядов измеренных течений, σ_x , σ_y и σ_z , в случаях как регулярных, так и нерегулярных механических волн значительно (в 1.5–2 раза) различаются между собой по величине, что свидетельствует о существенной анизотропии наведенных течений в целом.

2. При доминантной частоте волн $f_0 = 1.5$ Гц соотношения σ_x , σ_y и σ_z немонотонно изменяются с ростом высоты волн H_s (рис. 5а, 6а, 7а). Уменьшение значений σ_i для высот волн $H_s > 6$ см при $f_0 = 1.5$ Гц связано с их обрушением, наступающим для этих параметров волнения и отсутствующим при частотах $f_0 \leq 1.0$ Гц (см. анализ далее).

3. При $f_0 \leq 1.0$ Гц величины σ_x и σ_z близки друг к другу, монотонно растут с ростом H_s и превышают величину σ_y в 1.5–4 раза, поскольку зависимость σ_y от H_s крайне слаба (линии 3 на рис. 5б, 6, 6б, 6, 7б, 6). Этот результат отражает факт отсутствия ор-

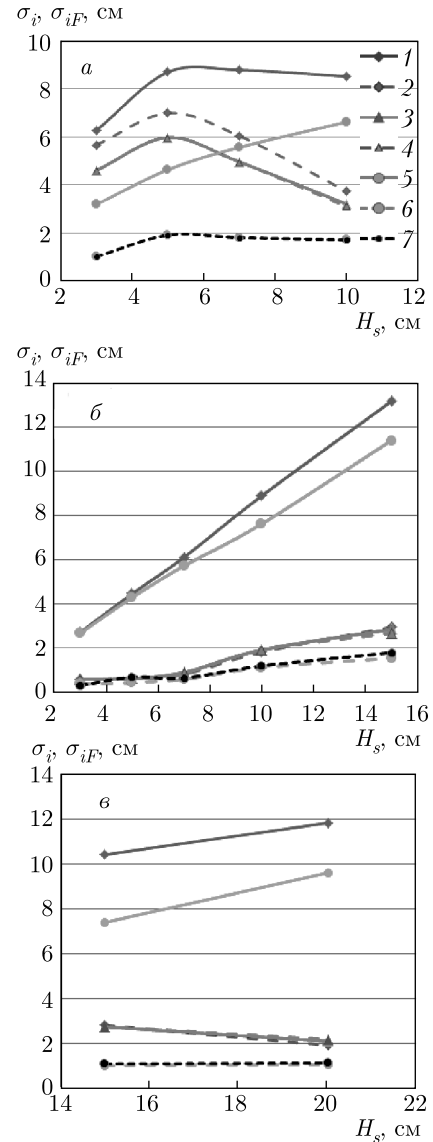


Рис. 5. (В цвете онлайн) Стандартные отклонения измеренных течений и их турбулентных составляющих, σ_i и σ_{iF} , для случая регулярных волн на глубине $z = -10$ см в точке P2 = 12 м: а — $f_0 = 1.5$ Гц; б — $f_0 = 1.0$ Гц; в — $f_0 = 0.7$ Гц. Линии: 1 — σ_x ; 2 — σ_{xF} ; 3 — σ_y ; 4 — σ_{yF} ; 5 — σ_z ; 6 — σ_{zF} ; 7 — параметризация σ_{zF-par} по формулам (10)–(12). На панели а линии 3, 4 и 6, 7 совпадают по причине близости цифровых значений

битальных движений вдоль оси y и свидетельствует о существовании сильной горизонтальной анизотропии течений, наведенных длинными волнами (когда доминантная длина волны превышает глубину слоя воды, $2\pi/k_p \geq D$).

4. Зависимость σ_x и σ_z от глубины z с ошибкой порядка 10% близка к экспоненциальной, ожидае-

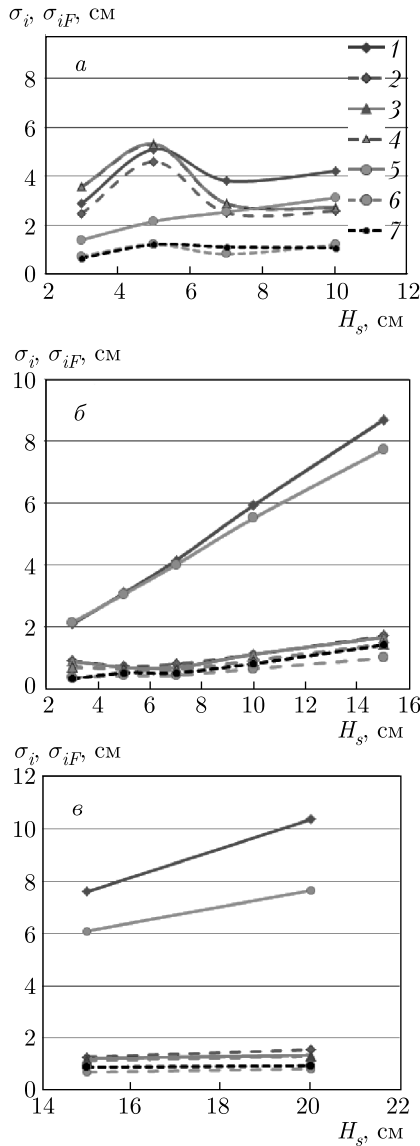


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но для $z = -20$ см

мой для амплитуд орбитальных движений потенциальных волн, т. е.

$$\sigma_{x,z} \propto \exp(k_p z). \quad (8)$$

Величина σ_y также убывает с ростом z , но не проявляет зависимости вида (8).

4.3. Стандартные отклонения турбулентных составляющих течений

СтО турбулентных составляющих течений σ_{iF} приведены на рис. 5–7 штриховыми линиями 2, 4, 6 (в качестве примера только для регулярных волн).

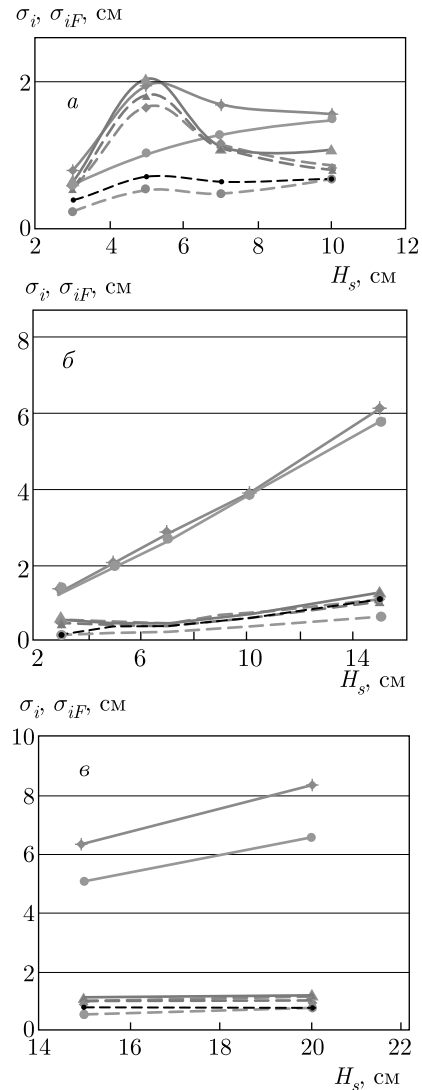


Рис. 7. То же, что на рис. 5, но для $z = -30$ см

Общий анализ результатов для обоих видов механических волн позволяет заключить следующее.

1. Значения σ_{xF} и σ_{yF} для горизонтальных течений близки по величине друг к другу и в 1.5–3 раза больше величины σ_{zF} , т. е. имеет место сильная и устойчивая анизотропия турбулентности в направлениях горизонтального и вертикального движений.

2. При значениях доминантных частот волн $f_0 \leq 1.0$ Гц относительный вклад энергии турбулентных составляющих, $(\sigma_{iF}/\sigma_i)^2$, в кинетическую энергию течений не превышает 15–30% (в зависимости от степени обрушений), что свидетельствует о преобладающей роли волновых движений в наведенных течениях (см. рис. 2).

3. Степень указанной в этом разделе в пункте 1 горизонтально-вертикальной анизотропии турбулентности снижается по мере роста высоты волн H_s и глубины z .

4. По аналогии со свойством 2 этого раздела наблюдается немонотонность роста σ_{iF} с ростом высот волн, связанная с их обрушениями.

5. Регулярность зависимости σ_{iF} от параметров системы H_s, f_0, z , позволяет дать полуфеноменологическую параметризацию σ_{iF} , которая может быть пригодна для проверки теоретических моделей введенной волнами турбулентности [17–19].

4.4. Параметризация стандартных отклонений турбулентных составляющих течений

С учетом предсказаний потенциальной теории об экспоненциальном убывании волновых амплитуд с глубиной в качестве основы для параметризации СтО турбулентных составляющих можно взять формулу

$$\sigma_{iT} \equiv \sigma_{iF} = c_{0i} \delta f_p a_0 \exp(c_{\Delta f i} k_p z), \quad (9)$$

где $\delta = a_0 k_p$ — крутизна волн на поверхности, а безразмерные подгоночные параметры c_{0i} и $c_{\Delta f i}$ могут содержать дополнительные зависимости от параметров системы. Здесь нижний индекс « Δf » параметра $c_{\Delta f i}$ означает зависимость интенсивности уменьшения σ_{iF} с ростом глубины от ширины Δf спектра течений, различной для регулярных и нерегулярных волн.

Для определенности проведем конкретизацию выражения (9) для СтО вертикальной компоненты турбулентной составляющей скорости σ_{zF} , которая, согласно рис. 5–7, проявляет наиболее простое поведение. Параметризации σ_{xF} и σ_{yF} могут быть получены из (9) путем дополнительного уточнения множителей c_{0i} и параметров $c_{\Delta f i}$.

Необходимый для подбора значений c_{0i} и $c_{\Delta f i}$ набор значений параметров волн a_0, f_p, k_p, δ был получен нами путем анализа формы спектров для временных рядов уровня волновых возвышений поверхности, $\eta(t)$. Эти параметры волн, включая и интенсивность их обрушений Br , приведены в табл. 1.

Первые оценки подгоночных параметров c_{0i} и $c_{\Delta f z}$ показали, что убывание величины σ_{zF} с ростом

глубины z достаточно точно передается экспоненциальной зависимостью вида (9) при постоянном значении $c_{\Delta f z}$, разным для различного вида волн. Однако параметризация зависимости СтО от амплитуды волн a_0 и их крутизны $\delta = a_0 k_p$ оказалась более сложной. Для этой цели, в соответствии с отмеченными ранее свойствами в разд. 2 и в разд. 4 для СтО течений, потребовался учет интенсивности обрушений Br как параметра волнения, который может существенно влиять на оценку СтО $c_{\Delta f z}$, понижая ее величину.

В результате подбора выражения для фактора $c_{0z}(\text{Br})$ параметризация для σ_{zF} принимает вид

$$\sigma_{zF} = c_0 \frac{\delta f_p a_0 \exp(-c_{\Delta f} k_p |z|)}{c_1 + \delta + c_b \text{Br}}, \quad (10)$$

где для регулярных волн

$$c_0 = 2, \quad c_1 = 0.2, \quad c_b = 1, \quad c_{\Delta f} = 0.5, \quad (11)$$

а для нерегулярных волн

$$c_0 = 10, \quad c_1 = 0.4, \quad c_b = 1, \quad c_{\Delta f} = 1. \quad (12)$$

Значения σ_{zF} для регулярных волн, полученные по параметризации (10), (11), нанесены на рис. 5–7 в виде пунктирной линии 7, обозначенной как σ_{zF-par} . Видно, что различие значений σ_{zF-par} и σ_{zF} не превышает в среднем 10% от текущего значения σ_{zF} , что свидетельствует о хорошей точности параметризации (10)–(12). Этот результат закрывает первую из задач работы.

В заключение раздела отметим, что, согласно соотношениям (10)–(12), интенсивность турбулентности, порождаемой волнами с узким спектром, убывает с глубиной медленнее, чем та, что порождается волнами с широким спектром при том же значении частоты пика f_p . Этот эффект, очевидно, обусловлен тем, что энергия волн с узким спектром затухает с глубиной медленнее, чем энергия волн с широким спектром при той же f_p в силу большей доли в широком спектре компонент с частотами выше f_p , которые более быстро убывают с глубиной (пропорционально $\exp[-2(2\pi f)^2 |z|/g]$).

В дальнейшем представляет интерес специальная эмпирическая проверка как указанной зависимости интенсивности турбулентности на фиксированной глубине от ширины спектра волн, так и влияния понижающего фактора обрушений Br на интенсивность турбулентности в слое воды под волнами при заданных их параметрах.

5. СПЕКТРЫ ТЕЧЕНИЙ

Поскольку характеристики спектров течений весьма разнообразны, круг вопросов для их описания должен быть сужен до круга задач, поставленных в работе (см. Введение). Поэтому здесь мы ограничимся кратким описанием взаимосвязи ширины спектра течений с параметрами волнения и турбулентности и подробно остановимся на анализе законов резкого убывания спектров S_{iF} . С целью исключения малоинформативных значений спектра на низких частотах и высокочастотных шумов область построения спектров на рисунках приведена в диапазоне частот $0.1 \leq f \leq 15$ Гц.

5.1. Ширина спектра течений и ее параметризация

В разд. 3 было показано, что ширина спектра течений Δf как физический параметр задачи, появляется при проведении процедуры фильтрации волновых компонент скорости. Изменяясь с амплитудой волн a_0 , частотой пика f_p и глубиной z , величина Δf существенно сказывается на интенсивности турбулентных пульсаций скорости в толще воды, характеризующихся величинами σ_{iF} . Пример такого влияния виден из формул (10)–(12) для регулярных и нерегулярных волн. Как будет показано ниже, величина Δf сказывается и на скорости убывания с глубиной величины скорости диссипации турбулентности ϵ . Поэтому представляется важным дать параметризацию величины Δf как функцию параметров системы a_0, f_p, z .

Визуальный анализ совокупности оценок спектров течений для всего набора вариантов волн (см. табл. 1) позволяет выделить следующие эффекты, связанные с величиной частотной ширины спектра, определенной на уровне отсечения пика, соответствующего волновым движениям (см. определение Δf в конце разд. 3).

1. Спектр течений, наведенных волнами, всегда намного шире спектра волнения (см. рис. 3а,б).
2. Чем глубже проникают волны с заданной частотой пика спектра f_p , тем уже спектр наведенных течений (см. рис. 4а).
3. Чем больше амплитуда волн a_0 при фиксированной величине f_p , тем шире спектр течений (см. рис. 4б).

4. Чем ниже доминантная частота волн f_p , тем шире спектр течений при тех же форме спектра волн и значении a_0 .

5. Чем шире спектр течений на заданной глубине z и при фиксированной величине f_p , тем выше интенсивность хвоста спектра S_{iF} (см. рис. 4б) и величина σ_{iF} .

На данном этапе исследований точное количественное выражение упомянутых в пунктах 1–5 зависимостей не принципиально. Здесь важен лишь факт их существования, дающий направление для параметризации величины Δf . При этом, с учетом влияния ширины спектра на скорость убывания интенсивности турбулентности с глубиной, в качестве фактора $c_{\Delta f}$ в показателе экспоненты $\exp(-c_{\Delta f} k_p |z|)$ следует искать представление величины $c_{\Delta f}$ в безразмерном виде.

Из соображений размерности и с учетом эффектов 1–4 параметризация безразмерного фактора ширины спектра $c_{\Delta f}$ в терминах параметров системы a_0, f_p, z может быть представлена в виде

$$c_{\Delta f} \sim \frac{\sqrt{a_0 g}}{z f_p}, \quad (13)$$

где g — ускорение силы тяжести. Именно соотношение (13) используется при построении дальнейшей параметризации скорости диссипации турбулентности, наведенной волнами.

5.2. Законы убывания интенсивности спектров

В этом разделе мы рассмотрим формы частотных спектров для горизонтальных и вертикальной компонент скорости, $S_{x,y}(f)$ и $S_z(f)$, в области как низких, так и высоких частот, акцентируя основное внимание на выявлении участков со степенным законом убывания интенсивности спектров с частотой вида

$$S_i(f) \propto f^{-n}. \quad (14)$$

При этом, согласно сказанному выше о фильтрации волновых движений (разд. 3), участки спектров измеренных течений $S_i(f)$ в областях $f < 0.5 f_p$ и $f > 1.5 f_p$ будут рассматриваться как спектры турбулентных движений. Далее эти области частот будут именоваться соответственно как НЧ- и ВЧ-области спектров. Поскольку динамика формирования турбулентности в НЧ- и ВЧ-областях в принципе может

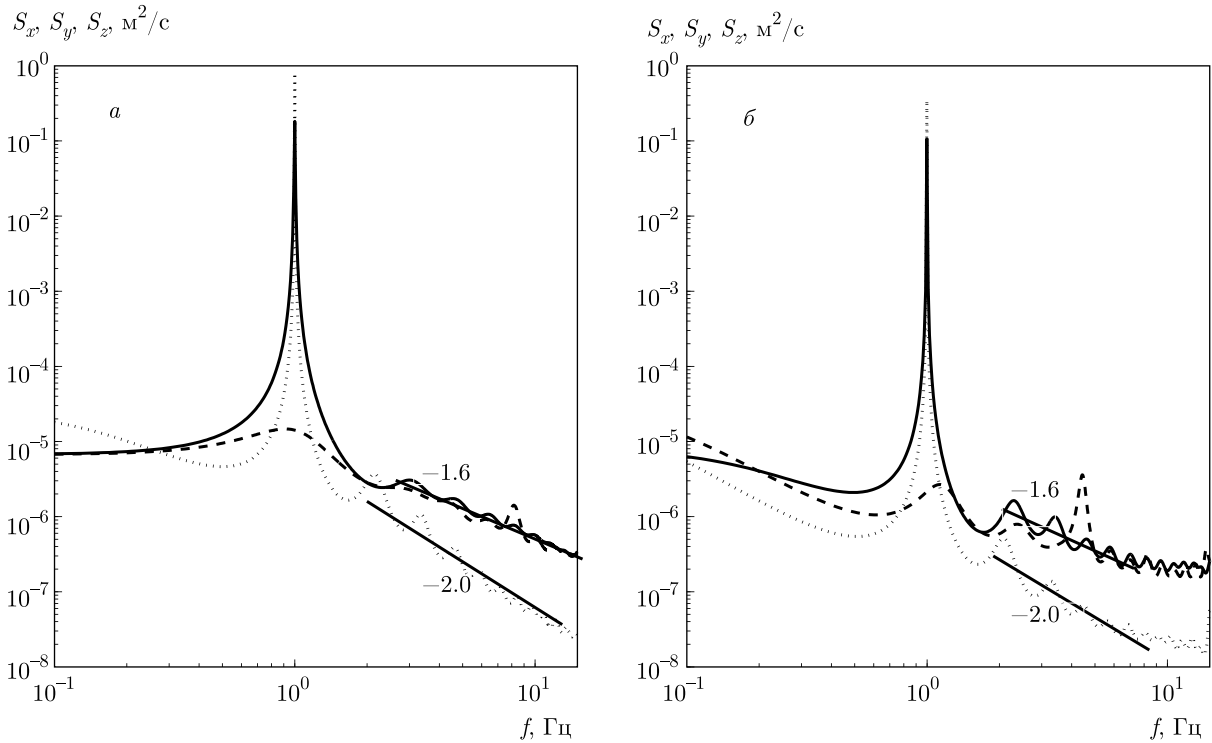


Рис. 8. Спектры $S_x(f)$ (сплошные линии), $S_y(f)$ (штриховые) и $S_z(f)$ (пунктирные) для варианта $H_s = 5$ см, $f_0 = 1.0$ Гц: $a - z = -10$ см; $b - z = -30$ см

быть различной, далее, следуя традиционному подходу [13–15], мы ограничимся детальным анализом только ВЧ-областей спектров, оставляя их анализ в НЧ-области для дальнейшего изучения.

Переходя к описанию формы спектров, сразу же отметим, что в нашем эксперименте для случаев регулярных волн с доминантной частотой $f_p = 1.5$ Гц спектры течений не имеют участков со степенным законом убывания вида (14) ни для какой из компонент скорости и на всех горизонтах. Для частот $f_p \leq 1$ Гц степенные законы убывания интенсивности спектров $S_i(f)$ вида (14), как правило, имеют место. Для нерегулярных волн степенные участки в ВЧ-области спектров наблюдаются при всех рассмотренных параметрах волн.

Далее в качестве примера приводятся только случаи регулярных волн.

Типичное соотношение форм и интенсивности спектров трех компонент течений, $S_x(f)$, $S_y(f)$ и $S_z(f)$, для параметров волн $H_s = 5$ см, $f_0 = 1.0$ Гц и глубин $z = -10, -30$ см показано на рис. 8. Видно, что в ВЧ-области интенсивности спектров горизонтальных компонент $S_x(f)$ и $S_y(f)$ всегда близки

друг к другу и значительно превышают интенсивность спектра $S_z(f)$ (в соответствии со свойством 1 разд. 4.3).

Но главное различие спектров горизонтальных и вертикальной компонент скорости заключается в законах их убывания. Как видно из рис. 8а,б, в ВЧ-области параметр n закона убывания (14) для спектров $S_x(f)$ и $S_y(f)$ имеет величину $n \approx 1.6$, близкую к параметру спектра Колмогорова–Обухова с величиной $n = 5/3$ [7]. Этот результат не нов, поскольку такое же значение n для спектров горизонтальных компонент течений отмечалось и в работах [4, 5, 13–15].

В то же время для спектра вертикальных компонент скорости $S_z(f)$ значение n имеет величину 2.0 ± 0.1 (см. рис. 8, 9), т. е. при $f > 2f_p$ выполняется соотношение

$$S_z(f) = C f^{-2}, \tag{15}$$

которое эмпирически установлено впервые. При этом для течений, наведенных регулярными волнами, закон убывания вида (15) устойчиво имеет место лишь при частотах пика волн $f_p \leq 1$ Гц. Для

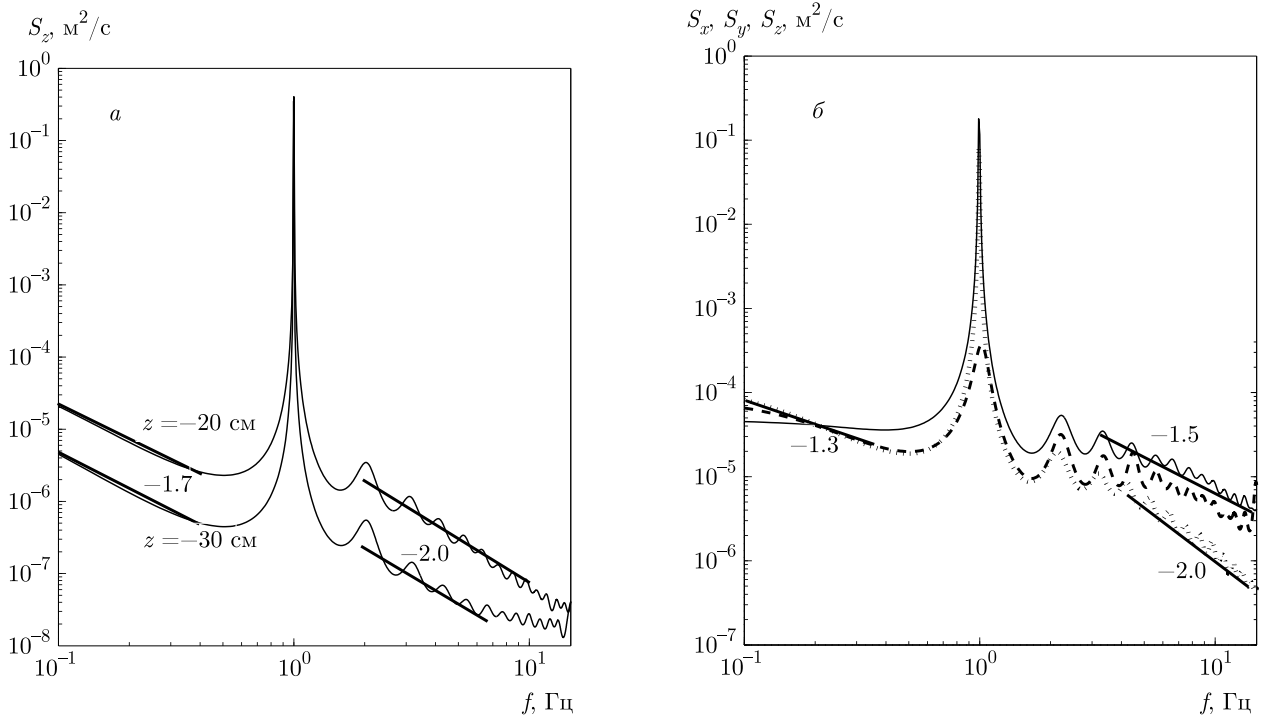


Рис. 9. а) Спектры $S_z(f)$ на горизонтах $z = -20$ и $z = -30$ см для варианта $H_s = 5$ см, $f_0 = 1.0$ Гц. б) Спектры $S_x(f)$ (сплошные линии), $S_y(f)$ (штриховые) и $S_z(f)$ (пунктирные) для варианта $H_s = 15$ см, $f_0 = 1.0$ Гц и $z = -20$ см

нерегулярных механических волн спектры $S_z(f)$ с участками вида (15) наблюдаются при всех частотах пика волн f_p для всех значений амплитуд волн a_0 и глубин z (см. детали ниже в табл. 2). Далее именно такие спектры будут анализироваться на предмет оценивания СДТ.

Вместе со сказанным, с целью полноты картины, следует отметить и степенную форму спектра $S_z(f)$ в НЧ-области ($f < 0.5f_p$), подчеркнутую прямыми линиями на рис. 9. Из них видно, что в НЧ-области в спектрах $S_z(f)$ имеют место степенные зависимости с законами (14) при значениях $n \approx 1.6$ с разбросом порядка ± 0.3 для различных вариантов волн. Важно, что такие степенные участки имеют место только при достаточно больших глубинах измерений ($z \leq -20$ см). Чем глубже горизонт измерения, тем шире область степенных участков распространяется в сторону низких частот. Существенно, что в спектрах горизонтальных компонент скорости $S_x(f)$ и $S_y(f)$ такие участки, как правило, выражены слабее или полностью отсутствуют (рис. 9б).

Степенные участки в НЧ-области спектров течений, наведенных волнами, отмечались и ранее, например, в работах [4, 5, 20], где рассматривались си-

туации с ветровыми волнами на поверхности воды. Для механических волн такие особенности спектров течений приводятся впервые. Поскольку в настоящее время механика формирования турбулентности в НЧ-области в присутствии волн изучена намного меньше, чем в ВЧ-области, далее этот вопрос не обсуждается, а основное внимание традиционно будет уделено ВЧ-области спектров течений.

6. АНАЛИЗ СПЕКТРОВ $S_z(f)$ В ВЧ-ОБЛАСТИ И ОЦЕНКИ СДТ

6.1. Анизотропия формы спектров и определение СДТ

Степенная форма спектров интересна тем, что она позволяет оценить такую важную характеристику, как скорость диссипации кинетической энергии турбулентности (СДТ), зависимости которой от параметров системы можно использовать для проверки теоретических моделей явления [16–18]. Параметризация такого рода эмпирических зависимостей представляет собой вторую из задач нашей работы. Поскольку в ВЧ-области степенные законы убывания интенсивности спектров для горизонтальных и

вертикальной компонент течений существенно различаются, их анализ также требует различного подхода.

Интенсивности спектров горизонтальных компонент $S_x(f)$ и $S_y(f)$ убывают по закону « $-5/3$ », характерному для изотропной турбулентности Колмогорова–Обухова, порождаемой течениями при больших числах Рейнольдса [7]. Для их анализа принято привлекать соотношения вида [3–5, 20]

$$S_{x,y}(f) = Cf^{-5/3} = C_{KO}\varepsilon^{2/3}f^{-5/3}U^{2/3}, \quad (16)$$

где ε — интересующая нас величина СДТ, U — средняя скорость течения, а C_{KO} — безразмерная константа [3, 5, 24]. В формуле (16) для связи с классическим представлением спектра в k -пространстве используются соотношение $f = kU/2\pi$ и гипотеза «замороженной турбулентности» Тейлора [3–5]. Применение этой гипотезы базируется на факте существования средней скорости U «тейлоровского» переноса. В нашем случае такой подход оказался невозможным по причине низкой достоверности определения эмпирической средней продольной скорости U_x (см. замечания в конце разд. 3).

В силу указанных обстоятельств для получения оценки СДТ остается лишь анализ степенных участков спектров вертикальной компоненты течений $S_z(f)$, которые в ВЧ-области имеют вид (15), т. е. $S_z(f) \approx Cf^{-2}$. Здесь C — размерный множитель, который нужно выразить через величину СДТ ε_z (с целью простоты записи индекс « z » при ε_z далее опускается). Поскольку такая задача ставится впервые, для ее решения потребуется привлечение ряда гипотез и модельных построений, излагаемых ниже.

6.2. Модельная интерпретация степенного спектра вида (15)

Спектр течений вида $S(f) = Cf^{-2}$ известен в статистической гидродинамике как спектр лагранжевой турбулентности [7, 24]. В нашем случае эмпирический спектр $S(f) = Cf^{-2}$ получен для фиксированной точки на основе измерений в эйлеровой системе координат. По причине совпадения эмпирического спектра и теоретического спектра лагранжевой турбулентности возникает задача теоретически обосновать их аналогию.

Ввиду пионерского характера эмпирического результата и отсутствия в настоящее время его тео-

рии, указанную аналогию следует принять «априорно», до появления альтернативы. В силу сказанного, здесь мы будем «априорно постулировать» хаотические изменения во времени вертикальной скорости $u_z(t)$, наблюдаемой в точке изучаемой системы, как результат проявления хаотизированных орбитальных волновых движений, разрушенных их гидродинамической неустойчивостью. Такой постулат дает некоторое феноменологическое (пока не полное) основание для установления аналогии спектра лагранжевой турбулентности и наблюдаемой формы спектра.

Приняв указанный постулат как гипотезу и учитывая размерности частотного спектра $[S_u(f)] = L^2T^{-1}$ и СДТ $[\varepsilon] = L^2T^{-3}$, запишем эмпирическое соотношение (15) в виде

$$S_z(f) = C_p\varepsilon f^{-2}, \quad (17)$$

в котором безразмерная величина C_p принимается фиксированной для имеющейся геометрии системы, т. е. она неизменна при всех параметрах системы. Так как величина C_p имеет только нормировочный характер, на данном этапе для простоты оценок примем

$$C_p = 1. \quad (18)$$

Заметим, что модельная формула (17), как таковая, вполне применима для целей определения зависимости ε от параметров системы даже без точного значения коэффициента C_p . Здесь принципиально важно, что модельное представление спектра течений вида (17) абсолютно совпадает с экспериментальным результатом (15), тем самым обеспечивая инструмент для эмпирического определения искомой зависимости $\varepsilon(a_0, f_p, z)$.

6.3. Оценки скорости диссипации турбулентности

Использование формул (17), (18) для оценки величины ε очевидно. Зафиксировав некоторую частоту f_F в области участка спектра вида (17), например, $f_F = 10$ Гц, по графику спектра определяем величину $S_z(f_F) = S_z(10 \text{ Гц}) \equiv S_{10}$ и получаем оценку

$$\varepsilon = f_F^2 S_{10} / C_p = f_p^2 S_{10}. \quad (19)$$

Если в будущем потребуется согласование полученных таким образом значений ε с величинами

СДТ для других компонент скорости, то коэффициент C_p можно использовать в качестве эмпирического подгоночного параметра в общей формуле (17). Сейчас этот вопрос не актуален и по этой причине не обсуждается.

Оценки значений ε , полученные по формуле (19) для всех случаев, когда спектры $S_z(f)$ имеют закон убывания (15), приведены в табл. 2 вместе с номерами экспериментов, используемых для их идентификации параметров волн по табл. 1. Анализ, построенный с привлечением данных о параметрах волн, позволяет заключить следующее.

Величина СДТ как функция параметров системы $\varepsilon(a_0, f_p, z)$ резко растет с величиной амплитуды волны a_0 , заметно уменьшается с уменьшением частоты пика f_p и убывает с ростом глубины z . Регулярность упомянутых зависимостей позволяет найти их аналитическую параметризацию, сбалансированную по размерности (типа формулы (1)).

6.4. Параметризация функции $\varepsilon(a_0, f_p, z)$

При построении параметризации для СДТ будем исходить из предписываемого теорией экспоненциального убывания интенсивности турбулентности σ_{iF} с глубиной и ее зависимости от крутизны волн (формула (9)), а также из указанного сильного роста СДТ с ростом их амплитуды (табл. 2).

Тогда в терминах параметров системы a_0, f_p, k_p и величины g из соображений размерности можно записать общую форму для представления $\varepsilon(a_0, f_p, z)$ в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon(a_0, f_p, z) &= \\ &= C_0(a_0, f_p, g, z) \delta^{c_\delta} [a_0 f_p g] \exp(c_\Delta k_p z), \end{aligned} \quad (20)$$

где $C_0(a_0, f_p, g, z)$ — безразмерная функция, позволяющая варьировать зависимость ε от параметров системы; подгоночные константы c_δ и c_Δ отражают соответственно степень зависимости ε от крутизны волн и скорость ее убывания с глубиной, зависящей от ширины спектра турбулентных течений; выражение в квадратных скобках дает размерность СДТ ε .

Первые пробы показали, что при постоянном значении $C_0(a_0, f_p, g, z)$ для рассматриваемых глубин и величин k_p формула (20) плохо соответствует эмпирической зависимости $\varepsilon(z)$ для различных f_p . По этой причине, с учетом описанного выше влия-

ния ширины спектра на его интенсивность в ВЧ-области (см. свойства 1–5 в разд. 5.1) и с привлечением формулы (13), величина c_Δ была детализирована в виде

$$c_\Delta = \frac{c_2}{c_{\Delta f}} = \frac{c_2(z f_p)}{\sqrt{a_0 g}} \quad (21)$$

с подгоночной константой c_2 . Кроме того, для усиления зависимости от глубины безразмерный коэффициент $C_0(a_0, f_p, z)$ был детализирован в виде

$$C_0(a_0, f_p, g, z) = c_\varepsilon(a_0/z) \quad (22)$$

с подгоночной константой c_ε .

В итоге, при оптимальном выборе степени крутизны $c_\delta = 1$, конечная полуэмпирическая параметрическая формула для СДТ приобретает вид

$$\varepsilon = c_\varepsilon \delta [a_0 f_p g] (a_0/z) \exp(c_\Delta k_p z) \quad (23)$$

с подгоночными константами $c_\varepsilon = 0.01$ и $c_2 = 3$ для величины c_Δ , заданной формулой (21).

Результаты оценок ε по формуле (23) помещены в табл. 2 (курсивом) рядом с эмпирическими значениями ε . Видно, что для экспериментов VII–XI качественно, а для экспериментов XIV–XIX и количественно (со средней ошибкой порядка 30%) формула (23) передает все эмпирические зависимости $\varepsilon(a_0, f_p, z)$. Заметим, что параметризация (23) в записи $\varepsilon_1 \approx (a_0 f_p)^3 / z$ близка к таковой для пристеночной турбулентности, записанной в виде $\varepsilon_2 \approx 2u_{*w}^3 / z$, откуда следует, что ε_1 превышает ε_2 на 1–2 порядка в зависимости от стадии развития волн (см. также работы [4,5]). Этот результат завершает решение поставленной задачи.

7. ОБСУЖДЕНИЕ

Обсудим ряд ключевых моментов работы, нуждающихся в пояснении.

1. Поскольку в спектрах наведенных волнами течений содержатся как волновые, так и турбулентные частотные составляющие, для изучения последних нужна фильтрация волновых компонент спектра. Но каждая из волновых частот убывает по глубине z со своим декрементом в экспоненте $\exp(-2\omega^2|z|/g)$, поэтому указанная фильтрация должна выполняться в спектральном представлении и никак иначе [4, 23].

Таблица 2. Значения СДТ для механических волн и ее оценки по параметризации (23)

№ эксперимента	Регулярные волны					
	$z = -10$ см		$z = -20$ см		$z = -30$ см	
	Эмпирическое значение ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$	Формула ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$	Эмпирическое значение ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$	Формула ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$	Эмпирическое значение ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$	Формула ε , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}^3$
V	2.5	2.7	–	0.4	1	0.04
VI	5	15	–	3.1	1.5	0.5
VII	10	48	8	12	1	2.3
VIII	80	137	30	37	5	8.9
IX	250	413	100	124	20	35
	$z = -10$ см		$z = -20$ см		$z = -30$ см	
X	150	61	50	25	15	12
XI	400	162	80	68	40	33
	Нерегулярные волны					
	$z = -10$ см		$z = -20$ см		$z = -30$ см	
XII	5	1.6	5	0.13	–	0.04
XIII	–	5.3	–	1.0	–	0.14
XIV	18	12	8	2	–	0.3
XV	–	11	12	3.7	–	1.2
	$z = -10$ см		$z = -20$ см		$z = -30$ см	
XVI	12	10	8	3.5	2	1.3
XVII	20	22	12	8.7	6	3.8
XVIII	100	96	50	30	12	9.4
	$z = -10$ см		$z = -20$ см		$z = -30$ см	
XIX	30	29	12	12	7	5.1

Примечание. Знак «–» означает отсутствие участка спектра вида (15); колонка с меткой «формула» соответствует оценкам СДТ по параметрической формуле (23) (даны курсивом).

Детальный анализ показывает, что форма спектров волновых движений, задаваемая теоретической формулой (6), намного интенсивнее в пике и гораздо уже наблюдаемой формы спектра течений в области доминантного пика спектра волн. Это означает, что в реальности спектр волновых движений уширяется за счет снижения (теоретического) пикового значения. Поэтому простое теоретическое вычитание по формуле (5) становится неприменимым, и нужна иная процедура фильтрации, обеспечивающая монотонно убывающую интенсивность спектра турбулентности, в котором нет выделенных масштабов.

Такая процедура фильтрации волновых компонент, основанная на отсечении доминантного пика спектра течений, была детализирована и реализована в разд. 3. Она легко осуществима практически, приводит к монотонно убывающим спектрам турбулентности и физически непротиворечивым результатам, о чем свидетельствуют все полученные в работе количественные оценки. Более полный анализ проблемы фильтрации требует отдельного рассмотрения.

2. В работе установлено, что степень и характер анизотропии наведенных волнами течений существенно зависят от характера рассматриваемых движений: до фильтрации и после нее.

Так, СтО для измеренных компонент скорости (без фильтрации) σ_x и σ_z на глубинах $z \leq -20$ см близки друг к другу по величине, но заметно превышают величину σ_y . Эта форма анизотропии не нова. Она объясняется превалянием в течениях энергии волновых компонент (более 70 % энергии), орбитальные движения которых имеют двумерный характер движений, сосредоточенный в плоскости xz .

Для турбулентных составляющих течений уже величины СтО горизонтальных компонент σ_{xF} и σ_{yF} близки друг к другу, но обе в разы превышают СтО вертикальной компоненты σ_{zF} . Это означает, что в системе наведенной волнами турбулентности имеет место горизонтально-вертикальная анизотропия с сохранением изотропии турбулентности только в горизонтальной плоскости.

На примере количественных оценок СтО вертикальной компоненты турбулентных течений σ_{zF} впервые построена ее параметризация (10)–(12). Показано, что величина σ_{zF} пропорциональна крутизне волн δ , экспоненциально убывает по z с декрементом, зависящим от ширины спектра, и умень-

шается с ростом интенсивности обрушений волн B_r . В силу качественного (визуального) оценивания величины B_r роль обрушений в формировании турбулентности, наведенной волнами, требует более тщательного количественного изучения в дальнейших экспериментах.

Важно, что построенная параметризация зависимости величины σ_{zF} от параметров системы может быть использована для верификации теоретических моделей явления типа построенных в работах [16–18]. В дальнейшем возможно уточнение параметризации σ_{zF} , ее детализация и расширение для СтО турбулентных составляющих всех компонент течений, наведенных волнами.

3. Горизонтально-вертикальная анизотропия наведенной волнами турбулентности, установленная в терминах σ_{iF} , подтверждается и различием форм частотных спектров $S_{x,y}(f)$ и $S_z(f)$ для горизонтальных и вертикальной компонент скорости.

В работе основное внимание сфокусировано на формах этих спектров в области частот, превышающих частоту пика f_p спектра волн, порождающих течения. Эта область частот определяется как ВЧ-область, в которой $f > 2f_p$.

Эмпирически установлено, что в ВЧ-области спектры горизонтальных турбулентных компонент скорости, $S_x(f)$ и $S_y(f)$, убывают по закону « $-5/3$ », соответствующему классической турбулентности Колмогорова–Обухова [7]. Но для вертикальной компоненты скорости, индуцированной регулярными волнами, при частотах пика $f_p \leq 1.0$ Гц реализуется закон убывания « -2 » (формула (15)). Для нерегулярных механических волн такой закон наблюдается при всех параметрах волнения.

Указанный эмпирический результат установлен впервые, поэтому его теоретическая трактовка в настоящее время отсутствует. С целью продвижения в этом направлении нами предлагаются следующие построения.

Для оценки СДТ из частотных спектров горизонтальных компонент скорости с законами убывания « $-5/3$ » вполне применим подход «замороженной турбулентности» Тейлора, обоснованный в работе [3] и апробированный для случая волн на воде в работах [4, 5, 14, 15, 20]. Этот подход требует надежной оценки средней скорости U «тейлоровского» переноса (формула (16) в разд. 6.1). В нашем случае такой подход реализовать не удастся по причине малой достоверности оценок средних горизонтальных

течений. Причиной этому является зашумленность средних течений фоновыми возвратными течениями в лотке (см. разд. 3). Поэтому оценки СДТ были выполнены только для спектра вертикальных компонент течений вида $S_z(f) \propto f^{-2}$.

С целью решения задачи определения СДТ по спектрам с законами убывания « -2 » из соображений размерности выписаны формулы (17), (18), теоретически обоснованные для лагранжевой турбулентности [7, 24]. Несмотря на то что физическое обоснование формул (17), (18) для полученных в работе эмпирических спектров $S_z(f) \propto f^2$ в настоящее время отсутствует, эти формулы принимаются как феноменологическая гипотеза, на основе которой задача оценки СДТ находит свое решение.

4. Для всех случаев, когда спектры вида $S_z(f) \propto f^{-2}$ имеют место (см. табл. 2), с применением формул (17)–(19) выполнены оценки СДТ ε . Установлено, что величина ε резко растет с ростом амплитуды волн a_0 , заметно убывает с уменьшением их доминантной частоты f_p и уменьшается с ростом глубины z . Из соображений размерности получена полуэмпирическая формула (23), которая качественно передает все установленные зависимости $\varepsilon(a_0, f_p, z)$, отраженные в табл. 2.

Найденная параметризация $\varepsilon(a_0, f_p, z)$ может быть использована для проверки теоретических моделей типа приведенных в работах [16–18]; кроме того, она позволяет проследить и отдельные асимптотики. Например, согласно (23), зависимость $\varepsilon(a_0)$ близка к кубической зависимости от амплитуды волн a_0 (на фиксированной глубине z) вида (2), впервые найденной в работе [12]. Однако, с учетом изменения глубины, зависимость $\varepsilon(a_0)$ усиливается на фактор, зависящий от ширины спектра течений Δf , которая, в свою очередь, зависит от a_0 и z (формула (21)). Этот результат не имеет аналогов.

Что касается зависимости СДТ от глубины измерений, для малых глубин зависимость $\varepsilon(z)$ по формуле (23) близка к обратной по z , что соответствует результату работы [15] (см. формулу (3) Введения и последующий текст). Сопоставление формул (3) и (23) позволяет заметить, что использование только степенной зависимости в формуле (3) для описания $\varepsilon(z)$, по-видимому, имеет очень ограниченную область применимости. Этот вопрос также нуждается в дальнейшем выяснении.

Столь детальное описание оценок СДТ получено впервые, и в дальнейшем оно потребует подтвер-

ждений и доработки. Тем не менее приведенное выше сравнение с результатами иных работ придает найденной параметризации (23) значимую достоверность.

5. Отдельно следует отметить эффект влияния ширины спектра наведенных волнами течений на интенсивность турбулентности (формулы (10)–(12), (21), (23)). Этот эмпирический эффект отмечается первые. В дальнейшем он представляет самостоятельный интерес для детального экспериментального и теоретического изучения.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В сжатом виде полученные результаты заключаются в следующем.

1. Предложена феноменологическая процедура фильтрации волновых составляющих из полных измеренных течений, основанная на отсечении доминантного волнового пика в спектре течений.

2. Рассчитаны стандартные отклонения для измеренных и турбулентных составляющих трех компонент скорости течений, соответственно σ_i и σ_{iF} ($i = x, y, z$). Показано, что степень и характер анизотропии наведенных волнами течений существенно зависят от характера рассматриваемых движений: до фильтрации и после нее.

Для измеренных течений величины σ_x и σ_z близки друг к другу, но в 1.5–4 раза превышают σ_y , т.е. имеет место горизонтально-поперечная анизотропия, обусловленная двумерным характером волнения и превалирующей ролью волновых движений в наведенных течениях (более 70% энергии).

Для величин σ_{iF} , характеризующих интенсивность отфильтрованных турбулентных движений, установлена сильная горизонтально-вертикальная анизотропия, описываемая соотношением $\sigma_{xF} \approx \sigma_{yF} \geq (1.5-3)\sigma_{zF}$.

3. Горизонтально-вертикальная анизотропия турбулентности проявляется и в различии форм частотных спектров для горизонтальных и вертикальной компонент скорости. Интенсивности $S_x(f)$ и $S_y(f)$ близки друг к другу, но намного превышают интенсивность $S_z(f)$, особенно в области частот f , превышающих удвоенную частоту пика спектра волн f_p , которая определяется как ВЧ-область спектра.

Установлено, что в ВЧ-области интенсивности спектров горизонтальных турбулентных компонент скорости, $S_x(f)$ и $S_y(f)$, убывают по закону « $-5/3$ », соответствующему классической турбулентности Колмогорова–Обухова [7]. Но спектры вертикальной компоненты скорости $S_z(f)$ имеют закон убывания « -2 », описываемый формулой (15). Закон $S_z(f) \propto f^{-2}$ для регулярных волн реализуется при частотах пика $f_p \leq 1.0$ Гц, а для нерегулярных волн — при всех параметрах волнения.

Результат $S_z(f) \propto f^{-2}$ не имеет аналогов, а его теоретическое обоснование в настоящее время отсутствует. Предложена феноменологическая гипотеза об аналогии наблюдаемого, $S_z(f) \propto f^{-2}$, и лагранжева спектров турбулентности, позволяющая указать направление возможного объяснения результатов.

4. Для спектров вида $S_z(f) \propto f^{-2}$ построена феноменологическая модель, позволяющая определять скорость диссипации турбулентности (СДТ) ε (формулы (17)–(19)). Выполнены оценки ε , и из соображений размерности получена полуэмпирическая формула (23), качественно передающая все эмпирически установленные зависимости СДТ от параметров системы $\varepsilon(a_0, f_p, z)$, представленные в табл. 2.

Впервые обнаружен эффект влияния ширины спектра наведенных волнами течений на интенсивность турбулентности и величину СДТ (формулы (10)–(12), (21), (23)).

5. Все установленные эмпирические эффекты, параметрические зависимости и их феноменологические трактовки нуждаются в дальнейшем уточнении, детализации и теоретическом обосновании.

Благодарности. Авторы благодарны коллегам из Первого института океанографии, Х. Ма (Hongyu Ma) и Ш. Чангу (Shumin Jiang) и студентам Ху Вангу (Хуе Wang) и Чао Ли (Chao Li) за участие в проведении экспериментов. Авторы также благодарны анонимным рецензентам за их многочисленные замечания, позволившие значительно улучшить текст статьи.

Финансирование. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-05-00161) и Китайским совместным фондом National Natural Science Foundation of China (Grant No 41821004).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. G. Stokes, Trans. Cambr. Phil. Soc. **8**, 441 (1847).
2. M. Longuet-Higgins, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **245**, 535 (1953).
3. J. L. Lumley and E. A. Terray, J. Phys. Oceanogr. **13**, 2000 (1983).
4. S. A. Kitaigorodskii, M. A. Donelan, L. Lumley, and E. A. Terray, J. Phys. Oceanogr. **13**, 1988 (1983).
5. E. A. Terray, M. A. Donelan, Y. C. Agrawal et al., J. Phys. Oceanogr. **26**, 792 (1996).
6. T. S. Van den Bremer and Ø. Breivik, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **376**, 20170104 (2017).
7. A. S. Monin and A. M. Yaglom, *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence*, Vol. 2, The MIT Press, Cambridge (1971).
8. O. M. Phillips, *The Dynamics of the Upper Ocean*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK (1966).
9. P. Janssen, *The Interaction of Ocean Waves and Wind*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK (2004).
10. O. Bühler, *Waves and Mean Flows*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK (2014).
11. F. Qiao, Y. Yuan, J. Deng et al., Phil. Trans. Roy. Soc. London A **374**, 20150201 (2016).
12. A. V. Babanin, Geophys. Res. Lett. **33**, L20605 (2006).
13. A. V. Babanin and B. K. Haus, J. Phys. Oceanogr. **39**, 2675 (2009).
14. A. Alberello, F. Frascoli, M. Onorato, and A. Toffoli, Wave Motion **84**, 81 (2019).
15. J. H. Lee, J. P. Monty, J. Elsnab et al., J. Phys. Oceanogr. **47**, 1145 (2017).
16. A. Y. Benilov, J. Geophys. Res. **117**, C00J30 (2012).
17. A. V. Babanin and D. Chalikov, J. Geophys. Res. **117**, C06010 (2012).
18. W. Tsai, S. Chen, and G. Lu, J. Phys. Oceanogr. **45**, 174 (2015).

19. I. B. Savelyev, E. Maheiner, and D. Chalikov, *J. Geophys. Res.* **117**, C00J13 (2012).
20. В. Г. Полников, Г. А. Байдаков, Ю. И. Троицкая, *Изв. РАН, Физ. атм. и океана* **55**, 127 (2019).
21. В. Г. Полников, Г. А. Байдаков, *Изв. РАН, Физ. атм. и океана* **56**, 234 (2020).
22. S. M. Kay, *Modern Spectral Estimation, Theory and Application*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, NJ (1988).
23. В. В. Ефимов, Г. Н. Христофоров, *Изв. АН СССР, Физ. атм. и океана* **7**, 1290 (1971).
24. Г. С. Голицын, *Статистика и динамика природных процессов и явлений*, КРАСАНД, Москва (2012).

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ РЕЖИМЫ В СИСТЕМЕ НЕИДЕНТИЧНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ КУРАМОТО – БАТТОГТОХА

М. И. Болотов^{a*}, *Л. А. Смирнов*^{a,b**}, *Е. С. Бубнова*^a,
Г. В. Осипов^{a***}, *А. С. Пиковский*^{c,a****}

^a Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего»,
Институт информационных технологий, математики и механики,
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

^b Институт прикладной физики Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

^c Institute for Physics and Astronomy, University of Potsdam
D-14476, Potsdam-Golm, Germany

Поступила в редакцию 11 августа 2020 г.,
после переработки 11 августа 2020 г.
Принята к публикации 9 сентября 2020 г.

Для ансамбля нелокально связанных неидентичных фазовых осцилляторов рассмотрены пространственно-временные состояния, соответствующие различным режимам долговременной эволюции такого рода системы. Найдены однородные, градиентные и неоднородные стационарные решения уравнений Отта–Антонсена, соответствующие ключевым вариантам реализующегося коллективного вращательного движения элементов обсуждаемой среды с ненулевыми мезоскопическими характеристиками, определяющими степень когерентности динамики расположенных поблизости частиц. Описаны процедуры поиска класса неоднородных решений как неподвижных точек вспомогательного точечного отображения и определения устойчивости на основе анализа спектра собственных значений композитного оператора. Продемонстрированы и описаны статические и бризерные кластерные режимы, а также режимы с нерегулярным поведением усредненных комплексных полей, к которым, в частности, относится локальный параметр порядка.

DOI: 10.31857/S0044451021010120

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время системы связанных осцилляторов являются актуальной темой для теоретических и экспериментальных исследований. Обусловлено это, прежде всего, тем, что данные системы представляют собой базовые модели в различных областях современной науки и техники. С их помощью удастся адекватно описывать не только механические объекты (в частности, взаимодействующие маятники [1, 2], закрепленные на общей осно-

ве метрономы [3, 4]), но и разнообразные процессы в электрических (в том числе силовых) сетях [5, 6], твердотельных структурах [7, 8], молекулярных цепочках [9, 10] и т. д. Ссылки на конкретные экспериментальные и теоретические исследования можно найти, например, в книгах [11, 12] и обзоре [13].

Целый ряд ключевых фундаментальных явлений, свойственных нелинейным осцилляторным средам различной по своей сути природы, нередко и достаточно успешно удается рассмотреть в рамках фазового приближения [12, 14, 15]. К таким явлениям, в частности, относится синхронизация и возникновение корреляций в системе [1, 11]. Переход от более точных и конкретных теоретических постановок к универсальному описанию с помощью динамических уравнений для фазовых переменных позволя-

* E-mail: maksim.bolotov@itmm.unn.ru

** E-mail: smirnov_lev@appl.sci-unnov.ru

*** E-mail: osipov@vmk.unn.ru

**** E-mail: pikovsky@uni-potsdam.de

ет выявить единые принципы и общие закономерности в поведении физических, химических, биологических и социальных систем. При этом для изучения поведения популяции осцилляторов, взаимодействующих через среднее поле, чаще всего используется широко известная модель Курамото с глобальной связью и ее разнообразные модификации [11,13,16–22]. Отличительная особенность такого рода топологии связи состоит в отсутствии какой-либо информации о положении элементов ансамбля в координатном пространстве. Поэтому в данном случае, несмотря на то, что возможен процесс объединения осцилляторов в кластеры, нельзя поставить задачи о формировании пространственных структур и распространении волн. Однако картина принципиально меняется, если взаимодействие в среде носит не глобальный, а локальный или нелокальный характер, так как система становится пространственно-упорядоченной. В ней автоматически пропадает полная симметрия относительно перестановок элементов, и их нумерация начинает играть важную роль при изучении динамики осцилляторных популяций.

Нелокальную связь математически можно представить, например, в виде оператора свертки. Ядро этого оператора полностью определяет характер взаимодействия внутри такого рода осцилляторной среды. Несмотря на то, что в литературе рассматривались, в том числе, и дальнедействующие связи (см., например, [23]), убывающие по степенному закону, в основном значительные и во многом неожиданные результаты были получены для ядер конечного радиуса, а также с экспоненциально убывающими хвостами [24–26]. Прежде всего, среди данных результатов стоит выделить образование в ансамблях идентичных элементов химерных состояний, которые характеризуются сосуществованием синхронных и асинхронных групп осцилляторов. На сегодняшний день подобные нетривиальные состояния остаются одним из привлекательных и интригующих эффектов для многих исследователей в области нелинейной динамики (см. недавние обзоры [24–29]). Этот интерес обусловлен тем, что формирование химер происходит вследствие фундаментального явления нарушения симметрии [30], которое в распределенных популяциях проявляется в том, что несмотря на то, что однородное полностью синхронное состояние существует и устойчиво, система (для целого ряда начальных условий) в процессе долговременной эволюции может прийти к совершенно другому (более сложному) режиму своей динамики, когда наряду с группами взаимно синхронных

элементов имеется значительная часть асинхронных осцилляторов.

Нетривиальные состояния в средах, состоящих из фазовых осцилляторов с нелокальной связью, могут быть описаны как стационарные структуры с пространственно-неоднородным профилем комплексного параметра порядка, который определяется локально как мера когерентности мезоскопической группы соседних элементов. В частности, в данном контексте для химерных режимов в распределенных ансамблях и популяциях с композитной топологией абсолютное значение такого локального комплексного параметра порядка обращается тождественно в единицу там, где соседние осцилляторы синхронны, и меньше единицы в областях с асинхронным поведением элементов [24–28, 31–35].

Среди проводимых исследований особое место занимают системы, состоящие из неидентичных осцилляторов [13, 18, 20–23, 36–43]. В таких системах каждый осциллятор обладает своей собственной частотой, значение которой зависит от свойств конкретного элемента. В ансамбле, состоящем из большого числа осцилляторов, вполне естественно считать, что эти частоты выбираются случайным образом, и их распределения подчиняется некоторому закону, который заранее определен из физических соображений. Если рассматриваются популяции с нелокальным взаимодействием, то можно сказать, что появляется пространственный беспорядок, способный существенным образом повлиять как на когерентность в группе соседних осцилляторов, так и на динамику ансамбля в целом. С одной стороны, его наличие усложняет анализ долговременного поведения и устанавливающихся в итоге состояний среды, так как появляются еще дополнительные параметры, ответственные за разброс частот. Можно ожидать возникновения каких-то новых более сложных режимов, которые отсутствуют в случае идентичных осцилляторов. От степени пространственного беспорядка зависят бифуркационные значения других величин, при которых происходит качественное изменение в возможных сценариях долговременной эволюции. С другой стороны, появляется потенциал для того, чтобы продвинуться в аналитическом описании результатов численного моделирования. Это прежде всего связано с тем, что полностью когерентный режим не может реализовываться в подобных системах. Поэтому вырожденная ситуация, когда модуль локального комплексного параметра порядка тождественно обращается в единицу, становится невозможной.

В настоящее время распределенные системы, состоящие из неидентичных нелокально связанных осцилляторов, активно изучаются с различных точек зрения. Из большого числа статей, вышедших за последнее десятилетие по данному направлению исследования, здесь выделено лишь несколько ключевых работ [37–43]. В частности, в работах [37, 38] представлены долгоживущие состояния, которые характеризуются присутствием областей с разной степенью когерентности частиц. Такого рода состояния представляют собой аналоги химер и трансформируются в них в пределе нулевого разброса по частотам. Там же впервые продемонстрировано, что для анализа данных режимов можно эффективно использовать редукцию Отта – Антонсена [20–22], которая позволяет получить самосогласованные динамические уравнения для макроскопических комплексных полей, одним из которых оказывается локальный параметр порядка. В статье [39] обсуждается обобщенная фазовая модель, которая может быть использована для описания сетей нелокально взаимодействующих между собой элементов, индивидуальные характеристики которых различаются. Ключевой особенностью рассматриваемой в [39] системы является присутствие в связи между двумя парами элементов запаздывания, выбираемого случайным образом и вносящего дополнительный беспорядок. В частности, было показано, что если значения управляющих параметров близки к критическим, при которых однородное частично синхронное состояние теряет свою устойчивость, в процессе своей эволюции популяция неидентичных фазовых осцилляторов с временной задержкой в целом ряде случаев приходит к транзиентным состояниям, которые отличаются наличием нескольких (двух и более) экстремумов в распределении усредненных величин, что, в свою очередь, указывает на то, что среда разбивается на регулярные (во времени) чередующиеся (в пространстве) участки с повышенной и пониженной когерентностью. В работах [44, 45] (в случае, когда среда состоит из одинаковых частиц, см., например, публикации [40, 41, 46]) проанализирован еще один из возможных типичных режимов, на который может выйти ансамбль осцилляторов. Ниже будем называть его градиентным, так как он выделяется тем, что в среднем фаза в произвольный момент времени при обходе замкнутой в кольцо системы увеличивается на $2\pi q$, где q — целое число. В статье [42] внимание авторов было сосредоточено на состояниях с нерегулярным (хаотическим) поведением макроскопических полей. В том числе, была предпринята попытка классифи-

цировать наблюдаемые турбулентные режимы. А в недавно вышедшей работе [43] обсуждалось существование при наличии разброса собственных частот и структурные особенности бризерных квазилинейных режимов, которые характеризуются, с одной стороны, периодическим изменением во времени амплитуд комплексных мезоскопических полей в каждой точке пространства, а с другой, сосуществованием областей с повышенной и пониженной когерентностью. Отметим, что такие режимы были ранее обнаружены для систем идентичных фазовых осцилляторов (см., например, [32, 33]). Кроме того, особо подчеркнем, что в большинстве из перечисленных публикаций в качестве ядер интегрального оператора, описывающего нелокальное взаимодействие, использовались либо функции с конечным числом членов в соответствующем ряде Фурье, либо прямоугольные распределения конечной ширины.

В предлагаемой работе наряду с изложением оригинальных результатов для ядер с экспоненциально убывающими хвостами предпринята так же попытка некоторой систематизации и обобщения ранее полученных данных и встречающихся в литературе сведений. Изучаются синхронные и асинхронные режимы и соответствующие им пространственно-временные структуры в ансамбле слабонеидентичных нелокально связанных фазовых осцилляторов, равномерно распределенных на кольце. При теоретическом исследовании используется подход Отта – Антонсена [20–22]. Характер взаимодействия (экспоненциального типа) внутри среды позволяет перейти от интегро-дифференциального уравнения для параметра порядка к самосогласованной системе дифференциальных уравнений в частных производных для двух комплексных полей аналогично тому, как это было сделано в работах [31–33]. Неидентичность элементов среды является ключевой особенностью, которая позволяет продвинуться прежде всего в изучении разнообразия стационарных неоднородных профилей локального параметра порядка и их устойчивости по сравнению с выполненными нами ранее исследованиями систем идентичных осцилляторов [31–33, 46], так как интересующие нас комплексные поля представляют собой гладкие функции, которые по модулю меньше единицы. Численное моделирование проводится как в рамках исходной модели популяции, состоящей из большого количества фазовых осцилляторов с собственными частотами, выбранными случайно согласно распределению Лоренца, так и на базе замкнутых самосогласованных уравнений для макроскопических (усредненных) величин.

Математическая постановка изучаемой проблемы приводится в разд. 2. Простейшие решения с постоянным по модулю значением параметра порядка описаны в разд. 3. Здесь речь идет об асинхронных и частично синхронных однородных режимах, а также о градиентных состояниях. В разд. 4 приводятся сначала базовые сведения и соотношения, лежащие в основе предлагаемого нами метода поиска стационарных (равномерно вращающихся) неоднородных решений уравнения Отта – Антонсена с периодическими граничными условиями. Далее представлены ключевые аспекты линейного анализа устойчивости данных нетривиальных пространственных структур, которым можно поставить в соответствие квазихимерные статические состояния исходной фазовой модели. Затем обсуждаются основные моменты и преимущества процедуры построения семейств подобных образований с разным числом областей повышенной и пониженной когерентности и формулируются полученные в рамках такого подхода результаты. Кроме того, сделанные выводы подкрепляются прямым численным моделированием динамики распределенных фаз и локального комплексного параметра порядка. Классы возможных наблюдаемых режимов с более сложным (периодическим или нерегулярным) поведением (как в пространстве, так и во времени) мезоскопических (усредненных) полей обсуждаются в разд. 5. В Заключении подводятся итоги проведенного исследования.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим ансамбль из N нелокально связанных неидентичных осцилляторов ($n = 1, 2, \dots, N$), равномерно распределенных на отрезке длины L с периодическими граничными условиями на концах [37–39, 41–43]. Данную систему будем описывать в рамках фазового приближения с помощью динамических переменных $\varphi_n(t)$, изменение каждой из которых во времени задается уравнением

$$\frac{d\varphi_n}{dt} = \omega_n + \text{Im} \left(H_n(t) e^{-i\varphi_n(t)} \right), \quad (1)$$

где ω_n ($n = 1, 2, \dots, N$) — собственные частоты осцилляторов. Как и в большинстве работ [18, 37–39, 41–43], предполагается, что величины ω_n выбраны случайным образом и имеют функцию распределения Лоренца (или Коши)

$$\pi g(\omega) = \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} \quad (2)$$

со средним значением ω_0 и полушириной γ .

Действующее на осцилляторы поле $H_n(t)$ имеет общий для всех элементов фазовый сдвиг α и определяется через дискретный оператор свертки:

$$H_n(t) = e^{-i\alpha} \frac{L}{N} \sum_{\tilde{n}=1}^N G \left(\frac{L}{N} (n - \tilde{n}) \right) e^{i\varphi_{\tilde{n}}(t)}. \quad (3)$$

Его ядро $G(x)$ характеризует взаимодействие внутри обсуждаемой среды и удовлетворяет требованию единичной нормировки. В качестве $G(x)$ выбрана функция

$$G(x) = \kappa \text{ch}(\kappa(|x| - L/2)) / 2 \text{sh}(\kappa L/2), \quad (4)$$

хорошо аппроксимирующая случай слабой нелокальной связи [31–33, 46]. Она достаточно адекватно описывает эффекты, связанные с влиянием на произвольно выделенный элемент не только его ближайших соседей, но также и других (более далеких) осцилляторов. Естественно предположить, что это влияние относительно быстро уменьшается с увеличением расстояния между частицами. Особо подчеркнем, что выражение (4) в пределе $\kappa L \rightarrow +\infty$ переходит в экспоненциальное ядро

$$G_{KB}(x) = \kappa \exp(-\kappa|x|/2)$$

из классической работы Курамото и Баттогтоха [47]. Фактически, и $G_{KB}(x)$, и $G(x)$ в форме (4) являются функцией Грина неоднородного уравнения Гельмгольца с источником в правой части. Однако в первом случае система считается распределенной на всем (бесконечном) интервале от $-\infty$ до $+\infty$, а вторая же ситуация отвечает среде конечной длины, замкнутой в кольцо, т. е. для которой выполнены периодические граничные условия.

Сделаем еще ряд замечаний, которые позволяют сократить число параметров в рассматриваемой системе. Так, например, совокупность соотношений (3) и (4) инвариантно относительно масштабных преобразований. Благодаря данному обстоятельству без ограничения общности коэффициент κ можно принять равным единице. Поэтому в дальнейшем будем считать, что $\kappa = 1$, а сила связи между элементами, фактически, определяется длиной среды L . Кроме того, путем перехода во вращающуюся с угловой скоростью ω_0 систему координат несложно исключить ω_0 из обсуждения с точки зрения управляющих параметров. Следовательно, уже на этапе постановки задачи целесообразно положить значение ω_0 равным нулю, т. е. ниже $\omega_0 = 0$. Таким образом, для характерных режимов долговременной эволюции обсуждаемого ансамбля нелокально-взаимодействующих осцилляторов определяющими являются три величины L , γ и α . Отметим также, что

случай идентичных осцилляторов ($\gamma = 0$) уже исследовался нами в работах [31–33, 46].

Сформулированная выше модель, состоящая из конечного числа N осцилляторов и описываемая уравнениями (1)–(4) имеет достаточно широкий спектр практических приложений в различных областях науки и техники [11, 12, 15]. Однако для более глубокого понимания полученных в ходе расчетов результатов нередко бывает полезен и даже чаще всего оказывается необходим анализ динамических свойств и структурных особенностей изучаемой системы в термодинамическом пределе, когда считается, что в ней содержится бесконечно большое количество элементов, т. е. $N \rightarrow \infty$. В этом случае от выражений (1) и (3) переходят к континуальному варианту их записи:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \omega + \text{Im} \left(H(x, t) e^{-i\phi(x, t)} \right), \quad (5)$$

$$H(x, t) = e^{-i\alpha} \int_0^L G(x - \tilde{x}) e^{i\phi(\tilde{x}, t)} d\tilde{x}. \quad (6)$$

Здесь, согласно нашему предположению, в полном соответствии с исходной дискретной моделью величина ω в каждой точке x интервала от 0 до L задается независимо случайным образом с использованием вероятностного распределения (2). Обратим внимание также на то, что интеграл в представлении (6) комплексного поля $H(x, t)$, отвечающего за нелокальное взаимодействие, стоит воспринимать как предел интегральных сумм Лебега [48]. Таким образом, в (5) и (6) не требуется гладкости функции $\phi(x, t)$ по пространственной координате x . Данной чертой отсутствия гладкости обладают все обсуждаемые режимы поведения среды фазовых осцилляторов, что существенно затрудняет задачу их анализа и классификации на микроскопическом уровне рассмотрения, ограничивающемся только соотношениями (1)–(6). Однако переход к мезоскопическим полям в пределе $N \rightarrow \infty$ дает возможность значительно продвинуться в решении этой задачи. Основные моменты такого перехода состоят в следующем.

С одной стороны, с помощью процедуры усреднения (см., например, [19–22, 26]) можно определить локальный параметр порядка $Z(x, t) = \langle e^{i\phi} \rangle_{loc}$, представляющий собой непрерывную комплексную функцию координаты x и времени t и удовлетворяющую неравенству $|Z(x, t)| \leq 1$. В случае, когда $|Z(x, t)| = 1$, все осцилляторы, находящиеся вблизи точки x , синхронны по фазе. При выполнении условия $0 < |Z(x, t)| < 1$ принято говорить, что наблюда-

ется режим частичной синхронизации. В этой ситуации в движении частиц наблюдаются корреляции. Равенство $|Z(x, t)| = 0$ указывает на то, что элементы ансамбля вращаются полностью асинхронно. Таким образом, как и для систем с глобальным взаимодействием, при исследовании систем с нелокальной связью комплексный параметр порядка $Z(x, t)$ играет важную роль, так как его амплитуда характеризует степень локальной синхронизации в популяции, а фаза дает представление о среднем значении, вокруг которого разбросана величина ϕ в окрестности точки с координатой x .

С другой стороны, ключевые аспекты эволюции осцилляторной среды в рамках обсуждаемой фазовой модели в термодинамическом пределе могут быть описаны путем введения плотности вероятности $\rho(\varphi, \omega, x, t)$ распределения динамической переменной φ при заданном ω и определенных x, t . В частности, очевидно, что $Z(x, t)$ определяется непосредственно с помощью $\rho(\varphi, \omega, x, t)$ как

$$Z(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\pi}^{+\pi} \rho(\varphi, \omega, x, t) e^{i\varphi(x, t)} d\varphi d\omega. \quad (7)$$

В свою очередь, действительная функция $\rho(\varphi, \omega, x, t)$ должна удовлетворять уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (\omega \rho + \text{Im}(H e^{-i\varphi}) \rho) = 0. \quad (8)$$

В работах [20, 21] для данного уравнения с $H = H(t)$ найдено притягивающее многообразие. Впоследствии разработанный в [20, 21] подход и полученные там результаты были обобщены на случай, когда действующее на элементы ансамбля поле H зависит не только от времени t , но и от пространственной координаты x , т. е. в (8) в такой ситуации $H = H(x, t)$ (см., например, ссылки [22, 37], а также обзор [26]). Здесь лишь кратко остановимся на базовой идее этого метода и вытекающих из него следствиях.

Принимая во внимание то, что собственные частоты фазовых осцилляторов и в (1), и в (5) выбираются независимо, а также учитывая условие цикличности $\rho(\varphi, \omega, x, t) = \rho(\varphi + 2\pi, \omega, x, t)$, решение уравнения (8) целесообразно искать в виде разложения

$$\rho(\varphi, \omega, x, t) = \frac{g(\omega)}{2\pi} \times \left(1 + \sum_{m=1}^{+\infty} \left[a_m(\omega, x, t) e^{im\varphi} + \text{C.c.} \right] \right), \quad (9)$$

являющегося, фактически, рядом Фурье по динамической переменной φ . Для интересующего нас многообразия Отта–Антонсена (называемого так по фамилиям авторов статей [20, 21]) в спектральном представлении (9) все коэффициенты $a_m(\omega, x, t)$ с индексами $m > 1$ выражаются через множитель $a_1(\omega, x, t)$, стоящий при первой гармонике, путем возведения его в соответствующую степень:

$$a_m(\omega, x, t) = a_1^m(\omega, x, t). \quad (10)$$

При этом поведение $a_1(\omega, x, t)$ описывается уравнением

$$\frac{\partial a_1}{\partial t} = -i\omega a_1 + \frac{1}{2}(H^* - H a_1^2), \quad (11)$$

в чем несложно убедиться с помощью прямой подстановки (9) совместно с (10) в (8).

Далее, следуя предложенной в [20, 21] (см. также [22, 26, 37]) общей концепции и задействовав в равенстве (7) разложение (9), легко устанавливается связь между $a_1(\omega, x, t)$ и $Z(x, t)$, из которой, воспользовавшись сделанным нами ранее предположением о том, что функция $g(\omega)$ имеет форму распре-

деления Коши (2), после интегрирования по ω вытекает, что в данной ситуации $Z(x, t) = a_1^*(-i\gamma, x, t)$. Отметим, что здесь учтено, что $\omega_0 = 0$. Тогда, исходя из (11), для локального комплексного параметра порядка $Z(x, t)$ получаем эволюционное интегро-дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = -\gamma Z + \frac{1}{2}(H - H^* Z^2), \quad (12)$$

где $H(x, t)$ выражается уже непосредственно через $Z(x, t)$ с помощью оператора свертки

$$H(x, t) = e^{-i\alpha} \int_0^L G(x - \tilde{x}) Z(\tilde{x}, t) d\tilde{x}, \quad (13)$$

а интеграл по пространству в (13) следует уже воспринимать в смысле Римана (в отличие от соотношения (6)). Кроме того, для многообразия Отта–Антонсена с учетом (2) по $Z(x, t)$ можно восстановить плотность вероятности $f(\varphi, x, t)$ разброса φ при определенных x и t [37, 38]:

$$f(\varphi, x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\varphi, \omega, x, t) d\omega = \begin{cases} \delta(\varphi - \arg(Z)), & |Z|=1, \\ (1 - |Z|^2)/2\pi(1 - 2|Z|\cos(\varphi - \arg(Z)) + |Z|^2), & |Z|<1, \end{cases} \quad (14)$$

применив формулу для суммы тригонометрической прогрессии. Это означает, что профилю $Z(x, t)$ можно поставить в соответствие распределение фаз $\varphi(x, t)$ (и наоборот, естественно, тоже) в любой заданный момент времени.

Все перечисленные выше обстоятельства делают методы, базирующиеся на идеях работ [20–22] и основное внимание уделяющие анализу поведения мезоскопических полей $Z(x, t)$ и $H(x, t)$, весьма эффективным инструментом изучения и предсказания возможных ключевых режимов поведения интересующей нас многочастичной модели (1)–(4). В представляемом далее материале нами сделан еще один шаг, позволяющий упростить исследование пространственной структуры $Z(x, t)$ и $H(x, t)$. Используя для ядра $G(x)$ конкретный вид (4), от соотношения (13) несложно перейти к эквивалентному ему дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} - H = -Z e^{-i\alpha} \quad (15)$$

с периодическими граничными условиями на концах интервала $[0, L]$, а именно

$$H(0, t) = H(L, t), \quad \frac{\partial H}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial H}{\partial x}(L, t) = 0. \quad (16)$$

Таким образом, для исходной задачи (1)–(4) в пределе $N \rightarrow \infty$, построена редукция, заключающаяся в переходе от рассмотрения негладких профилей фаз к работе с непрерывными (на характерных масштабах среды) распределениями $Z(x, t)$ и $H(x, t)$. Как будет показано ниже, при анализе коллективных эффектов в системе (1)–(4), содержащих большое число элементов N , для более глубокого понимания протекающих процессов целесообразно изучать как динамику ансамбля фазовых осцилляторов, так и эволюцию комплексного локального параметра порядка $Z(x, t)$, задаваемого системой дифференциальных уравнений в частных производных (12), (15) с граничными условиями (16).

Прежде чем переходить к последовательному и подробному изложению материала кратко обозначим типичные устанавливающиеся в ходе численных расчетов режимы поведения замкнутой в кольцо среды нелокально взаимодействующих элементов. Выполненный в рамках модели (1)–(4) и проведенный на базе моделирования самосогласованных уравнений (12), (15) анализ показал существование следующих устойчивых структурно различных состояний:

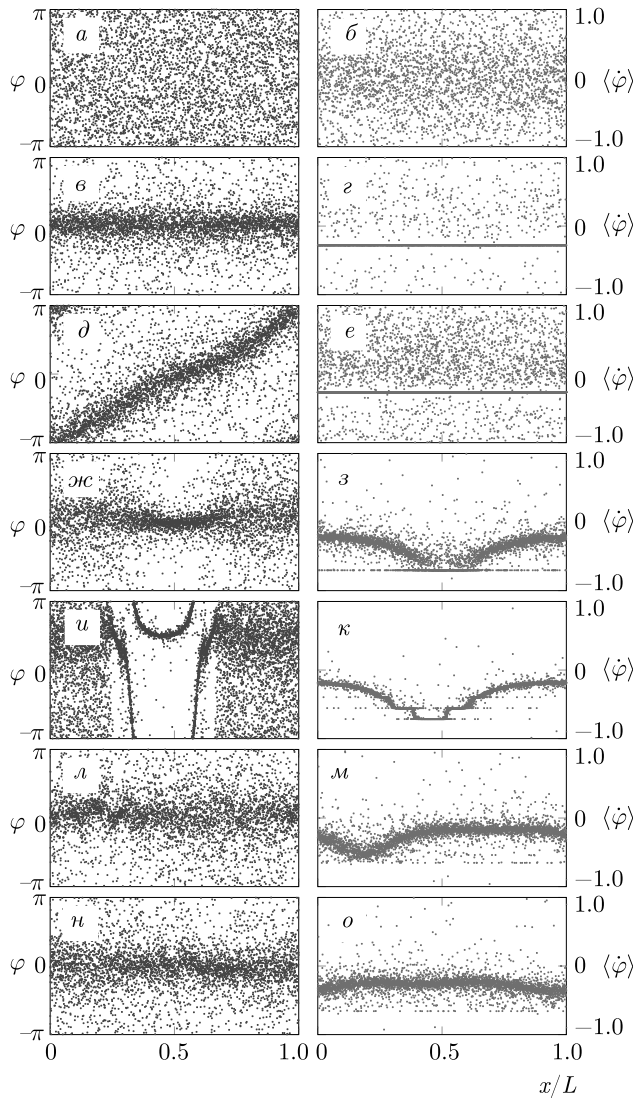


Рис. 1. (В цвете онлайн) Режимы, реализующиеся в системе (1)–(4). Левая колонка — мгновенные снимки фаз φ_n . Правая колонка — средние частоты осцилляторов $\langle \dot{\varphi} \rangle$. *а, б*) Полностью асинхронное состояние при $\alpha = 0.2$, $\gamma = 0.5$, $L = 5.0$. *в, г*) Однородный частично синхронный режим при $\alpha = 0.4$, $\gamma = 0.25$, $L = 6.0$. *д, е*) Частично синхронный градиентный режим при $\alpha = 0.4$, $\gamma = 0.25$, $L = 25.0$. *ж, з*) Режим кластерной синхронизации при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$, $L = 6.0$. *и, к*) Бризерный кластерный режим при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.002$, $L = 7.005$. *л, м*) Режим перемежаемости при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$, $L = 8.837$. *н, о*) Турбулентный режим при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$, $L = 16.655$

- 1) полностью асинхронное состояние (рис. 1*а, б*);
- 2) однородное частично синхронное состояние (рис. 1*в, г*);
- 3) частично синхронное состояние с градиентным распределением фаз (рис. 1*д, е*);

4) пространственно-неоднородное кластерное частично синхронное состояние (рис. 1*ж, з*), в котором явным образом выделяются несколько (чаще всего статичных) участков с большей или меньшей степенью когерентности осцилляторов;

5) бризерный кластерный режим, когда сосуществуют несколько синхронных кластеров с различной средней частотой (рис. 1*и, к*);

6) режим перемежаемости, когда на пространственно-временной диаграмме интервалы с нерегулярной динамикой усредненных полей сменяются продолжительными участками с их регулярным поведением (что можно трактовать как области кластерной синхронизации) (рис. 1*л, м*);

7) режим турбулентности со сложным нерегулярным поведением мезоскопических характеристик системы, когда не удастся выделить протяженные временные интервалы, в течение которых наблюдается квазистатическая структура пространственных областей с различной степенью когерентности (рис. 1*н, о*).

Отметим, что второй и третий виды состояний в пределе бесконечно малого разброса собственных частот ($\gamma \rightarrow 0$) трансформируются в полностью синхронные, а образования, описанные в четвертом и пятом пунктах, для идентичных частиц превращаются в стационарные и бризерные химеры [26, 31–34]. Подчеркнем также то, что рис. 1 не полностью отражает все особенности последних двух из перечисленных режимов. Однако несложно заметить, что для таких состояний ансамбля с конечным количеством элементов N уровень фазовой когерентности меняется со временем в окрестности каждой пространственной точки, а в распределении средних частот не выделяются синхронные кластеры, состоящие из макроскопического числа осцилляторов.

Ниже, для того чтобы понять и объяснить специфику и условия установления каждого из режимов, наблюдаемых при прямом моделировании системы (1)–(4), будем придерживаться следующей стратегии. В первую очередь попытаемся найти в термодинамическом пределе соответствующие решения уравнения Отта–Антонсена (12), (15) с граничными условиями (16) и проанализировать их устойчивость, а затем проведем проверку полученных аналитических результатов численно в рамках исходной модели (1)–(4).

3. СОСТОЯНИЯ С РАВНОМЕРНО РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ПО АНСАМБЛЮ СТЕПЕНЬЮ ФАЗОВОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ СОСЕДНИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

3.1. Однородные состояния

Начнем наш анализ с рассмотрения наиболее простого класса решений самосогласованной системы уравнений (12), (15) с граничными условиями (16). Речь идет о стационарных однородных решениях, для которых модуль локального комплексного параметра порядка $Z(x, t)$ представляет собой постоянную величину, а фаза растет линейно со временем и не зависит от пространственной координаты x . При этом в исходной модели (1)–(4) наблюдается в среднем равномерное вращение значительной группы осцилляторов, а степень когерентности элементов в каждой точке среды одинакова. В данном случае функции $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ будем искать в виде

$$Z(x, t) = z_0 e^{i\Omega t}, \quad H(x, t) = h_0 e^{i\Omega t}, \quad (17)$$

где с помощью z_0 и h_0 обозначены неизменные (согласно нашему предположению) амплитуды усредненных полей, Ω (здесь и в других ситуациях далее) играет роль параметра, который задает их общую несущую частоту. После подстановки (17) в соотношения (12) и (15) получим следующую связь между z_0 , h_0 и Ω :

$$2z_0(i\Omega + \gamma) = z_0(h_0 - h_0^* z_0^2), \quad h_0 = z_0 e^{-i\alpha}. \quad (18)$$

В первую очередь стоит отметить, что если $z_0 = h_0 = z_{as} = 0$, то очевидно, что алгебраические равенства (18) выполняются при любых α и γ независимо от длины среды L . Кроме того, величина Ω остается неопределенной, т. е. существует некий произвол в ее выборе (в том числе Ω можно положить равной нулю). Такое тривиальное решение уравнений Отта – Антонсена (12), (15) отвечает полностью асинхронному поведению элементов в обсуждаемом ансамбле, когда фазы осцилляторов распределены равномерно в интервале от $-\pi$ до π в каждый момент времени.

Однако нас прежде всего интересуют установленные режимы, для которых мезоскопические характеристики распределенной популяции имеют конечные значения, что указывает на присутствие корреляций в движении соседних элементов. Из соотношений (18) непосредственно следует, что подобные частично синхронные состояния можно найти в рамках рассматриваемого здесь класса стационарных однородных решений. Существуют данные коллективные моды, когда управляющие параметры α

и γ удовлетворяют условию $2\gamma < \cos \alpha$ (так как γ является полушириной распределения собственных частот, то $\gamma \geq 0$). В этом случае легко убедиться в том, что равенствам (18) можно удовлетворить, если

$$\begin{aligned} |z_0|^2 = r_{hps}^2 &= 1 - 2\gamma / \cos \alpha, \\ \Omega_{hps} &= \gamma \operatorname{tg} \alpha - \sin \alpha. \end{aligned} \quad (19)$$

Подчеркнем, что для (19) очевидным образом выполняется требование $|z_0| \leq 1$, которое вытекает из определения локального параметра порядка. Отметим также, что согласно выражениям (19) длина L системы не оказывает влияния на само наличие однородных частично когерентных режимов. Несмотря на то, что результаты численного моделирования во многом согласуются со сделанными в ходе проведенного выше анализа выводами (в частности, уровень синхронизации, вычисленный по данным расчетов в рамках модели (1)–(4), с достаточно хорошей степенью точности совпадает с оценкой (19)) для целого ряда ситуаций, когда, например, величина фазовой расстройки α близка к $\pi/2$ ($\alpha \lesssim \pi/2$), а γ чуть меньше $\cos \alpha/2$ ($\gamma \lesssim \cos \alpha/2$), однородные частично синхронные состояния перестают наблюдаться, начиная с некоторого значения L . Ниже будет представлено объяснение и сформулированы причины такого поведения исходной системы (1)–(4) на базе линейного анализа устойчивости стационарных решений (19) уравнений Отта – Антонсена (12), (15). Но перед этим рассмотрим еще один класс режимов, для которых уровень когерентности осцилляторов оказывается одинаковым вдоль всей среды.

3.2. Градиентные состояния

В случае идентичных осцилляторов, когда $\gamma = 0$, обсуждаемые в предыдущем разделе однородные частично когерентные состояния переходят в полностью синхронные, для которых $|Z(x, t)| = 1$ при каждом x в любой момент времени t , что непосредственно видно из соотношений (19) в пределе $\gamma \rightarrow 0$. Однако для распределенного в пространстве ансамбля, состоящего из нелокально взаимодействующих частиц с одинаковыми индивидуальными характеристиками, есть еще один режим с $|Z(x, t)| = 1$ всюду. Отличительной чертой данного режима является наличие постоянной разности фаз при переходе от точки к точке (для произвольно выбранного n выполняется равенство $\varphi_{n+1}(t) - \varphi_n(t) = \Delta\varphi = \text{const} \neq 0$), так что полный набег фазы при прохождении вдоль всей среды отличен от нуля. Подобное состояние в англоязычной литературе называют «splay state» [40, 44, 45]. Вполне естественно

ожидать присутствия их аналогов при $\gamma \neq 0$ для исследуемой нами модели (1)–(4). Случайный разброс собственных частот осцилляторов, конечно, должен привести к тому, что распределение фаз тоже станет нерегулярным. Однако, несмотря на видимый беспорядок, степень которого зависит от γ , поведение мезоскопических полей останется тем же, что и при $\gamma = 0$, и в среднем общие тенденции (прежде всего наклон) в профиле $\varphi(x, t)$ (или $\varphi_n(t)$) сохранятся. Поэтому такие состояния далее будем называть градиентными. Отметим, что ранее уже предпринимались попытки их изучения, но для ядер $G(x)$ другого вида (см., например, [40, 41, 44, 45]).

Учитывая то, что для градиентных режимов, так же как и для рассмотренных выше однородных состояний, характерно постоянное значение модуля локального параметра порядка $Z(x, t)$ по всей длине среды, будем искать поля $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ в схожем с (17) виде

$$Z(x, t) = z_0 e^{i\Omega t - iQx}, \quad H(x, t) = h_0 e^{i\Omega t - iQx} \quad (20)$$

с тем лишь отличием, что в (20) в показателе экспоненты появляется дополнительное слагаемое, пропорциональное пространственной координате x и ответственное за общий наклон фазового фронта функций $Z(x, t)$ и $H(x, t)$. Коэффициент Q такой линейной зависимости в силу периодических граничных условий должен быть определен как $Q = 2\pi q/L$, где целое (в интересующей нас здесь ситуации отличное от нуля) число q ($q = \pm 1, \pm 2, \dots$) указывает на количество оборотов на 2π , которое совершит усредненная фаза при полном обходе системы. Подставив (20) в уравнения Отта – Антонсена (12), (15), получим два алгебраических равенства:

$$2(i\Omega + \gamma)z_0 = h_0 - h_0^* z_0^2, \quad (1 + Q^2)h_0 = z_0 e^{-i\alpha}, \quad (21)$$

для которых легко находится нетривиальное решение

$$|z_0|^2 = r_{gps}^2 = 1 - \frac{2\gamma(1 + Q^2)}{\cos \alpha}, \quad (22)$$

$$\Omega_{gps} = \gamma \operatorname{tg} \alpha - \frac{\sin \alpha}{1 + Q^2},$$

отвечающее градиентным состояниям. Непосредственно из выражений (22) следует, что для наличия такого рода режимов необходимо, чтобы $\cos \alpha > 2\gamma$. Кроме того, из требования $r_{gps}^2 > 0$ вытекает условие для протяженности L распределенной популяции фазовых осцилляторов. Согласно этому условию градиентные состояния с числом оборотов q существуют, только когда размер L замкнутого в

кольцо ансамбля превышает критическое значение $L_{gps}(q)$, т. е.

$$L > L_{gps}(q) = 2\pi q \sqrt{2\gamma / (\cos \alpha - 2\gamma)}. \quad (23)$$

Заметим, что если формально в (22) положить q равным нулю, то выражения (22) совпадут с соотношениями (19). Данное обстоятельство лишней раз подтверждает взаимосвязь частично синхронных однородных и градиентных состояний. Однако их все-таки стоит выделять в два режима различных классов. В частности, в пользу подобной точки зрения говорит то, что такая важная в теории синхронизации характеристика, как глобальный параметр порядка

$$R(t) = \left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i\varphi_n} \right|, \quad (24)$$

который в пределе $N \rightarrow \infty$ можно рассчитывать по формуле

$$R(t) = \left| \frac{1}{L} \int_0^L Z(\tilde{x}, t) d\tilde{x} \right|, \quad (25)$$

для однородных частично синхронных состояний принимает конечные значения, а для градиентных режимов всегда равен нулю, в чем несложно убедиться, воспользовавшись (20). Подчеркнем также еще один момент, что для фиксированных α и γ в первом случае степень локальной когерентности всегда выше по сравнению со второй.

Численные расчеты, выполненные в рамках исходной модели (1)–(4), при определенном выборе пары значений α и γ демонстрируют хорошее согласие с рассмотренным выше описанием. Во-первых, выражается это в том, что частично синхронные градиентные состояния наблюдаются в течение длительных промежутков времени и остаются невосприимчивыми по отношению к малым возмущениям, т. е. представляют собой возможные стабильные варианты вращения фазовых осцилляторов (см. рис. 1д и рис. 2). Во-вторых, степень локальной когерентности, о которой можно судить по абсолютной величине комплексного параметра порядка, вычисленного с помощью процедуры мезоскопического усреднения результатов прямого моделирования, достаточно адекватно воспроизводится формулой (22). Кроме того, точность оценки (22) становится выше с ростом числа N элементов в системе. Однако в численных расчетах не при всех $L > L_{gps}(q)$ удастся реализовать градиентные режимы. Так, например, на рис. 2а и 2б показаны две ситуации, которые отвечают одному и тому же выбору α и γ

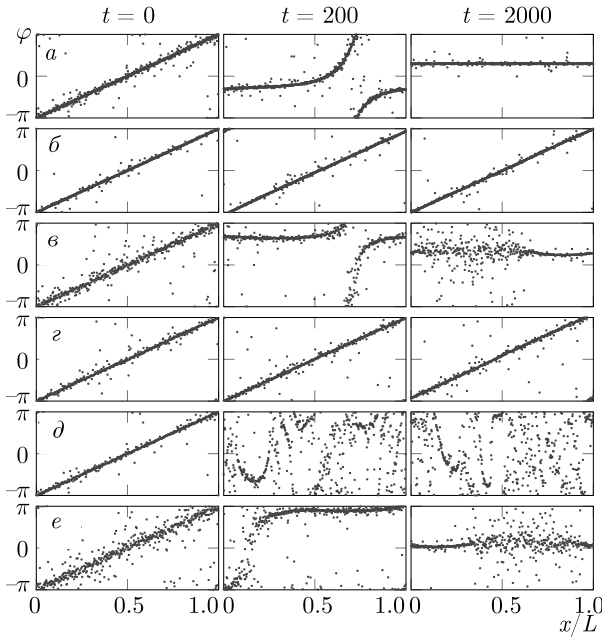


Рис. 2. (В цвете онлайн) Эволюция градиентного частично синхронного режима (ГС). Результаты прямого численного моделирования системы (1)–(4) при $\alpha = 1.457$. Мгновенные снимки фаз ϕ_n для областей, представленных на рис. 3. Область A: *a* — неустойчивое ГС, эволюционирующее к однородному режиму с $|z| = r_{hps}$ при $\gamma = 0.001$, $L = 4$, *б* — устойчивое ГС при $\gamma = 0.001$, $L = 14$; область B: *в* — неустойчивое ГС, эволюционирующее к неоднородному режиму при $\gamma = 0.003$, $L = 4$, *г* — устойчивое ГС при $\gamma = 0.003$, $L = 12$, *д* — неустойчивое ГС, эволюционирующее к неоднородному режиму при $\gamma = 0.003$, $L = 28$; область C: *e* — неустойчивое ГС, эволюционирующее к неоднородному режиму при $\gamma = 0.005$, $L = 4$

($\alpha = 1.457$ и $\gamma = 0.001$), но разным $L > L_{gps} \approx 0.841$ ($L = 4$ (рис. 2*a*) и $L = 14$ (рис. 2*б*)). Видно, что при $L = 4$ (рис. 2*a*) состояние с $q = 1$ числом оборотов средней фазы на 2π относительно быстро распадается и трансформируется в частично синхронный однородный режим. Когда же $L = 14$ (рис. 2*б*) такого процесса не происходит, и характерные особенности пространственного распределения динамических переменных $\varphi_n(t)$ не претерпевают существенных изменений на протяжении сколь угодно длительных временных отрезков. Похожий эффект, заключающийся в разрушении градиентного состояния, несмотря на то, что размер среды L удовлетворяет условию существования (23), присутствует для $\alpha = 1.457$ и $\gamma = 0.003$ (см. рис. 2*в,г,д*). Хотя стоит отметить, что здесь в отличие от случая $\alpha = 1.457$ и $\gamma = 0.001$ разрушение сформированного в соответствии с (20), (22) и (14) профиля фаз происходит как в сравнительно коротких ($L = 4$, рис. 2*в*), так и про-

тяженных популяциях ($L = 28$, рис. 2*д*), и лишь в некотором интервале длин L градиентные состояния оказываются устойчивыми. Для того чтобы объяснить теоретически наблюдаемые в численных расчетах особенности эволюции обсуждаемых режимов, требуется линейный анализ их устойчивости.

3.3. Устойчивость частично синхронных однородных и градиентных состояний

В данном разделе в термодинамическом пределе на базе редукции Отта – Антонсена проведем линейный анализ устойчивости рассмотренных выше режимов поведения системы нелокально связанных неидентичных фазовых осцилляторов. Это позволит разрешить отмеченные ранее кажущиеся (но не существующие на самом деле) противоречия между развитым теоретическим описанием и проведенными численными расчетами. Указанный анализ выполним в рамках единого формализма, который является общим и может быть применен как для однородных, так и для градиентных состояний. Отметим, что для удобства и наглядности ниже будет использована эквивалентность уравнения (15) с периодическими граничными условиями (16) и оператора свертки с ядром (13).

Для того чтобы исследовать аналитически устойчивость обсуждаемых распределений осцилляторов во времени, представим комплексные поля $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ в следующем виде:

$$\begin{aligned} Z(x, t) &= \left(z_0 + \mathcal{Z}(x, t) \right) e^{i\Omega t - iQx}, \\ H(x, t) &= \left(h_0 + \mathcal{H}(x, t) \right) e^{i\Omega t - iQx}. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь явным образом учтены ключевые особенности интересующих нас профилей фаз, которым при фиксированной длине среды L отвечают стационарные решения уравнений Отта – Антонсена (12), (15), характеризующиеся параметрами Ω и Q . В выражениях (26) функции $\mathcal{Z}(x, t)$ и $\mathcal{H}(x, t)$ играют роль слабых (периодических по пространственной координате x) возмущений к однородному состоянию при $Q = 0$ или к градиентному решению с $Q \neq 0$. Подставив (26) в соотношения (12), (13) и линеаризовав их вблизи z_0 и h_0 с учетом малости $\mathcal{Z}(x, t)$ и $\mathcal{H}(x, t)$, получим линейное интегро-дифференциальное уравнение с не зависящими от x и t коэффициентами:

$$\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} = - \left(\gamma + i\Omega + \frac{e^{i\alpha}|z_0|^2}{1+Q^2} \right) \mathcal{Z} + \frac{1}{2} (\mathcal{H} - |z_0|^2 \mathcal{H}^*), \quad (27)$$

$$\mathcal{H}(x, t) = e^{-i\alpha} \int_0^L G(x - \tilde{x}) e^{iQ(x - \tilde{x})} \mathcal{Z}(\tilde{x}, t) d\tilde{x}. \quad (28)$$

Далее, следуя одному из вариантов стандартной процедуры анализа на устойчивость пространственно-временных структур, будем искать $\mathcal{Z}(x, t)$ как суперпозицию двух ортогональных компонент, записанных в факторизованной форме:

$$\mathcal{Z}(x, t) = \mathcal{A}(x)e^{\Lambda t} + \mathcal{B}^*(x)e^{\Lambda^* t}, \quad (29)$$

где комплексное число Λ , имеющее в общем случае как действительную, так и мнимую составляющие, полностью характеризует динамику каждого из слагаемых в сумме (29). В силу предположения о том, что рассматриваемая нами система замкнута в кольцо, т. е. на концах отрезка $[0, L)$ выполняются периодические граничные условия, а также благодаря постоянству множителей во всех членах с \mathcal{Z} и \mathcal{H} в соотношении (29), в качестве $\mathcal{A}(x)$ и $\mathcal{B}(x)$ можно выбрать функции, пропорциональные e^{iKx} :

$$\mathcal{A}(x) = ae^{iKx}, \quad \mathcal{B}(x) = be^{iKx}, \quad (30)$$

где волновые числа $K = 2\pi k/L$ с $k = 0, 1, 2, \dots$ определяют пространственный период моды, который не превышает продольный размер L системы. Тогда после подстановки (29), (30) в (27), (28) останется рассчитать постоянные комплексные амплитуды a и b , а требование существования нетривиальных решений, для которых хотя бы одна из этих амплитуд отлична от нуля, позволит определить соответствующие величины Λ . В результате получим задачу на собственные векторы $\xi = (a, b)^T$ и собственные значения $\Lambda \times 2$ -матрицы \hat{P} :

$$\Lambda \xi = \hat{P} \xi, \quad \hat{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}, \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} p_{11} &= -\gamma - i\Omega - \frac{e^{i\alpha}|z_0|^2}{1+Q^2} + \frac{e^{-i\alpha}}{2(1+(K-Q)^2)}, \\ p_{12} &= -\frac{e^{i\alpha}|z_0|^2}{2(1+(K+Q)^2)}, \\ p_{21} &= -\frac{e^{-i\alpha}|z_0|^2}{2(1+(K-Q)^2)}, \\ p_{22} &= -\gamma + i\Omega - \frac{e^{-i\alpha}|z_0|^2}{1+Q^2} + \frac{e^{i\alpha}}{2(1+(K+Q)^2)}. \end{aligned} \quad (32)$$

Из (31) непосредственно вытекает, что для нахождения Λ требуется решить квадратное уравнение, пара корней которого записывается напрямую через след $\text{tr } \hat{P}$ и детерминант $\det \hat{P}$ только что введенной матрицы \hat{P} :

$$\Lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\text{tr } \hat{P} \pm \sqrt{(\text{tr } \hat{P})^2 - 4 \det \hat{P}} \right). \quad (33)$$

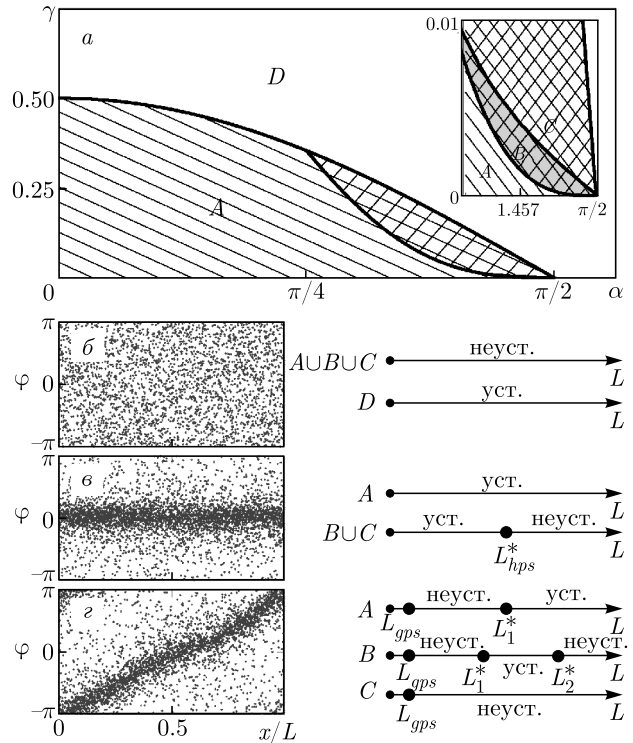


Рис. 3. (В цвете онлайн) а) Области (на плоскости от параметров α и γ) существования и устойчивости режимов с равномерным распределением по ансамблю уровней синхронизации. Для таких режимов амплитуда локального параметра порядка $Z(x, t)$ одинакова для любой точки среды в каждый момент времени. б) Асинхронное состояние существует при всех α и γ вне зависимости от длины среды. Неустойчиво в областях A (часть плоскости α, γ с одинарной штриховкой), B (затененная область с двойной штриховкой) и C (светлая область с двойной штриховкой) и устойчиво в области D (часть области α, γ без штриховки). в) Однородное частично синхронное состояние существует и устойчиво при всех L , если пара величин α и γ выбрана из области A. Если же точка α, γ лежит в областях B или C, то существует критическое значение, начиная с которого данный режим становится неустойчивым. В области D такие состояния отсутствуют. г) Градиентное частично синхронное состояние существует только в областях A, B и C, когда $L > L_{gps}$. Этот режим устойчив в областях A и B, если $L > L_1^*$ и $L_1^* < L < L_2^*$, соответственно. В области C градиентное состояние всюду неустойчиво

Исходя из последнего выражения, несложно сделать вывод об устойчивости режимов с однородным распределением модуля комплексного параметра порядка. Если действительная часть Λ_1 или Λ_2 оказывается положительной, то согласно (29) малые возмущения должны экспоненциально нарастать с течением времени.

Теперь на основе выработанного выше критерия определим характер поведения отклонений $\mathcal{Z}(x, t)$ от z_0 , отвечающих одному из трех рассмотренных ранее режимов, а именно, полностью асинхронному, частично синхронному однородному и градиентному состояниям. Резюмирующим отражением описанных выше результатов служит рис. 3.

Полностью асинхронный режим с $|z_0| = z_{as}$ притягивает к себе близлежащие траектории системы, если $\cos \alpha < 2\gamma$, при любой длине среды L , так что в процессе долговременной эволюции реализуется ситуация, при которой отсутствуют какие-либо корреляции фаз отдельных элементов. В противном случае, когда $\cos \alpha > 2\gamma$, асинхронный режим оказывается неустойчивым (рис. 3а, б). К развитию данной неустойчивости приводят однородные по пространству линейные моды с $K = 0$. Отметим, что данный результат является универсальным для стандарт-

ных видов ядер, используемых для описания нелокального взаимодействия между элементами популяции, что полностью совпадает с выводом работы [41], где подробно обсуждалась динамика тривиального режима с $|z_0| = z_{as} = 0$ для функции связи $G(x)$ прямоугольной формы. Отметим также, что такого рода неустойчивость достаточно распространена в нелинейных распределенных моделях и носит имя Экхауса в честь автора монографии [49].

Для частично когерентных состояний с $Q = 0$, $|z_0| = r_{hps}$ и $\Omega = \Omega_{hps}$ (см. формулу (19)), возникающих при тех же условиях, при которых асинхронный режим теряет свою устойчивость, аналогичным образом несложно изучить поведение малых возмущений $\mathcal{Z}(x, t)$ в форме (29), (30). Воспользовавшись выражениями (19), (31), (32) и (33), после ряда алгебраических преобразований получим

$$\Lambda_{1,2} = \gamma - \cos \alpha \left(1 - \frac{I(K)}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(I(K) \left(1 - \frac{2\gamma}{\cos \alpha}\right)\right)^2 - (2\gamma \operatorname{tg} \alpha - I(K) \sin \alpha)^2}, \quad (34)$$

где $I(K) = (1 + K^2)^{-1}$ представляет собой коэффициент, к умножению на который сводится оператор свертки в (28), если считать, что $\mathcal{H}(x, t)$, так же как и $\mathcal{Z}(x, t)$ пропорционально e^{iKx} . Анализ выражений (34) показывает, что при $\gamma < (\cos \alpha)^3$ однородный частично синхронный режим является устойчивым для любого значения L . В случае, когда $\gamma > (\cos \alpha)^3$, для подобного состояния, существующего лишь при $\gamma < \cos \alpha/2$, условие $\operatorname{Re} \Lambda < 0$ оказывается выполненным, только если $K = 2\pi m/L$ ($m = 0, 1, 2, \dots$) больше некоторого критического значения $K_{hps}^*(\alpha, \gamma)$. Это означает, что имеется предельная длина $L_{hps}^*(\alpha, \gamma)$, при превышении которой соответствующие пространственно-однородные режимы поведения системы неустойчивы:

$$L_{hps}^* = 2\pi \sqrt{\frac{\cos^4 \alpha - 2\gamma \cos^3 \alpha + \gamma^2}{(\cos \alpha - 2\gamma)(\gamma - \cos^3 \alpha)}}. \quad (35)$$

Что касается градиентных состояний, каждое из которых определяется своим $Q = 2\pi q/L$ ($q = \pm 1, \pm 2, \dots$) и формулами (22) для $|z_0| = r_{gps}$ и Ω_{gps} , то исследование их устойчивости и соответствующие результаты выглядят несколько сложнее. Так, детальный анализ собственных значений $\Lambda_{1,2}$ показывает, что в зависимости от значений параметров α и γ можно выделить различные ситуации, качественное отображение которых представлено на рис. 3г.

На рис. 3а для случая $q = \pm 1$ указаны границы областей, отвечающих данным трем ситуациям. Если α и γ выбирать из той части плоскости, которая имеет одинарную штриховку (область А), то существует критическая длина L_1^* такая, что при $L < L_1^*$ градиентный режим неустойчив, а при $L > L_1^*$, наоборот, устойчив (рис. 2б). Это подтверждают и прямые численные расчеты в рамках модели (1)–(4) (см., например, рис. 2а, б). Для тонкого слоя В имеются два критических значения длины L_1^* и L_2^* . При этом состояние с набегом фазы на 2π устойчиво в интервале $L_1^* < L < L_2^*$ (рис. 2г) и неустойчиво при $L < L_1^*$ (рис. 2б), $L > L_2^*$ (рис. 2д). В области С градиентный режим неустойчив для любого значения L (рис. 2е). Отметим, что здесь выписать явные выражения для L_1^* , L_2^* не удается и приходится их находить численно.

В заключение данного раздела подчеркнем, что найденные условия существования и устойчивости режимов с пространственно-однородной степенью синхронизации фазовых осцилляторов, а также наличие различных критических значений для длины среды теперь хорошо объясняют поведение системы (1)–(4), демонстрируемое при прямых численных расчетах (см. рис. 2). Однако в процессе долговременной эволюции также могут устанавливаться и менее тривиальные состояния, речь о которых пойдет в следующих разделах.

4. СОСТОЯНИЯ СО СТАТИЧНЫМ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ СТЕПЕНИ ФАЗОВОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ ЭЛЕМЕНТОВ АНСАМБЛЯ

4.1. Стационарные решения уравнений Отта – Антонсена

При подробном изучении сценариев долговременной эволюции модели (1)–(4) в зависимости от величины фазового сдвига α , степени пространственного беспорядка γ , а также длины среды L с помощью прямого численного моделирования установлено, что особую роль играют кластерные частично синхронные режимы вращения (как предельные, так и транзиентные), для которых явным образом выделяются несколько статичных или квазистатичных участков с различным уровнем когерентности осцилляторов. Примеры перехода рассматриваемой системы в подобные состояния представлены на рис. 2*в,е*, где показано, как разрушается градиентное распределение фаз с одинаковым значением модуля локального параметра порядка в интервале $[0, L]$, и устанавливается неизменная в течение всего дальнейшего времени картина, характерные особенности которой отражены на мгновенных снимках при $t = 2000$. На данных фрагментах видно, что имеются две области с большей и меньшей степенью скоррелированности движения соседних друг к другу элементов. Указанное обстоятельство дает основание полагать, что профиль каждого из введенных ранее путем процедуры усреднения мезоскопических полей становится и затем остается пространственно-неоднородным. Такие долгоживущие режимы поведения распределенных популяций вызывают особый интерес прежде всего по двум причинам. Во-первых, в обсуждаемых нами ансамблях нелокально связанных фазовых осцилляторов эти нетривиальные режимы наблюдаются даже тогда, когда частично синхронное однородное состояние устойчиво. Во-вторых, для идентичных элементов (т. е. в пределе $\gamma \rightarrow 0$) структурные образования, аналогичные по своему виду тем, что изображены на рис. 2*в,е*, а также на рис. 1*ж,и*, трансформируются в химеры (в классическом их понимании), отличительной чертой которых является присутствие наряду с участками с частично когерентным движением элементов макроскопических групп с полностью синхронным вращением [24–29]. Перечисленные факты позволяют сделать вывод об отношении состояний, которым посвящен данный раздел, к фундаментальному эффекту частичной потери симметрии [30].

С целью понять и детально описать в термодинамическом пределе ключевые особенности покоящихся пространственных структур с областями с повышенной и пониженной степенью локальной фазовой когерентности поведения элементов замкнутой в кольцо среды построим и проанализируем стационарные (по модулю) решения редуцированной задачи, полученной с помощью подхода Отта – Антонсена и сформулированной нами в форме совокупности двух уравнений в частных производных (12), (15) с граничными условиями (16). Для этого представим комплексные поля $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ в виде

$$Z(x, t) = z(x)e^{i\Omega t}, \quad H(x, t) = h(x)e^{i\Omega t}, \quad (36)$$

где Ω играет роль неизвестного параметра, который требуется определить. После подстановки выражений (36) для мезоскопических величин $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ в соотношения (12) и (15) приходим к следующей системе, состоящей из алгебраического равенства и обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, в которые входят зависящие только от переменной x комплексные функции $z(x)$ и $h(x)$:

$$2(-i\Omega - \gamma)z + h - h^*z^2 = 0, \quad (37a)$$

$$h'' - h + ze^{-i\alpha} = 0. \quad (37b)$$

Здесь и далее штрихом обозначена производная по координате x . В ситуации, когда $\gamma \neq 0$, т. е. осцилляторы нетождественны друг другу и различаются по своим индивидуальным характеристикам, при $N \rightarrow \infty$ в интервале $[0, L]$ не найдется ни одной точки, в малой окрестности которой может быть достигнута полная синхронизация по фазе, а значит, абсолютное значение локального параметра порядка всегда остается меньше единицы, т. е. $|z(x)| < 1$. Тогда из (37a) несложно выразить $h(x)$ через $z(x)$:

$$h = 2 \left(\frac{i\Omega}{1 + |z|^2} + \frac{\gamma}{1 - |z|^2} \right) z. \quad (38)$$

Затем перепишем $z(x)$ как

$$z(x) = r(x)e^{i\theta(x)}, \quad (39)$$

введя две действительные функции $r(x)$ и $\theta(x)$, которые естественно называть соответственно амплитудой и фазой для $z(x)$ с тем лишь отличием от классических определений, что для удобства будем считать $r(x)$ знакопеременной величиной, предполагая, в свою очередь, $\theta(x)$ непрерывной в том числе в тех точках, где $r(x)$ обращается в нуль. При этом выражение (38) для $h(x)$ примет вид

$$h = 2re^{i\theta} \left(\frac{i\Omega}{1 + r^2} + \frac{\gamma}{1 - r^2} \right). \quad (40)$$

Подставив (40) в (37b) и приравняв по отдельности нулю действительную и мнимую части получившегося соотношения, перейдем к следующей паре уравнений:

$$\begin{aligned} & \frac{\gamma(1+r^2)}{(1-r^2)^2} r'' - \frac{\Omega r}{1+r^2} \theta'' - \frac{2\Omega(1-r^2)}{(1+r^2)^2} r' \theta' + \\ & + \frac{2\gamma r(r^2+3)}{(1-r^2)^3} (r')^2 - \frac{\gamma r}{1-r^2} (\theta')^2 = \\ & = \frac{\gamma r}{1-r^2} - \frac{r}{2} \cos \alpha, \quad (41a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\Omega(1-r^2)}{(1+r^2)^2} r'' + \frac{\gamma r}{1-r^2} \theta'' + \frac{2\gamma(1+r^2)}{(1-r^2)^2} r' \theta' + \\ & + \frac{2\Omega r(r^2-3)}{(1+r^2)^3} (r')^2 - \frac{\Omega r}{1+r^2} (\theta')^2 = \\ & = \frac{\Omega r}{1+r^2} + \frac{r}{2} \sin \alpha, \quad (41b) \end{aligned}$$

которую путем введения новой переменной $u = r'$ и дополнительной замены $v = r^2 \theta'$, после ряда преобразований можно свести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений третьего порядка для $r(x)$, $u(x)$ и $v(x)$ со свободным параметром Ω при заданных значениях α , γ :

$$r' = u, \quad (42a)$$

$$\begin{aligned} u' = & \frac{1}{2(\gamma^2(1+r^2)^4 + \Omega^2(1-r^2)^4)(1-r^4)r^3} \times \\ & \times \left(-4r^4 u^2 (\gamma^2(r^2+3)(1+r^2)^4 + \Omega^2(r^2-3)(1-r^2)^4) - \right. \\ & - 2(8\gamma\Omega v u r^3 + \gamma^2(v^2 + r^4)(1+r^2)^2 + \\ & + \Omega^2 r^3(1-r^2))(1-r^4)^2 + r^4(-\gamma(1+r^2) \cos \alpha + \\ & \left. + \Omega(1-r^2) \sin \alpha)(1-r^4)^3 \right), \quad (42b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v' = & \frac{1}{2(\gamma^2(1+r^2)^4 + \Omega^2(1-r^2)^4)(1-r^4)} \times \\ & \times \left(8v r u^2 (\Omega^2(1-r^2)^5 - 2\gamma^2(1+r^2)^5) + \right. \\ & + 8\gamma\Omega(3r^2 u^2 + v^2 + r^4)(1-r^4)^2 + \\ & + r^2(\Omega(1-r^2)^3 \cos \alpha + \gamma(1+r^2)^3 \sin \alpha) \times \\ & \left. \times (1-r^4)^2 \right). \quad (42c) \end{aligned}$$

Отметим, что понижение размерности (с четвертой у совокупности соотношений (41) до третьей у системы (42)) удается осуществить за счет того, что

функция $\theta(x)$ определена с точностью до постоянного слагаемого, т.е. структура комплексных полей $z(x)$ и $h(x)$ (а с ними $Z(x, t)$ и $H(x, t)$) инвариантна относительно совместного сдвига фаз на константу. По этой же причине без ограничения общности можно положить $\theta(0) = 0$. Подчеркнем также, что в силу граничных условий (16) на концах интервала $[0, L]$ нас будут интересовать только периодические решения уравнений (42) с периодом, совпадающим с размером обсуждаемой среды L . Такого рода решения обладают важной особенностью — трансляционной симметрией, что позволяет удобным способом (благодаря некоторому произволу) выбирать положение начала отсчета по пространственной координате x . Кроме того, несложно заметить, что при замене $x \rightarrow -x$, $r \rightarrow r$, $u \rightarrow -u$, $v \rightarrow -v$ система (42) останется неизменной. Другими словами, для соотношений (42) проходит преобразование инволюции. Перечисленные свойства как зависимостей $r(x)$, $u(x)$ и $v(x)$, так и самих уравнений (42) дают основание ограничиться поиском лишь симметричных по отношению к середине интервала $[0, L]$ периодических решений $r(x)$, $u(x)$ и $v(x)$, удовлетворяющих следующим условиям:

$$\begin{aligned} r(0) = r(L), \quad u(0) = u(L) = 0, \\ v(0) = v(L) = 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Данным решениям должны быть поставлены в соответствие пространственные профили $z(x)$ и $h(x)$, которые вместе с соответствующим значением параметра Ω определяют вид стационарных структур. Подчеркнем также то, что в пользу выбора выделенного класса функций $r(x)$, $u(x)$ и $v(x)$ как наиболее перспективных в плане описания долгоживущих состояний со статичным неоднородным распределением степени фазовой синхронизации элементов ансамбля говорят и прямые численные расчеты в рамках исходной модели (1)–(4) (см., например, рис. 1ж и фрагменты рис. 2в,е при $t = 2000$). Стоит однако учитывать, что не все решения системы (42), для которых выполнены условия (43), являются физически реализуемыми. Они имеют смысл только тогда, когда $|r(x)| = |z(x)|$ при всех x на отрезке $[0, L]$ не превышает единицы. Данное требование вытекает непосредственно из определения локального комплексного параметра порядка $Z(x, t)$. Таким образом, поставленная нами в начале раздела задача о нахождении стационарных решений (36) системы (12), (15) с граничными условиями (16) может быть сведена к нахождению периодических траекторий системы (42), для которых выполняются условия (43).

4.2. Процедура поиска статичных неоднородных состояний и их структурный анализ

Перейдем теперь к детальному обсуждению ключевых особенностей стационарных режимов с неоднородным распределением по пространству локального параметра порядка $Z(x, t)$. В данном разделе прежде всего приведем процедуру поиска всех существующих периодических решений вспомогательной системы (42), определяющих вид профилей комплексных полей $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ с равномерно вращающейся фазой. Затем выделим основные отличительные черты семейства подобных решений и соотнесем их с той картиной разброса динамических переменных $\varphi_n(t)$, которая должна, соответственно, реализовываться в исходной модели (1)–(4) ансамбля нелокально связанных неидентичных осцилляторных элементов. Далее такого рода состояния рассматриваемых популяций будут проинтерпретированы как с позиции мезоскопических (усредненных) характеристик, так и с точки зрения свойств движения отдельных осцилляторов.

Начнем с описания разработанного нами метода поиска неоднородных стационарных (по модулю) состояний вида (36), базирующегося на идее выделения при фиксированных значениях Ω замкнутых (и тем самым удовлетворяющих условиям (43)) траекторий в фазовом пространстве r, u, v системы обыкновенных дифференциальных уравнений (42) третьего порядка. Для нахождения указанных траекторий использовалось сечение Пуанкаре $u = 0, u' > 0$, которое строилось путем численного интегрирования системы (42), стартуя при этом с множества $r(0) = r_0, u(0) = 0, v(0) = 0$, где r_0 принимает свои значения из интервала $(0, 1)$, и детектируя каждое событие с $u = 0, u' > 0$, а далее нанося его для визуализации маркером на плоскость r, v (см. рис. 4). Наш анализ (прежде всего использующий представленные в разд. 4.1 факты) показывает, что неподвижным точкам периода p построенного таким образом отображения отвечают искомые периодические решения системы (42) и, следовательно, симметричные пространственно-неоднородные структуры с p максимумами модуля локального параметра порядка $z(x, t)$. Длина L каждой подобной найденной траектории совпадает с размером среды, в которой может наблюдаться данное состояние. В итоге, при заданном Ω находим профиль $z(x)$, который в точности повторяет себя через период L , определяемый выбором Ω . При необходимости по формуле (38) легко определяется и зависимость $h(x)$. Но

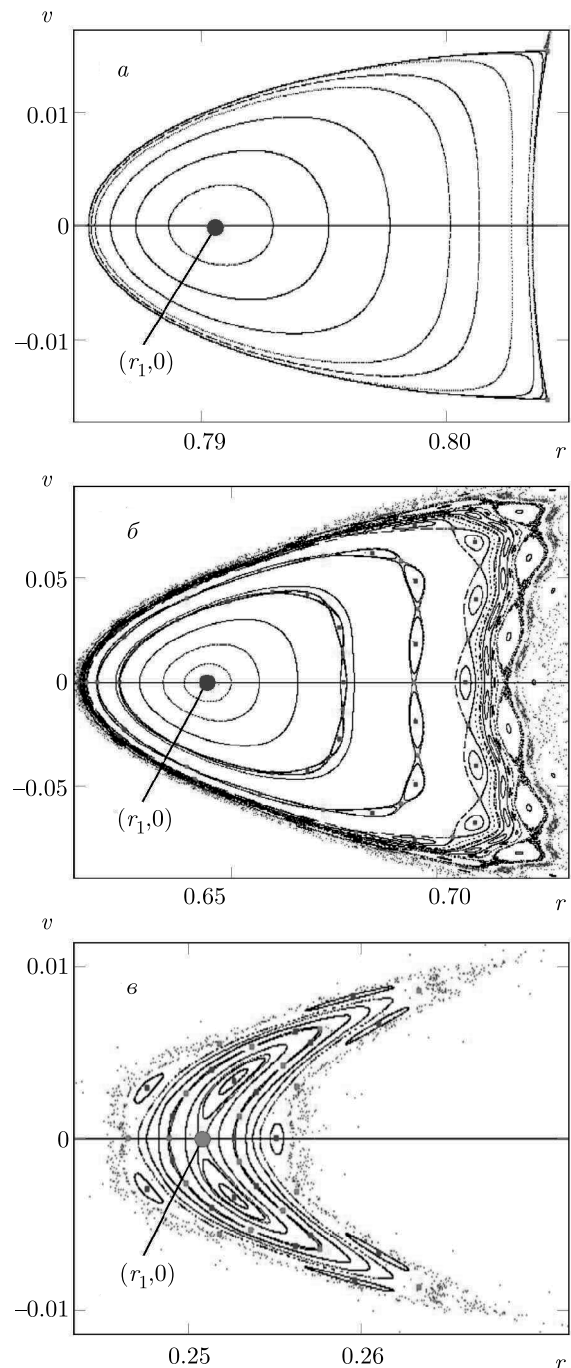


Рис. 4. (В цвете онлайн) Отображение Пуанкаре для системы (42) при $\alpha = 1.457, \gamma = 0.020$. Условия для сечения: $u = 0, u' > 0$. Эллиптические (синие маркеры) и гиперболические седловые (красные маркеры) неподвижные точки: $a - \Omega = -0.8185, б - \Omega = -0.78, в - \Omega = -0.647$. Неподвижная точка $(r_1, 0)$ соответствует неоднородному решению (36) с одним максимумом $|z(x)|$. Черные (фиолетовые) точки обозначают траектории, не покидающие (покидающие) области на плоскости (r, v) , отображаемые на фрагментах $a-v$

более важным является то, что по локальному параметру порядка $z(x)$ с учетом (36) всегда удается восстановить распределение исходной динамической переменной $\varphi(x, t)$ или $\varphi_n(t)$. Таким образом, получается обнаружить разнообразные семейства статических неоднородных состояний среды нелокально связанных неидентичных фазовых осцилляторов. Каждое такое семейство характеризуется индивидуальной зависимостью $\Omega(L)$ (см. рис. 5), которая рассчитывается в неявном виде с помощью описанной выше процедуры.

Перед тем как перейти к обсуждению конкретных примеров, отметим, что похожий подход уже успешно применялся в наших предыдущих работах [31–33], где с помощью него изучались химеры в средах, состоящих из одинаковых частиц (т.е. $\gamma = 0$). Однако в изучаемом в статьях [31–33] случае имеется ряд сложностей, вызванных наличием участков с полностью синхронными элементами, затрудняющих использование численных процедур, которые позволяют находить воспроизводящие себя на конечном отрезке кривые. Когда же $\gamma > 0$, удается избежать проблем, связанных с возможностью тождественного совпадения фаз осцилляторов в окрестности некоторой точки x , так как вырожденная ситуация $|z(x)| = 1$ становится недостижимой. Требование $|z(x)| < 1$ существенно сужает множество начальных условий, с которых необходимо стартовать для построения сечения Пуанкаре, что упрощает процедуру поиска неподвижных точек отображения и гарантирует отсутствие потерянных решений. Однако при $\gamma = 0$ нельзя дать аналогичных гарантий, потому что все преобразования и вычисления проводятся с полем $h(x)$, для амплитуды которого отсутствует ограничение сверху. С другой стороны, стоит подчеркнуть, что при стремлении к нулю величины γ , ответственной за степень пространственного беспорядка, стационарные неоднородные состояния вида (36), полученные для задачи (12), (15), способны дать дополнительную информацию о химерных решениях, образующихся при $\gamma = 0$, и их областях существования.

В качестве примера исследуем неподвижные точки отображения Пуанкаре для фиксированных значений $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$ и различных Ω (см. рис. 4). Для данных значений параметров в системе существует однородное частично синхронное состояние с $\Omega = \Omega_{hps} \approx -0.81854$ и $r = r_{hps} = 0.80482$.

На сечении Пуанкаре (r, v) , которое определяется условиями $u = 0, u' > 0$, ему соответствует неподвижная точка с координатами $(r_{hps}, 0)$. При увеличении параметра Ω данная неподвижная точ-

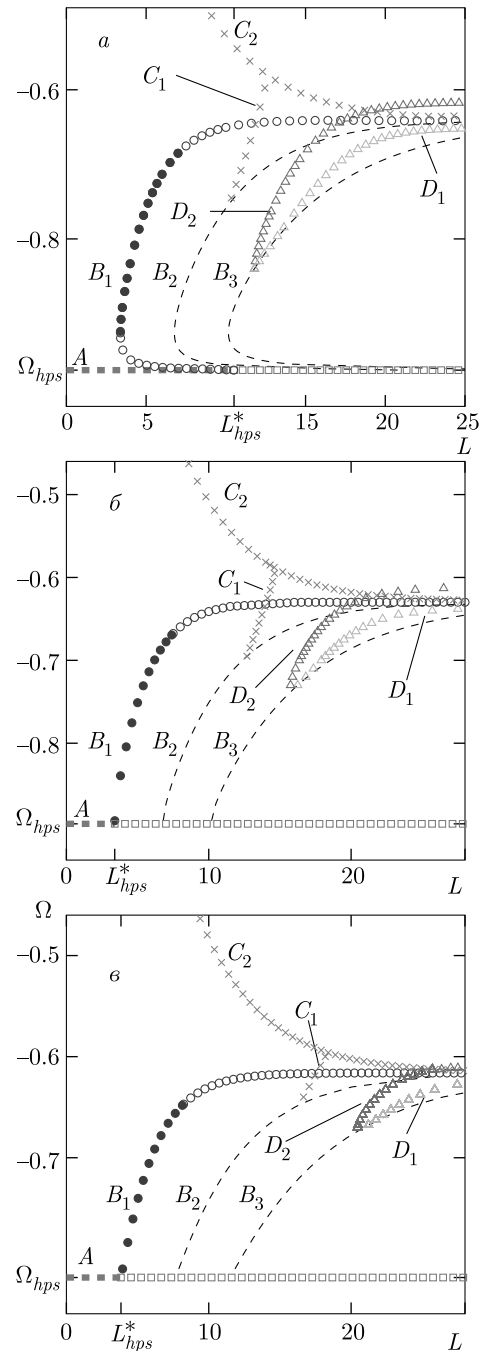


Рис. 5. (В цвете онлайн) Бифуркационная диаграмма стационарных решений (36) уравнений Отта – Антонсена (12), (13) при $\alpha = 1.457$: а – $\gamma = 0.002$, б – $\gamma = 0.011$. в – $\gamma = 0.020$. Пунктир (A) — однородное частично синхронное состояние. Кружки (B_1) — неоднородное частично синхронное состояние с одним максимумом $|z(x)|$, крестики (C_1, C_2) — с двумя максимумами, треугольники (D_1, D_2) — с тремя максимумами $|z(x)|$. Закрашенные (пустые) символы — устойчивые (неустойчивые) режимы. Линии B_2 и B_3 — неоднородное частично-синхронное состояние с одним максимумом $|z(x)|$ соответственно с удвоенной и утроенной длиной среды

ка претерпевает бифуркацию, в результате которой возникают три неподвижные точки: эллиптическая $(r_1, 0)$ периода $p = 1$ и две седловые точки (r_2, v_2) и $(r_2, -v_2)$. При этом замкнутым траекториям отвечают квазипериодические решения системы (42) (рис. 4а). Неподвижная точка $(r_1, 0)$ соответствует неоднородному частично синхронному состоянию $z = z_1(x)$ с одним максимумом модуля параметра порядка $|z(x)|$.

При дальнейшем непрерывном изменении значения Ω на инвариантных траекториях в результате резонансов возникают периодические точки различных периодов (рис. 4б). Причем в случае перекрытия резонансов образуются области хаотического блуждания [50]. На отображении Пуанкаре рядом с сепаратрисами седловых точек в такой ситуации можно наблюдать так называемые стохастические слои (рис. 4б, в). Далее при $\Omega \approx 0.648$ из точки $(r_1, 0)$ рождаются две эллиптические точки, а она при этом становится седловой (рис. 4в). Обратим внимание, что существует множество неподвижных точек отображения Пуанкаре с координатами $(r, 0)$, которым соответствуют различные стационарные решения системы (12) и (15).

При дальнейшем увеличении параметра Ω все траектории (кроме устойчивых сепаратрис) вблизи седловой точки $(r_1, 0)$ быстро покидают ее окрестность. Поиск неподвижной точки с помощью описанного метода усложняется в силу того, что ее максимальный по модулю мультипликатор значительно превышает единицу. Аналогичное поведение наблюдается в окрестности остальных седловых точек большего периода, которые расположены на оси $v = 0$. Такого рода особенность связана с существенным возрастанием длины возвратных траекторий непосредственно в трехмерном фазовом пространстве r, u, v .

4.3. Линейный анализ устойчивости стационарных неоднородных состояний

При изучении (как однородных, так и градиентных) режимов с равномерно распределенной степенью синхронизации вдоль всей популяции (см. разд. 3) нами было установлено, что информации только о существовании состояний оказывается недостаточно, чтобы предсказывать возможные сценарии долговременной эволюции ансамблей нелокально связанных фазовых осцилляторов. Для этого еще дополнительно требуется исследовать соответствующие пространственные структуры по отно-

шению к малым возмущениям на устойчивость во времени.

Далее, следуя общей логике, которой, в частности, следовало изложение предыдущего раздела, проведем линейный анализ свойств устойчивости статичных конфигураций с неоднородным профилем локального параметра порядка, что позволит достичь более глубокого понимания динамики обсуждаемой среды и кооперативных процессов в ней. С данной целью линеаризуем записанное в своей исходной форме интегро-дифференциальное уравнение Отта – Антонсена (12), (13) вблизи одного из его стационарных решений (36), характеризующихся параметром Ω и длиной L . Согласно стандартной процедуре, представим $Z(x, t)$ в виде

$$Z(x, t) = (z(x) + \mathcal{Z}(x, t))e^{i\Omega t}, \quad (44)$$

где с помощью $\mathcal{Z}(x, t)$ обозначены присутствующие в комплексном поле $Z(x, t)$ периодические по x слабые отклонения от профиля $z(x)$ [26, 31, 34]. Подставив (44) в (12), выполнив ряд преобразований с учетом (37) и сохранив лишь слагаемые первого порядка малости по $\mathcal{Z}(x, t)$, получим

$$\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} = -(\gamma + i\Omega + h^* z)\mathcal{Z} + \frac{1}{2}(\mathcal{H} - \mathcal{H}^* z^2). \quad (45)$$

Здесь $\mathcal{H}(x, t)$ и $\mathcal{Z}(x, t)$ связаны посредством оператора свертки с ядром (4), т. е. аналогично тому, как $H(x, t)$ выражается через $Z(x, t)$ по формуле (13). Выделим действительную и мнимую компоненты у комплексной функции $\mathcal{Z}(x, t) = \zeta_1(x, t) + i\zeta_2(x, t)$ и перепишем равенство (45) как систему уравнений относительно вещественного вектора $\zeta(x, t) = (\zeta_1(x, t), \zeta_2(x, t))^T$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\zeta(x, t) = [\hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{K}}]\zeta(x, t), \quad (46)$$

где $\hat{\mathbf{M}}(x)$ — мультипликативный оператор:

$$\hat{\mathbf{M}}\zeta(x, t) = \begin{pmatrix} \mu_1(x) & -\mu_2(x) \\ \mu_2(x) & \mu_1(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1(x, t) \\ \zeta_2(x, t) \end{pmatrix}, \quad (47)$$

а $\hat{\mathbf{K}}(x)$ — интегральный оператор:

$$\hat{\mathbf{K}}\zeta(x, t) = \begin{pmatrix} \kappa_{11}(x) & \kappa_{12}(x) \\ \kappa_{21}(x) & \kappa_{22}(x) \end{pmatrix} \times \int_0^L G(x - \tilde{x}) \begin{pmatrix} \zeta_1(\tilde{x}, t) \\ \zeta_2(\tilde{x}, t) \end{pmatrix} d\tilde{x}. \quad (48)$$

Здесь для удобства и краткости записи приведенных выше представлений $\hat{\mathbf{M}}(x)$ и $\hat{\mathbf{K}}(x)$ были введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\mu_1(x) &= -\operatorname{Re}(z(x)h^*(x)) - \gamma, \\ \mu_2(x) &= -\operatorname{Im}(z(x)h^*(x)) - \Omega, \\ \varkappa_{11}(x) &= (\cos \alpha - \operatorname{Re}(e^{i\alpha}z^2(x)))/2, \\ \varkappa_{12}(x) &= (\sin \alpha - \operatorname{Im}(e^{i\alpha}z^2(x)))/2, \\ \varkappa_{21}(x) &= \varkappa_{12} - \sin \alpha, \quad \varkappa_{22}(x) = \cos \alpha - \varkappa_{11}.\end{aligned}\quad (49)$$

Из (46) непосредственно вытекает, что характер поведения малых возмущений $\mathcal{Z}(x, t)$ определяется собственными числами λ суммы $\hat{\mathbf{M}}(x) + \hat{\mathbf{K}}(x)$ не зависящих от времени операторов $\hat{\mathbf{M}}(x)$ и $\hat{\mathbf{K}}(x)$. В полном спектре обычно в функциональном анализе выделяют непрерывную составляющую λ_e , содержащую в себе существенную часть всех значений λ , и дискретную составляющую λ_p , к которой принадлежат обособленные точки спектра λ . Стоит отметить, что оператор $\hat{\mathbf{K}}(x)$ является компактным для любого кусочно-гладкого ядра $G(x)$ [34]. В силу данного свойства существенная часть λ_e интересующего нас набора собственных чисел λ комбинации $\hat{\mathbf{M}}(x) + \hat{\mathbf{K}}(x)$ совпадает с соответствующей входящей в нее компонентой первого слагаемого $\hat{\mathbf{M}}(x)$. Таким образом, получаем, что $\lambda_e = \mu_1(x) \pm i\mu_2(x)$. Несложно проверить, что λ_e удовлетворяют условию $\operatorname{Re}(\lambda_e) < 0$. Следовательно, за линейную устойчивость пространственного профиля $z(x)$ (и связанного с ним распределения $h(x)$) отвечают только значения из точечной части λ_p спектра λ .

Полученные с использованием описанных выше методов результаты поиска стационарных неоднородных решений уравнений Отта - Антонсена и анализа устойчивости соответствующих структур объединены и показаны на рис. 5. Здесь представлены зависимости $\Omega(L)$ для однородных частично синхронных (ветвь A) и неоднородных с одним (ветвь B_1), двумя (ветви C_1 и C_2) и тремя (ветви D_1 и D_2) максимумами амплитуды $|z(x)|$ параметра порядка стационарных решений для $\alpha = 1.457$ и нескольких значений γ : $\gamma = 0.002$, $\gamma = 0.011$ и $\gamma = 0.020$ (соответственно рис. 5а, б, в). В отличие от ситуации, когда рассматриваются среды из идентичных элементов [26, 31–34], при наличии случайного разброса (беспорядка) в индивидуальных частотах осцилляторов можно достоверно рассчитать λ_p (по крайней мере те λ_p , для которых $\operatorname{Re} \lambda_p > 0$) с применением только стандартного метода дискретизации и замены операторов $\hat{\mathbf{M}}(x)$ и $\hat{\mathbf{K}}(x)$ матрицами большой размерности, не задействуя при этом дополнительных модификаций подобной процедуры, кото-

рые оказываются необходимы для выявления истинных λ_p в случае $\gamma = 0$ (см. подробности в работах [31–33]). В итоге, с точки зрения анализа в термодинамическом пределе имеем еще одно преимущество в задаче с пространственным беспорядком (т. е. при $\gamma \neq 0$).

Каждый из выделенных видов неоднородных состояний отмечен своим типом маркеров. Причем закрашенные точки отвечают устойчивым режимам, а пустые — неустойчивым. Видно, что ветвь неоднородного частично синхронного режима B_1 рождается из прямой линии, с помощью которой на плоскости L, Ω отражен однородный частично синхронный режим. Происходит это именно в тот момент, когда последний теряет устойчивость, т. е. в точке с абсциссой $L = L_{hps}^*$ там, где сплошная линия меняется на штриховую. Кривые B_2 (B_3) соответствует удвоенным (утроенному) неоднородным состояниям, для которых длина среды в два (три) раза превышает пространственный размер структур с ветви B_1 , хотя профиль локального комплексного параметра порядка полностью совпадает с одним из распределений $z(x)$, полученных при построении семейства B_1 . Несложно заметить, что на линии B_1 имеются точки с такими L и Ω , что найденные при этих значениях пространственные образования должны быть устойчивыми, а значит, представляют собой возможный наблюдаемый в процессе долговременной эволюции устанавливающийся режим поведения системы. Данное обстоятельство подтверждает и численное моделирование уравнений Отта - Антонсена. Следует отметить, что в зависимости от величины γ переходы от однородного частично синхронного к кластерному режиму существенно различаются. В случае сильных частотных расстройек (большие γ) (рис. 5б, в) переход происходит мягко. В случае же слабых частотных расстройек (малые γ) переход является жестким, имеет место гистерезис (рис. 5а, см. область сопряжения ветвей A и B_1).

При увеличении параметра L состояния с одной повышенной и одной пониженной областью когерентности теряют свою устойчивость. Также рост продольной длины ансамбля приводит к появлению режимов с большим числом кластеров с различной степенью фазовой синхронизации. В частности, из ветви B_2 рождается еще дополнительная ветвь решений, обозначенная нами как C_1 . Для структур этого типа характерно, что $|z(x)| > 0$, и, следовательно, глобальный параметр порядка отличен от нуля. Кривая C_1 заканчивается на семействе C_2 , которое сформировано также стационарными неоднородными режимами с $p = 2$. Основное отличие со-

стояний с ветви C_2 от образований, параметры которых лежат на линии C_1 , состоит в том, что для них $|z(x)|$ в двух точках обращается в нуль, а собранное по всей популяции макроскопическое поле R равняется нулю. С подобной ситуацией нам уже приходилось сталкиваться, когда проводилось сравнение однородных частично синхронных и градиентных режимов. Если двигаться дальше, то из ветви B_3 рождаются семейства D_1 и D_2 . Они соответствуют структурам с $p = 3$ и переходят друг в друга. Так, двигаясь в сторону увеличения L , будем регистрировать возникновение новых решений с последовательно возрастающим числом максимумов p .

Несмотря на то, что среди обнаруженных нами состояний линейно устойчивыми (в строгом смысле) оказались лишь режимы с $p = 1$, для некоторых решений с $p > 1$ показатели экспоненциального роста являются малыми ($\sim 10^{-3}$, 10^{-4}). Поэтому стоит ожидать, что все рассмотренные нами статические неоднородные структуры играют важную роль в динамике исходной системы. Подобные ожидания подтверждаются и численными расчетами, проведенными на базе уравнений Отта-Антонсена (12), (15). Моделирование начальной задачи показывает, что мезоскопические поля $Z(x, t)$ и $H(x, t)$ с высокой долей вероятности переходят в обсуждаемые в текущем разделе устойчивые или слабо неустойчивые состояния, которые наблюдаются в течение длительных промежутков времени. Ниже (в следующем разделе) внимание будет уделено результатам численных расчетов, выполненных непосредственно в рамках исходной модели (1)–(4), и исследованию того, какие еще (уже динамические) режимы могут возникнуть в процессе распада статичных квазихимических структур. В качестве заключительного замечания здесь отметим, что степень беспорядка γ , с одной стороны, приводит к стабилизации стационарных с точки зрения распределения абсолютной величины локального параметра порядка образований, но с другой стороны, γ влияет на длину замкнутых траекторий системы (42) (см. рис. 5), а та, в свою очередь, во многом определяет положение дискретных собственных значений λ_p оператора $\hat{M}(x) + \hat{K}(x)$ на комплексной плоскости $\text{Re } \lambda$, $\text{Im } \lambda$. Согласно проведенному анализу, чем длиннее среда, тем выше шансы, что найдутся λ_p с $\text{Re } \lambda_p > 0$. Таким образом, наиболее устойчивыми являются неоднородные состояния со статичными кластерами фазовой синхронизации в случае промежуточных значений параметра γ , ответственного за разброс в индивидуальных характеристиках составляющих среду осцилляторных элементов. Так, например, среди

ситуаций, рассмотренных при построении рис. 5, образования с двумя явно выраженными, практически не смещающимися, максимумами амплитуды поля $Z(x, t)$ дольше всего наблюдаются при $\gamma = 0.011$.

5. ДИНАМИЧЕСКИЕ РЕЖИМЫ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ СИСТЕМЫ НЕЛОКАЛЬНО СВЯЗАННЫХ НЕИДЕНТИЧНЫХ ФАЗОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

В данном разделе сначала еще раз остановимся на режиме со статичной картиной кластерной синхронизации (рис. 1*ж,з*), а затем перейдем к подробному описанию следующих типов таких динамических неоднородных состояний, как бризерный кластерный режим (рис. 1*и,к*), нерегулярные состояния с явно выраженной перемежаемостью (рис. 1*л,м*) и без нее (рис. 1*н,о*). Представленные здесь результаты получены в рамках прямого численного моделирования системы (1)–(4). В качестве начальных условий задавалось распределение фаз, восстановленное по одному из профилей $z(x)$ с соответствующим значением Ω , которые, как обсуждалось в предыдущем разделе, определяются длиной среды L при фиксированных параметрах α и γ . Выберем для определенности в качестве величины параметра фазового сдвига $\alpha = 1.457$.

5.1. Статичная кластерная синхронизация

Обсудим прежде всего ситуацию, когда начальные распределения фаз формируются по стационарным неоднородным решениям уравнений Отта-Антонсена (12), (15) с числом максимумов $p = 1$. Как было указано ранее, на бифуркационных диаграммах, представленных на рис. 5, им соответствуют ветви B_1 . Координата каждого максимума амплитуды комплексного поля $Z(x, t)$ задает положение середины группы с повышенной степенью фазовой когерентности и одновременно центра кластера с частотной синхронизацией осцилляторов (рис. 1*ж,з*), т. е. набора элементов, которые имеют одинаковые средние частоты $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$. Чем ближе величина $\max |Z(x, t)|$ к единице, тем более выражена синхронность осцилляторов. Отметим, что для идентичных частиц ($\gamma = 0$) эти две макроскопические фракции совпадают и образуют абсолютно скоррелированный участок среды с $|Z(x, t)| = 1$ и $\langle \dot{\varphi} \rangle = \Omega$.

Рассмотрим случай $\gamma = 0.002$ (рис. 5*а*). Тогда ветвь B_1 возникает при $\Omega = \Omega_{hps}^* = -0.9276$ ($L_{hps}^* =$

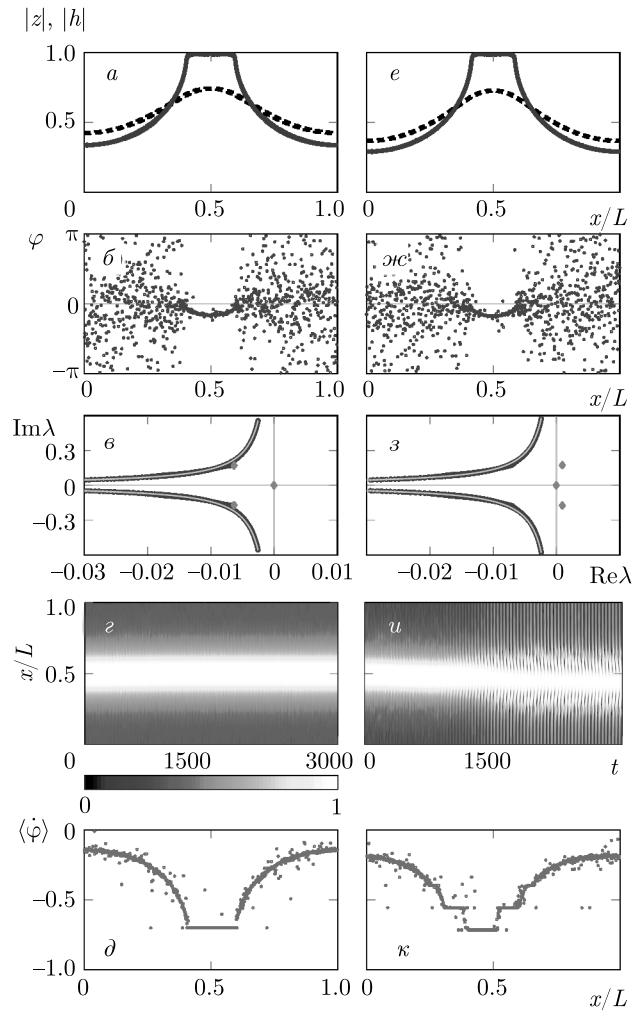


Рис. 6. (В цвете онлайн) *a–d*) Устойчивое неоднородное состояние при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.002$, $\Omega = -0.70$, $L \approx 6.4135$. *e–k*) Неустойчивое неоднородное состояние эволюционирует к бризерному режиму при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.002$, $\Omega = -0.685$, $L \approx 7.0047$. Начальные условия соответствуют ветви B_1 бифуркационной диаграммы на рис. 5*a*. *a, e*) Профили $|z|$ (синяя сплошная линия), $|h|$ (черная штриховая линия), определенные методом, описанным в разд. 5. *б, ж*) Начальные распределения фаз φ_n , которые восстановлены по локальным параметрам порядка $Z(x)$. *в, з*) Спектр λ линейных возмущений для соответствующих стационарных решений $Z(x)$ уравнений Отта–Антонсена. Существенная λ_e (синие кружки) и точечная λ_p (красные ромбы) составляющие спектра λ . *г, д, и, к*) Результаты прямого численного моделирования системы (1)–(4). *г, и*) Поведение во времени абсолютной величины комплексного поля $Z(x_n, t)$. *д, к*) Средние частоты осцилляторов $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$

= 10.5141) из однородного частично синхронного режима, а отвечающая ей зависимость $\Omega(L)$ является неоднозначной, что характерно для ситуаций с бистабильностью и гистерезисом. На данной ветви существует устойчивый интервал $-0.9241 < \Omega < -0.6851$ ($3.3882 < L < 7.0$). На рис. 6*a* представлены профили $|z(x)|$ и $|h(x)|$, а на рис. 6*б* соответствующее им распределение мгновенных фаз φ_n для $\Omega = -0.7$. Рисунок 6*в* содержит спектр собственных значений λ_e и λ_p , где в силу инвариантности к сдвигу по пространству $x \rightarrow x + x_0$ системы (12), (15) существует одно дискретное нулевое собственное значение, при этом для остальных выполняется условие $\text{Re } \lambda_p < 0$, что говорит об устойчивости исследуемого режима. На рис. 6*г* изображена пространственно-временная динамика величины $|Z(x, t)|$, полученная в результате прямого численного моделирования системы (1)–(4) с конечным числом элементов $N = 4096$. На рис. 6*д* представлены средние частоты осцилляторов $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$. Отчетливо виден один кластер синхронных по частоте элементов, основная группа которых расположена по середине интервала $[0, L)$, а также явно выделяется максимум в профиле модуля локального параметра порядка $Z(x, t)$. Данный режим при $\gamma = 0$ трансформируется в устойчивую однокластерную химеру (см., например, работы [31–33]).

При увеличении γ степень фазовой когерентности вдоль всей популяции в целом падает. Также сокращается (в процентном соотношении) и количество осцилляторов, принадлежащих частотно синхронному кластеру, т. е. все меньшее число элементов ансамбля в нем имеют равные средние частоты. Так, например, в случае $\gamma = 0.02$ (см. рис. 5*в*) стационарный неоднородный режим с $L = 6.5861$ и $\Omega = -0.68$ должен быть устойчивым по отношению к малым возмущениям, так как выбранное нами значение длины среды попадает в интервал устойчивости $L_{hps}^* < L < L_1^*$, где $L_{hps}^* = 3.83422$, $L_1^* = 8.232$. Результаты анализа в рамках развитых в разд. 4 подходов и прямого численного моделирования системы (1)–(4) приведены на рис. 7*a–d*. Сравнивая данные фрагменты рис. 7 с аналогичными панелями рис. 6, несложно заметить указанные особенности, обусловленные изменением уровня беспорядка в среде.

5.2. Бризерный кластерный режим

Вернемся опять к случаю $\gamma = 0.002$. При критическом значении $\Omega_1^* \approx -0.6851$ ($L_1^* \approx 7.0$) стационарный неоднородный режим теряет устойчивость (см.

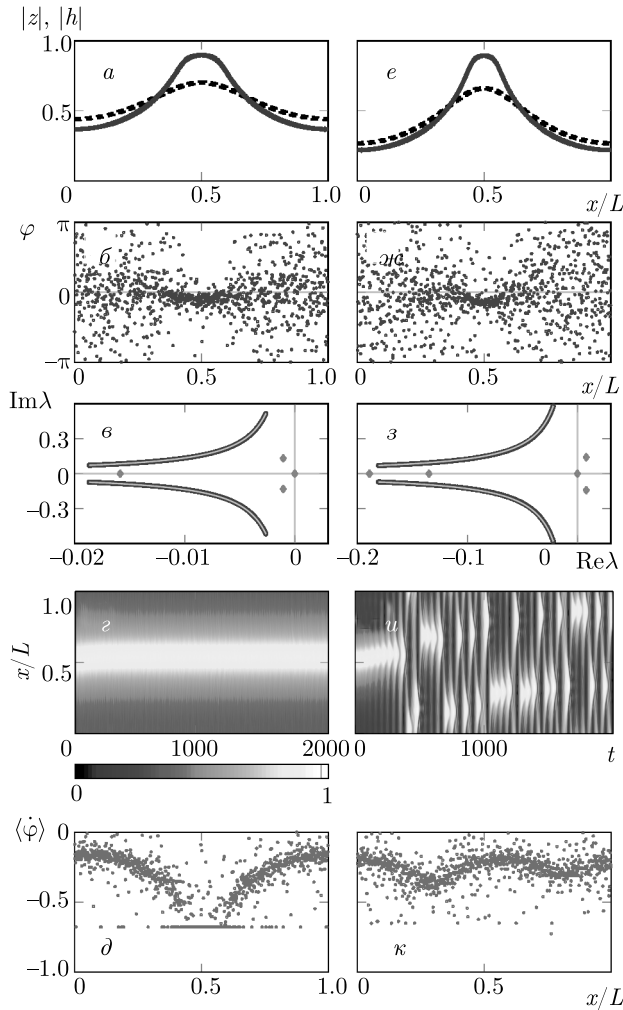


Рис. 7. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6. *a-d*) Устойчивое неоднородное состояние при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$, $\Omega = -0.68$, $L \approx 6.5861$. *e-k*) Неустойчивое неоднородное состояние эволюционирует к режиму перемежаемости при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.02$, $\Omega = -0.64$, $L \approx 8.8373$. Начальные условия соответствуют ветви B_1 бифуркационной диаграммы на рис. 5в

рис. 6*e-k*). Два комплексно-сопряженных собственных значения из спектра λ_p при этом пересекают мнимую ось (рис. 6*з*). Система при этом переходит к бризерному кластерному режиму, когда существуют несколько частотно синхронных кластеров (рис. 6*ж*). Причем усредненные величины $H(x, t)$ и $Z(x, t)$ в каждой точке пространства испытывают периодические колебания (рис. 6*и*). Заметим, что данные состояния в случае сред, состоящих из идентичных элементов, т. е. при $\gamma = 0$, переходят в бризерные химеры, которые были обнаружены в системах с различными типами определяющих нелокальную связь ядер, заданных как в виде экспоненциально убывающих [32, 33], так и гармонических функций [26, 34],

а также в форме прямоугольника [51]. Для ансамблей, состоящих из фазовых осцилляторов с собственными частотами, распределенными по закону Коши, подобные решения с периодическим поведением локальных мезоскопических полей были рассмотрены в работах [37, 43]. В работе [43] показано, что такие бризерные режимы реализуются в наиболее широких диапазонах управляющих параметров, если ответственная за степень беспорядка величина параметра разброса γ мала, однако отлична от нуля, что справедливо и для исследуемой нами ситуации. Отметим также, что бризерные режимы наблюдались в двумерных решетках связанных фазовых осцилляторов [52, 53].

Когда $\gamma = 0.02$, при превышении критической длины среды $L_1^* = 8.232$, начиная с которой состояние со статичной кластерной синхронизацией становится неустойчивым, бризерный режим регистрируется только в очень узком интервале значений L , так что его довольно трудно выявить. Однако наличие такого режима оказывает ощутимое влияние на переходные процессы в рассматриваемой системе. В частности, на рис. 7*e-k* отчетливо видно, что, несмотря на существенно более сложный (нерегулярный) характер поведения тех движений, которые устанавливаются в результате развития неустойчивости структуры, изображенной на рис. 7*e*, на относительно протяженных временных отрезках имеет место квазипериодическая динамика, всеми своими атрибутами напоминающая бризерный кластерный режим. Подобная динамика прерывается резким смещением положений областей повышенной и пониженной фазовой когерентности в пространстве, после чего снова восстанавливается (рис. 7*и*). Такого рода чередование продолжительных колебаний структуры мезоскопических полей и быстрых (скачкообразных) изменений, происходящих за короткие (в масштабах численных расчетов) промежутки времени, можно интерпретировать как явление перемежаемости. Данное явление служит одним из механизмов перехода к развитой турбулентности, что фактически и происходит при дальнейшем увеличении длины среды. Система начинает демонстрировать сложную пространственно-временную динамику с нерегулярным поведением усредненных комплексных полей $Z(x, t)$ и $H(x, t)$, о чем пойдет речь ниже.

5.3. Нерегулярные режимы

Еще раз подчеркнем, что во всех рассмотренных нами ситуациях, когда распределение модуля

комплексного параметра порядка имеет один или несколько максимумов и нигде не достигает нуля, процесс разрушения регулярных с точки зрения мезоскопических полей статичных неоднородных состояний протекает всегда по схожему сценарию. При этом два комплексно-сопряженных значения, принадлежащих дискретному спектру λ_p , пересекают мнимую ось, что указывает на осцилляторный характер неустойчивости. Здесь можно провести прямую аналогию с бифуркацией Андронова–Хопфа [54]. В частности, на справедливость такой интерпретации указывает то, что при определенных сочетаниях величин α , γ и L удается достоверно зарегистрировать переход к бризерным кластерным режимам, и только потом при увеличении длины среды L распад состояний, отвечающих стационарным квазихимерным решениям уравнения Отта–Антонсена (12), (15), заканчивается установлением сложных динамических режимов, отличительными чертами которых являются дрейф и резкие смещения положений областей с повышенной и пониженной степенью фазовой когерентности. Стоит обратить внимание на то, что в большинстве случаев (две популяции, с одной стороны, достаточно протяженные, а с другой, обладающие конечным размером) число локальных экстремумов в пространственных зависимостях амплитуд усредненных комплексных полей в каждый момент времени сохраняется (см. рис. 8*z, u*).

В данном разделе сначала выделим и обсудим более детально основные особенности нерегулярных неоднородных режимов на примере ситуации, когда $\gamma = 0.011$, а начальные условия для элементов ансамбля формируются с использованием стационарных решений уравнения Отта–Антонсена (12), (15), для которых $p = 2$, а соответствующие ветви на рис. 5*б* отмечены как C_1 и C_2 . С учетом вышесказанного и из приведенного ниже описания можно сделать вывод и о других возможных нерегулярных режимах (развивающихся из статичных кластерных состояний с другим числом максимумов $|z(x)|$). Примеры типичных профилей $|z(x)|$ локального параметра порядка и связанных с ними распределений фаз φ_n представлены на рис. 8*a, e* и 8*б, жс*. Соответствующие им спектры λ композитного оператора $\mathbf{M}(x) + \mathbf{K}(x)$ линейной задачи (46) на устойчивость отображены на рис. 8*в, з*. Нетрудно заметить, что среди собственных значений λ имеются такие, для которых $\text{Re } \lambda > 0$. Хотя отдельно заметим, что $\text{Re } \lambda \sim 10^{-2}$. Таким образом, данные режимы являются слабонеустойчивыми, и ансамбль фазовых осцилляторов (1)–(4) в прямом численном

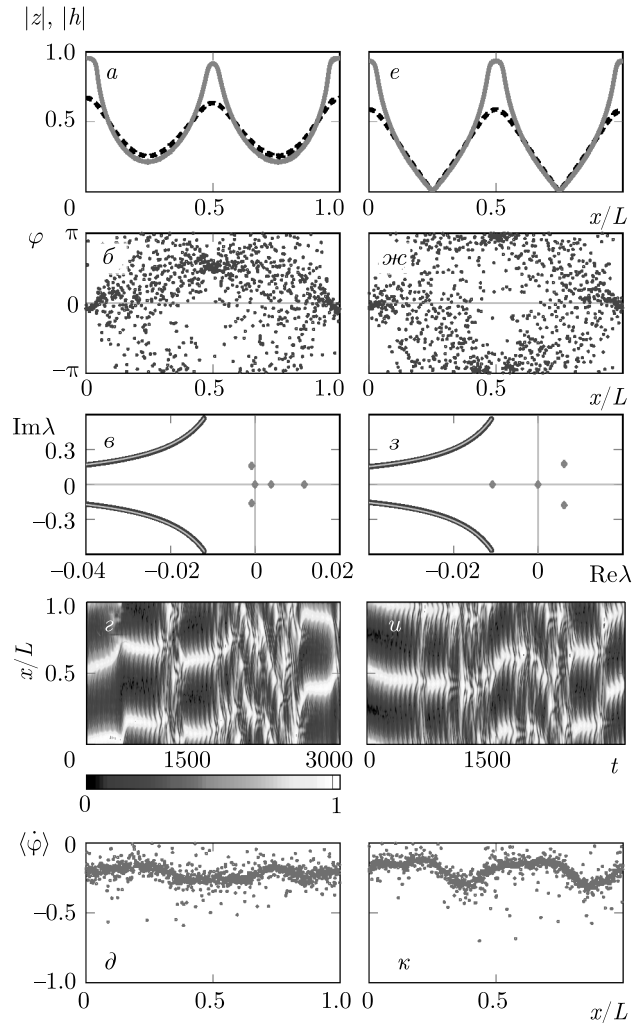


Рис. 8. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6. Неустойчивые неоднородные решения с двумя максимумами $|z(x)|$ (для разных значений Ω и L) эволюционируют к режиму перемежаемости при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.011$. Начальные условия соответствуют ветви C_1 при $\Omega = -0.625$, $L \approx 14.1367$ (фрагменты (a–d)) и C_2 при $\Omega = -0.566$, $L \approx 12.7904$ (фрагменты (e–k)) бифуркационной диаграммы на рис. 5*б*

моделировании демонстрирует переход к сложной пространственно-временной динамике (в том числе, комплексных мезоскопических полей). Однако отчетливо видно, что на достаточно продолжительных временных интервалах динамика возвращается к состояниям, в которых выделяются две квазистатичные области с высокой степенью когерентности и два (также квазистатичных) участка с практически асинхронным поведением осцилляторов (рис. 8*z, u*). Причем в конце продолжительных отрезков времени распределение амплитуды $Z(x, t)$ начинает рас-

качиваться и уходить от близкой структуры к стационарной через колебания, что как раз можно объяснить осцилляторным характером развития неустойчивости. Таким образом, система демонстрирует перемежаемость регулярных и хаотических режимов. Это связано с тем, что среди найденных нами решений уравнений (12), (15), отвечающим ветвям C_1 и C_2 на рис. 5, существуют слабонеустойчивые распределения, которым могут быть поставлены в соответствие относительно простые переходные долгоживущие режимы движения. На профиле средних частот $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$ (рис. 8д,к) в данном случае не удается выделить кластеры частотно синхронных осцилляторов, так как за достаточно продолжительный промежуток времени (интервал усреднения) каждый элемент успевает побывать как в областях с высокой степенью когерентности фаз, так и в практически асинхронных участках среды. Это приводит к тому, что средние частоты имеют практически однородно зашумленный профиль, сосредоточенный вблизи кривой, в форме которой однако прослеживаются структурные особенности, обусловленные тем, что популяция достаточно долго находится в окрестности одного из слабонеустойчивых образований, обусуждаемых в разд. 4.

Если профиль $|z(x)|$, определяющий начальные значения, является сильнонеустойчивым, то система демонстрирует хаотическую пространственную динамику, которая уже не прерывается выходом на квазистатичные регулярные структуры. В качестве примера продемонстрируем случай $\gamma = 0.02$ для неустойчивых неоднородных состояний с тремя максимумами $|z(x)|$. Рисунки 9а–д соответствуют решению, расположенному на ветви D_1 , а рис. 9е–к — решению, расположенному на ветви D_2 . Здесь состояния, соответствующие режиму с тремя областями повышенной фазовой когерентности, достаточно быстро разрушаются, и локальный параметр порядка начинает демонстрировать нерегулярную динамику (рис. 9г,и). Распределение средних частот $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$ при этом оказывается равномерно зашумленным (так же, как в случае перемежаемости). Однако в отличие от рис. 8д,к на рис. 9д,к значения $\langle \dot{\varphi}_n \rangle$ распределены практически вдоль прямой линии с одинаковой по величине степенью разброса, что указывает на отсутствие существенных различий между пространственными точками среды после усреднения по времени.

Таким образом, в системе (1)–(4) неидентичных нелокально-связанных фазовых осцилляторов при $\gamma < \cos \alpha/2$ и $\gamma \gtrsim \cos^3 \alpha$, начиная с некоторого критического значения длины среды L , перестают

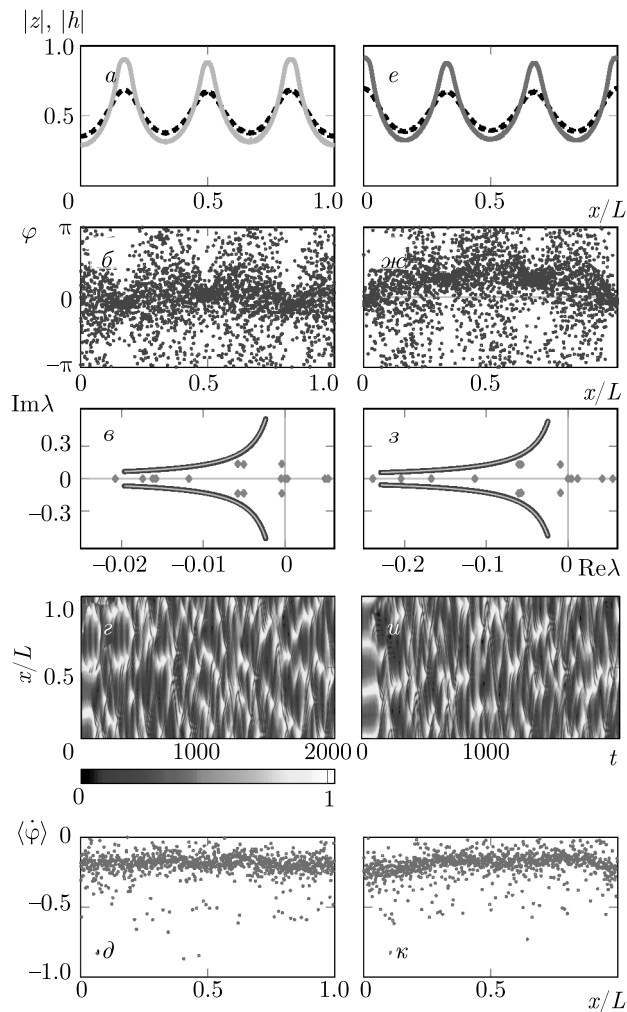


Рис. 9. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6. Неустойчивые неоднородные решения с тремя максимумами $|z(x)|$ (для разных значений Ω и L) эволюционируют к турбулентному режиму при $\alpha = 1.457$, $\gamma = 0.020$. Начальные условия соответствуют ветви D_1 при $\Omega = -0.66$, $L \approx 21.9922$ (фрагменты (а–д)) и D_2 при $\Omega = -0.66$, $L \approx 20.7145$ (фрагменты (е–к)) бифуркационной диаграммы на рис. 5в

наблюдаться устойчивые неоднородные состояния с регулярным поведением усредненных полей. Вместо этого реализуются сложные пространственно-временные режимы с хаотической динамикой параметра порядка $Z(x, t)$ двух типов. В первом случае имеет место перемежаемость, при которой чередуются достаточно протяженные временные отрезки с квазистатичным распределением мезоскопических характеристик ансамбля и с относительно быстрым смещением областей с повышенной и пониженной степенью синхронизации, во втором — чисто турбулентный режим.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем кратко итоги работы и сформулируем ее основные результаты. Нами был рассмотрен ансамбль, состоящий из большого числа нелокально-связанных неидентичных фазовых осцилляторов, которые равномерно распределены на отрезке с периодическими граничными условиями. При этом предполагалось, что собственные частоты задаются независимо случайным образом согласно распределению Лоренца, а взаимодействие между осцилляторами ослабевает по экспоненциальному закону. Отметим, что данная конфигурация эквивалентна ситуации, когда элементы располагаются на кольце. Основными параметрами такой системы являются величина фазового сдвига, определяющая тип связи (притягивающий, нейтральный или отталкивающий), полуширина распределения собственных частот, задающая степень их неоднородности, а также длина осцилляторной среды. Основная цель работы состояла в том, чтобы в широком диапазоне значений указанных параметров исследовать и классифицировать пространственно-временные структуры, возникающие в процессе долговременной эволюции обсуждаемого ансамбля.

С использованием процедуры усреднения было получено динамическое уравнение Отта – Антонсена для локального комплексного параметра порядка, характеризующего степень фазовой коррелированности элементов в малой окрестности произвольной точки рассматриваемой осцилляторной среды. В рамках этого уравнения, прежде всего, были найдены стационарные (равномерно вращающиеся) режимы с постоянным по модулю значением локального параметра порядка. Установлено, что среди таких состояний можно выделить два вида: однородные и градиентные. Далее, была определена их устойчивость с помощью анализа спектра собственных значений соответствующих линеаризованных уравнений. Показано, что при больших значениях полуширины функции распределения собственных частот реализуется только полностью асинхронный режим с нулевым средним полем. Если же полуширина случайного разброса становится меньше некоторой пороговой величины, то данное состояние перестает быть устойчивым, а в системе могут наблюдаться как однородные, так и градиентные частично синхронные режимы в зависимости от размеров среды и фазового сдвига.

Воспользовавшись тем, что взаимодействие между элементами убывает экспоненциальным образом,

интегро-дифференциальное уравнение Отта – Антонсена было преобразовано к самосогласованной системе уравнений в частных производных. Это позволило предложить метод эффективного поиска стационарных (равномерно вращающихся) неоднородных пространственных структур, которые в пределе одинаковых элементов переходят в химерные состояния. Основная идея данного метода состоит в построении замкнутых траекторий в фазовом пространстве вспомогательной системы обыкновенных дифференциальных уравнений третьего порядка. Отметим, что подобным периодическим решениям несложно поставить в соответствие неподвижные точки двумерного отображения. После того, как были найдены примеры неоднородных профилей локального комплексного параметра порядка и по ним восстановлены распределения фаз, анализировалась устойчивость полученных состояний как с помощью расчета спектра линейных возмущений, так и с использованием прямого численного моделирования. Для проведения такого рода анализа потребовалось, в частности, разработать и адаптировать процедуру расчета непрерывной и дискретной составляющих спектра собственных значений линеаризованного вокруг одного из стационарных образований интегро-дифференциальное уравнение Отта – Антонсена.

В итоге, установлено, что среди неоднородных состояний со статичным распределением областей с повышенной и пониженной степенью синхронизации устойчивыми (в строгом смысле) являются только те режимы, для которых у профиля локального параметра порядка имеется только один максимум. Однако среди остальных найденных нами структур встречаются слабонеустойчивые (транзистентные) образования. С помощью прямого численного моделирования в рамках исходной системы удалось подтвердить данные выводы и показать, что обсуждаемые квазихимерные режимы (как предельные, так и транзистентные) вращения играют важную роль в динамике ансамбля из большого числа неидентичных нелокально связанных фазовых осцилляторов с экспоненциальным типом взаимодействия, так как одни из них устанавливаются и в последствии не разрушаются, а другие возникают в виде переходных продолжительных процессов между интервалами со сложным нерегулярным поведением усредненных полей. Кроме того, помимо подобной перемежаемости регулярных и хаотических коллективных движений для протяженных сред численные расчеты позволили выделить и описать такие состояния

долговременной эволюции изучаемой системы, как бризерная кластерная синхронизация и развитый турбулентный режим.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00367) (разд. 1 и 2), Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0036) (разд. 3), а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-52-12053) (разд. 4 и 5).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. V. Osipov, J. Kurths, and Ch. Zhou, *Synchronization in Oscillatory Networks*, Springer Verlag, Berlin (2007).
2. V. S. Afraimovich, V. I. Nekorkin, G. V. Osipov, and V. D. Shalfeev, *Stability, Structures and Chaos in Nonlinear Synchronization Networks*, World Scientific, Singapore (1994).
3. J. Pantaleone, *Amer. J. Phys.* **70**, 992 (2002).
4. S. Chhabria, K. A. Blaha, F. D. Rossa, and F. Sorrentino, *Chaos* **28**, 111102 (2018).
5. J. Machowski, J. W. Bialek, and J. R. Bumby, *Power System Dynamics: Stability and Control*, John Wiley and Sons (2002).
6. P. J. Menck, J. Heitzig, J. Kurths, and H. J. Schellnhuber, *Nature Commun.* **5**, 3969 (2014).
7. S. Ryu, W. Yu, and D. Stroud, *Phys. Rev. E* **53**, 2190 (1996).
8. Z. Zheng, B. Hu, and G. Hu, *Phys. Rev. E* **57**, 1139 (1998).
9. S. Homma and S. Takeno, *Progr. Theor. Phys.* **72**, 4 (1984).
10. S. Takeno and S. Homma, *Progr. Theor. Phys.* **77**, 3 (1987).
11. A. Pikovsky, M. Rosenblum, and J. Kurths, *Synchronization: a Universal Concept in Nonlinear Sciences*, Cambridge University Press, Cambridge (2001).
12. Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, Springer, Berlin, Heidelberg (1984).
13. A. Pikovsky and M. Rosenblum, *Chaos* **25**, 097616 (2015).
14. E. Brown, J. Moehlis, and P. Holmes, *Neural Comp.* **16**, 4 (2004).
15. C. R. Laing, *J. Math. Neurosci.* **8**, 4 (2018).
16. J. Acebron, L. Bonilla, C. P. Vicente, F. Ritort, and R. Spigler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 137 (2005).
17. F. A. Rodrigues, T. K. D. Peron, P. Ji, and J. Kurths, *Phys. Rep.* **610**, 1 (2016).
18. S. Gupta, A. Campa, and S. Ruffo, *Statistical Physics of Synchronization*, Springer International Publishing (2018).
19. S. Watanabe and S. H. Strogatz, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2391 (1993).
20. E. Ott and T. M. Antonsen, *Chaos* **18**, 037113 (2008).
21. E. Ott and T. M. Antonsen, *Chaos* **19**, 023117 (2009).
22. B. Pietras and A. Daffertshofer, *Chaos* **26**, 103101 (2016).
23. D. Chowdhury and M. C. Cross, *Phys. Rev. E* **82**, 016205 (2010).
24. M. J. Panaggio and D. M. Abrams, *Nonlinearity* **28**, R67 (2015).
25. N. Yao and Z. Zheng, *Int. J. Mod. Phys. B* **30**, 1630002 (2016).
26. O. E. Omel'chenko, *Nonlinearity* **31**, R121 (2018).
27. S. Majhi, B. K. Bera, D. Ghosh, and M. Perc, *Phys. Life Rev.* **28**, 100 (2019).
28. E. Schöll, A. Zakharova, and R. G. Andrzejak, *Chimera States in Complex Networks*, Lausanne: Frontiers Media SA (2020).
29. E. Schöll, *Eur. Phys. J. Special Topics* **225**, 891-919 (2016).
30. A. E. Motter, *Nature Phys.* **6**, 164 (2010).
31. L. Smirnov, G. Osipov, and A. Pikovsky, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 08LT01 (2017).
32. М. И. Болотов, Л. А. Смирнов, Г. В. Осипов, А. С. Пиковский, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 393 (2017).
33. M. I. Bolotov, L. A. Smirnov, G. V. Osipov, and A. Pikovsky, *Chaos* **28**, 045101 (2018).
34. O. E. Omel'chenko, *Nonlinearity* **26**, 9 (2013).
35. M. Wolfrum, O. E. Omel'chenko, S. Yanchuk, and Y. L. Maistrenko, *Chaos* **21**, 013112 (2011).
36. G. B. Ermentrout, *SIAM J. Appl. Math.* **52**, 1665 (1992).
37. C. R. Laing, *Physica D* **238**, 1569 (2009).
38. C. R. Laing, *Chaos* **52**, 013113 (2009).

39. W. S. Lee, J. G. Restrepo, E. Ott, and T. M. Antonsen, *Chaos* **21**, 023122 (2011).
40. G. S. Medvedev and X. Tang, *J. Nonlinear Sci.* **25**, 1169 (2015).
41. O. E. Omel'chenko, M. Wolfrum, and C. R. Laing, *Chaos* **24**, 023102 (2014).
42. M. Wolfrum, S. V. Gurevich, and O. E. Omel'chenko, *Nonlinearity* **29**, 257 (2016).
43. O. E. Omel'chenko, *Chaos* **30**, 043103 (2020).
44. D. Wiley, S. Strogatz, and M. Girvan, *Chaos* **16**, 015103 (2006).
45. T. Girnyk, M. Hasler, and Y. Maistrenko, *Chaos* **22**, 013114 (2012).
46. D. Bolotov, M. Bolotov, L. Smirnov, G. Osipov, and A. Pikovsky, *Regular and Chaotic Dynamics* **24**, 717 (2019).
47. Y. Kuramoto and D. Battogtokh, *Nonlinear Phenom. Complex Syst.* **5**, 380 (2002).
48. I. N. Pesin, *Classical and Modern Integration Theories*, Probability and Mathematical Statistics. 8. Academic Press, New York–London (1970).
49. W. Eckhaus, *Studies in Nonlinear Stability Theory*, Springer, Berlin (1965).
50. F. C. Moon, *Chaotic Vibrations: An Introduction for Applied Scientists and Engineers*, Wiley-VCH (2004).
51. Y. Suda and K. Okuda, *Phys. Rev. E* **97**, 042212 (2018).
52. J. Xie, E. Knobloch, and H.-C. Kao, *Phys. Rev. E* **92**, 042921 (2015).
53. O. E. Omel'chenko, M. Wolfrum, and E. Knobloch, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **17**, 97 (2018).
54. Y. A. Kuznetsov, *Elements of Applied Bifurcation Theory*, Springer, New York (1995).

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ И ИОНОВ ВБЛИЗИ ПОГЛОЩАЮЩЕГО СФЕРИЧЕСКОГО ТЕЛА В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

*А. В. Филиппов**

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

*ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
108840, Троицк, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 23 сентября 2020 г.,
после переработки 23 сентября 2020 г.
Принята к публикации 28 сентября 2020 г.

Исследован вопрос о применимости столкновительной кинетической модели точечных стоков — линеаризованной теории экранирования электрического поля заряженной пылевой частицы, построенной на основе кинетических уравнений Власова для электронов и ионов в неравновесной плазме, дополненных столкновительными членами в форме Бхатнагара–Гросса–Крука и эффективными точечными стоками на пылевые частицы. Критерием применимости столкновительной кинетической модели точечных стоков является малость отклонения концентрации электронов и ионов вблизи поглощающего сферического тела от невозмущенных значений. Проведено сравнение распределений концентрации электронов и ионов, полученных в рамках столкновительной кинетической модели точечных стоков и приближения ограниченных орбит. Показано, что последнее применимо только в пределе низких давлений, а с ростом давления кулоновская асимптотика потенциала, пропорциональная частоте столкновений электронов и ионов с нейтральными атомами (молекулами), делает неприменимыми формулы приближения ограниченных орбит для расчета распределения ионов. Установлено, что область применимости столкновительной кинетической модели точечных стоков близка к области применимости теории Дебая–Гюккеля.

DOI: 10.31857/S0044451021010132

1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетическое уравнение Власова широко используется для описания свойств плазмы, когда на первый план выходят коллективные эффекты взаимодействия электронов и ионов в неравновесной плазме [1–6]. Эти уравнения находят применение и при изучении свойств плазмы с частицами конденсированной дисперсной фазы микронных размеров [7–12]. Также сегодня в физике газовых разрядов одно из ведущих мест занимают зондовые методы диагностики плазмы [13–20]. Для определения плавающего потенциала зонда, потенциала поверхности и заряда пылевых частиц широко используется приближение ограниченных орбит (ПОО) (orbit motion limited (OML) approach), которое восходит к рабо-

те Мотт-Смит и Ленгмюра [21]. В работе [22] была создана кинетическая теория сферического зонда в бесстолкновительной плазме и получены выражения для распределения потенциала электрического поля, концентрации электронов и ионов вокруг поглощающего сферического зонда. В работе [23] было показано, что эта теория имеет ограниченную область применимости и при некоторых параметрах плазмы и/или зонда не может правильно описать реакцию плазмы на сферический зонд (пылевую частицу). В работе [24] утверждалось, что в некоторых режимах работы сферического зонда в теории появляются мнимые значения концентрации ионов, для устранения которых авторы предложили модифицировать выражение для определения концентрации ионов из работы [22].

Известно, что ПОО довольно точно предсказывает потенциал поверхности небольших пылевых частиц, несмотря на упрощающее предположение о

* E-mail: fav@triniti.ru

бесстолкновительном характере движения электронов и ионов. Поэтому исследование границ применимости ПОО важно не только для развития теории зондов, но и для физики пылевой плазмы, которая широко распространена в космосе и в лабораторных условиях [25–32]. Отметим, что сами пылевые частицы могут использоваться для зондирования плазмы [33]. Поэтому настоящая работа посвящена исследованию ограничений ПОО и пределов применимости линеаризованной кинетической теории экранирования электрического поля заряженной пылевой частицы [7, 10].

Работа построена следующим образом. В разд. 2 приводятся выражения для распределений электронов и ионов вокруг сферического зонда при разных характерах изменения распределения потенциала из работы [22]. Далее в разд. 3 приводятся основные уравнения и соотношения столкновительной кинетической модели точечных стоков [7, 10] и в разд. 4 проводится сравнение данных, полученных в рамках различных моделей: ПОО [22], модифицированного ПОО [24] и линеаризованной кинетической теории экранирования на основе уравнений Власова с учетом столкновений и стоков электронов и ионов [7, 10], которую ниже для краткости будем обозначать аббревиатурой ЛКТЭ.

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ИОНОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ ОГРАНИЧЕННЫХ ОРБИТ

Пусть распределение электронов вдали от зонда имеет максвелловский вид. Тогда распределение электронов в отталкивательном поле зонда в отсутствие поглощения описывается распределением Максвелла – Больцмана [22]:

$$n_e(r) = n_{e0} \exp(-\varphi), \quad (1)$$

где n_{e0} — концентрация электронов в невозмущенной плазме, φ — приведенная потенциальная энергия электрона в поле зонда: $\varphi = -e\phi(r)/T_e$, e — элементарный заряд, r — радиальная координата в сферической системе координат с полюсом в центре зонда, ϕ — потенциал электрического поля зонда и плазмы, T_e — температура электронов в энергетических единицах. При учете поглощения электронов на поверхности зонда радиусом a в работе [22] получено выражение

$$n_e(r) = \frac{n_{e0}}{2} \left\{ 1 + \operatorname{Erf}(\sqrt{\varphi_0 - \varphi}) + \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2}} \operatorname{Erfc}\left(\sqrt{\frac{\varphi_0 - \varphi}{1 - a^2/r^2}}\right) \times \exp\left[(\varphi_0 - \varphi) \frac{a^2}{r^2 - a^2}\right] \right\} \exp(-\varphi), \quad (2)$$

где $\varphi_0 = \varphi(r = a) \equiv -e\phi_0/T_e$, ϕ_0 — электростатический потенциал поверхности зонда, $\operatorname{Erf}(x)$ — интеграл ошибок [34–36]:

$$\operatorname{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (3)$$

$\operatorname{Erfc}(x)$ — дополнительный интеграл ошибок: $\operatorname{Erfc}(x) = 1 - \operatorname{Erf}(x)$.

Далее приведем выражения для расчета распределения концентрации ионов для трех случаев поведения потенциала в окрестности зонда, рассмотренных в работе [22]. Рассматриваем только ионы, совершающие инфинитное движение, так как для появления совершающих финитное движение ионов нужно включить столкновения или рассмотреть нестационарную задачу зарядки изолированного зонда (пылевой частицы), что является отдельной задачей. В работе [22] рассмотрен вопрос о совершающих в притягивающем центре положительно заряженного зонда финитное движение электронах при преобладании столкновений с нейтральными атомами (молекулами) газа с учетом большой разницы масс электрона и атомов. В настоящей работе рассматривается случай отрицательно заряженной пылевой частицы, при этом финитное движение могут совершать только положительные ионы, чья масса сравнима с массой атомов или молекул газа. Для такого случая нет аналитической теории для описания совершающих финитное движение ионов (см., например, работы [37–40]; в работе [39] в предположении максвелловского распределения получено выражение для расчета концентрации захваченных ионов, которое содержит неопределенный множитель).

2.1. Случай 1

В этом самом простом случае потенциал ведет себя как $|e\phi(r)| \sim 1/r^{2-\delta}$, $\delta > 0$, и распределение ионов, совершающих инфинитное движение, в притягивающем поле без учета поглощения зондом определяется выражением [22]

$$n_i(r) = n_{i0} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{z\beta\varphi} + e^{z\beta\varphi} \operatorname{Erfc}\left(\sqrt{z\beta\varphi}\right) \right], \quad (4)$$

а с учетом поглощения — выражением

$$n_i(r) = n_{i0} \left\{ \sqrt{\frac{z\beta\varphi}{\pi}} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2} \frac{\varphi_0}{\varphi}} \right] + \frac{1}{2} e^{z\beta\varphi} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{z\beta\varphi} \right) + \frac{\sqrt{1 - a^2/r^2}}{2} e^{z\beta\tilde{\varphi}} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{z\beta\tilde{\varphi}} \right) \right\}, \quad (5)$$

где z — зарядовое число ионов, $\tilde{\varphi} = (\varphi - \varphi_0 a^2/r^2) / (1 - a^2/r^2)$, n_{i0} — концентрация ионов в невозмущенной плазме, $\beta = T_e/T_i$, T_i — температура ионов в энергетических единицах. Отметим, что в случае 1 на всех расстояниях выполнено условие

$$\frac{r^2\varphi(r)}{a^2} = \varphi_0 \left(\frac{r}{a} \right)^\delta \geq \varphi_0, \quad (6)$$

поэтому появление мнимых значений концентрации ионов невозможно, они появились в работе [24] только из-за использования выражения (5) вне пределов его применимости. Если условие (6) нарушено, то реализуется случай 2 или 3 [22], для которых распределение концентрации ионов описывается уже совсем другими формулами. Поэтому утверждение авторов [24] о несостоятельности приближения ограниченных орбит (OML) для описания сферического зонда по этой причине ошибочно.

2.2. Случай 2

В этом случае $|e\phi(r)| \sim 1/r^{2-\delta}$ при малых и $|e\phi(r)| \sim 1/r^{2+\epsilon}$ при больших расстояниях r от центра зонда ($\delta > 0$, $\epsilon > 0$). Для этого случая без учета поглощения ионов в работе [22] получено соотношение

$$n_i(r) = n_{i0} \left[e^{z\beta\varphi} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{z\beta\varphi} \right) + I(r, \infty) \right], \quad (7)$$

где $I(r, b)$ — интеграл, определенный выражением

$$I(r, b) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z\beta}{\pi}} \int_{\varrho_0(r)}^b \frac{(r_0^2/r^2 - 1) \left(3 \frac{d\varphi}{dr_0} + r_0 \frac{d^2\varphi}{dr_0^2} \right)}{[F(r, r_0)]^{1/2}} \times \exp \left[z\beta \left(\varphi(r_0) + \frac{r_0}{2} \frac{d\varphi(r_0)}{dr_0} \right) \right] dr_0, \quad (8)$$

$$F(r, r_0) = \varphi(r) - \varphi(r_0) + \frac{r_0}{2} \frac{d\varphi}{dr_0} \left(\frac{r_0^2}{r^2} - 1 \right), \quad (9)$$

ϱ_0 — максимальный корень уравнения

$$\varphi(\varrho_0) - \varphi(r) - \frac{\varrho_0}{2} \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=\varrho_0} \left(\frac{\varrho_0^2}{r^2} - 1 \right) = 0. \quad (10)$$

Отметим, что в выражении (7) производные приведенного потенциала по r_0 понимаются в следующем смысле:

$$\frac{d\varphi}{dr_0} = \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=r_0}, \quad \frac{d^2\varphi}{dr_0^2} = \frac{d^2\varphi}{dr^2} \Big|_{r=r_0}.$$

Здесь r_0 — параметр, который определяет проекции скорости иона:

$$v_r^2 = \frac{2ez}{m_i} [\phi(r_0) - \phi(r)] - \frac{r_0 ez}{m_i} \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r=r_0} \left(\frac{r_0^2}{r^2} - 1 \right), \quad (11)$$

$$v_\theta^2 = \frac{ezr_0^2}{m_i r^2} \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r=r_0},$$

m_i — масса ионов.

При учете поглощения ионов зондом для n_i имеет место выражение [22]

$$n_i(r) = \frac{1}{2} n_{i0} \left\{ e^{z\beta\varphi} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{z\beta\varphi} \right) + \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2}} \times \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{-\frac{z\beta\varrho_0^3(a)}{2a^2} \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=\varrho_0(a)} - \frac{z\beta[\varphi_0 - \varphi(r)]}{1 - a^2/r^2}} \right) \times \exp \left[-z\beta \frac{a^2\varphi_0 - r^2\varphi(r)}{r^2 - a^2} \right] + I(r, \varrho_0(a)) + I(r, \infty) \right\}. \quad (12)$$

Отметим, что функция $F(r, r_0)$ не отрицательна в силу определения ϱ_0 (см. выражение (10)), а в точке $r_0 = \varrho_0$ обращается в нуль. Поэтому выражение (8) неудобно для численного интегрирования. С учетом того, что в числителе дроби в (8) стоит величина $\partial F(r, r_0) / \partial r_0$, после интегрирования по частям получим

$$I(r, b) = \sqrt{\frac{z\beta}{\pi}} \left\{ 2\sqrt{F(r, b)} \times \exp \left[z\beta \left(\varphi(b) + \frac{b}{2} \frac{d\varphi}{dr_0} \Big|_{r_0=b} \right) \right] - z\beta \int_{\varrho_0(r)}^b \sqrt{F(r, r_0)} \left(3 \frac{d\varphi}{dr_0} + r_0 \frac{d^2\varphi}{dr_0^2} \right) \times \exp \left[z\beta \left(\varphi(r_0) + \frac{r_0}{2} \frac{d\varphi}{dr_0} \right) \right] dr_0 \right\}. \quad (13)$$

Отметим, что в случаях 2 и 3 (см. ниже) первый член в выражении (13) при $b = \infty$ переходит в $\sqrt{4z\beta\varphi(r)}/\pi$.

Максимальный корень ϱ_0 уравнения (10) всегда больше r_k — корня уравнения

$$3 \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r_k} + r_k \frac{d^2\varphi}{dr^2} \Big|_{r_k} = 0. \quad (14)$$

Например, для дебаевского потенциала (поведение которого полностью соответствует случаю 2)

$$\phi(r) = \frac{\phi_0 a}{r} e^{-(r-a)/R_D}, \quad (15)$$

решая уравнение (14), находим

$$r_k = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} R_D.$$

Здесь R_D — дебаевский радиус экранирования. Следовательно, во всей области изменения параметра r_0 приведенный потенциал $\varphi(r_0)$ в интеграле (8) или (13) уменьшается с ростом r_0 быстрее, чем $1/r_0^2$, т. е. всегда

$$\varphi(r_0) + \frac{r_0}{2} \frac{d\varphi(r_0)}{dr_0} < 0$$

и экспоненциальный член меньше единицы. Отметим, что при выполнении неравенства

$$a \ll r_k \quad (16)$$

выражение (12) переходит в (5), при $a/r \rightarrow 0$ (12) совпадает с (7), а при $r \rightarrow a$ из-за наличия поглощающей поверхности концентрация ионов уменьшится вдвое.

2.3. Случай 3

Этот случай отличается от случая 2 тем, что при $r \rightarrow \infty$ потенциал убывает строго по закону $1/r^2$, т. е. на больших расстояниях ведет себя как

$$ez\phi(r) = -\frac{C}{r^2} \equiv -\frac{C_0 T_i a^2}{r^2} \quad (17)$$

(постоянные C и C_0 положительны). Без учета поглощения в этом случае к выражению (7) прибавится член

$$\Delta n_i(r) = \frac{2n_{i0}}{\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{z\beta\varphi} - \sqrt{z\beta\varphi - C_0 \frac{a^2}{r^2}} \right], \quad (18)$$

а при учете поглощения поправка к выражению (12) при $a > a_k(r)$ имеет вид

$$\Delta n_i(r) = \frac{n_{i0}}{\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{z\beta\varphi} - \sqrt{z\beta\varphi - C_0 \frac{a^2}{r^2}} \right], \quad (19)$$

при $a < a_k(r)$ —

$$\begin{aligned} \Delta n_i(r) = & \frac{n_{i0}}{2} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{z\beta\varphi} + \sqrt{z\beta\varphi - z\beta\varphi_0 \frac{a^2}{r^2}} - \right. \right. \\ & \left. \left. - 2\sqrt{z\beta\varphi - C_0 \frac{a^2}{r^2}} \right] + \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2}} \times \right. \\ & \times \left[\operatorname{Erf} \left(\sqrt{-\frac{z\beta\varrho_0^3(a)}{2a^2} \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=\varrho_0(a)} - \frac{z\beta[\varphi_0 - \varphi(r)]}{1 - a^2/r^2}} \right) - \right. \\ & \left. - \operatorname{Erf} \left(\sqrt{z\beta \frac{r^2\varphi(r) - a^2\varphi_0}{r^2 - a^2}} \right) \right] \times \\ & \left. \times \exp \left[z\beta \frac{r^2\varphi(r) - a^2\varphi_0}{r^2 - a^2} \right] \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

Здесь $a_k(r)$ — критический радиус, определяемый из уравнения

$$-\phi(a_k) + \phi(r) + \frac{r}{2} \frac{d\phi}{dr} \left(1 - \frac{r^2}{a_k^2} \right) = 0 \quad (21)$$

(при $a > a_k$ становится важной кривая, разделяющая частицы, точки поворота которых находятся в ближней и дальней от центра зонда или пылевой частицы областях).

2.4. Модифицированное распределение ионов

В работе [24] предлагалось исправить выражение (5) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{n_i(r)}{n_{i0}} = & \sqrt{\frac{z\beta\varphi}{\pi}} + \frac{1}{2} e^{z\beta\varphi} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{z\beta\varphi} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2}} e^{z\beta\tilde{\varphi}} + \left[\sqrt{\frac{z\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{r^2\varphi - a^2\varphi_0}{r^2}} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{a^2}{r^2}} e^{z\beta\tilde{\varphi}} \operatorname{Erf} \left(\sqrt{z\beta\tilde{\varphi}} \right) \right] \theta(\tilde{\varphi}), \quad (22) \end{aligned}$$

где $\tilde{\varphi} = (r^2\varphi - a^2\varphi_0) / (r^2 - a^2)$, $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда: $\theta(x) = 1$, если $x > 0$, и 0, если $x < 0$. Отметим, что выражение (22) было получено уже в работе [39]. Это выражение справедливо только в случае, если нет барьера при движении иона из бесконечности к поверхности зонда, т. е. при поведении потенциала, как в случае 1. Как отмечалось выше, в этом случае величина $\tilde{\varphi}$ строго положительна. Выражение (22) можно применять в случаях 2 и 3, когда количество ионов, для которых существует барьер, мало. Но такие ионы, как отмечалось в работе [23], при максвелловской функции распределения есть всегда, поэтому точность этой формулы требует отдельного исследования.

3. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ЛИНЕАРИЗОВАННОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЭКРАНИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ ВЛАСОВА С УЧЕТОМ СТОЛКНОВЕНИЙ И СТОКОВ ЭЛЕКТРОНОВ И ИОНОВ

Для проверки полученных выражений для распределения концентраций электронов и ионов рассмотрим задачу на основе подхода в рамках ЛКТЭ [7, 8]. В этих работах для стационарных поправок к невозмущенным функциям распределения получено выражение

$$\begin{aligned} \delta f_{\sigma, \mathbf{k}}(\mathbf{v}) = & \phi_{\mathbf{k}} \frac{e_{\sigma}}{m_{\sigma}} \frac{\partial f_{\sigma 0}(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} + \frac{i S_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{v})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} - \\ & - i \mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}} \frac{e_{\sigma}}{m_{\sigma}} \frac{\nu_{\sigma} \Phi_{\sigma}(\mathbf{v})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} \frac{1}{1 + I_{\Phi\sigma}(k)} \int \frac{1}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}' - i\nu_{\sigma}} \times \\ & \times \frac{\partial f_{\sigma 0}(\mathbf{v}')}{\partial \mathbf{v}'} d\mathbf{v}' + \frac{\nu_{\sigma} \Phi_{\sigma}(\mathbf{v})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} \frac{1}{1 + I_{\Phi\sigma}(k)} \times \\ & \times \int \frac{S_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{v}')}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}' - i\nu_{\sigma}} d\mathbf{v}', \quad (23) \end{aligned}$$

где σ обозначает электроны ($\sigma = e$) или ионы ($\sigma = i$), e_{σ} , m_{σ} — заряд и масса σ -частиц плазмы соответственно, $e_e = -e$, $e_i = ze$, \mathbf{v} — вектор скорости электронов или ионов, $f_{\sigma 0}$ — невозмущенные функции распределения, нормированные условием

$$\int f_{\sigma 0}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1,$$

ν_{σ} — частота столкновений электронов и ионов с атомами буферного газа, $S_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{v})$ — стационарный сток частиц σ -компоненты плазмы на макрочастицу:

$$S_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{v}) = \nu_{\sigma} \sigma (q_0, v) f_{\sigma 0}(\mathbf{v}), \quad (24)$$

$\sigma_{\sigma}(q, v)$ — сечения зарядки, которые зависят от свойств окружающей плазмы, $q_0 = q(t = \infty)$ — стационарный заряд макрочастицы, $\Phi_{\sigma}(\mathbf{v})$ — функция распределения σ -частиц плазмы, формирующаяся в результате столкновений с нейтральными атомами, $I_{\Phi\sigma}(k)$ — интеграл, определенный выражением

$$\begin{aligned} I_{\Phi\sigma}(k) = & i\nu_{\sigma} \int \frac{\Phi_{\sigma}}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} d\mathbf{v} \equiv \\ \equiv & -\frac{4\pi}{k} \int_0^{\infty} \Phi_{\sigma} \nu_{\sigma} \operatorname{arctg}\left(\frac{kv}{\nu_{\sigma}}\right) v dv. \quad (25) \end{aligned}$$

В случае, когда Φ_{σ} является максвелловской функцией с температурой T_{σ} , последний интеграл равен

$$\begin{aligned} I_{\Phi\sigma}(k) = & -(\pi)^{1/2} \frac{k\nu_{\sigma}}{k} \operatorname{Erfc}\left(\frac{k\nu_{\sigma}}{k}\right) \exp\left(\frac{k^2\nu_{\sigma}^2}{k^2}\right), \quad (26) \\ k\nu_{\sigma} = & \nu_{\sigma} \sqrt{\frac{m_{\sigma}}{2T_{\sigma}}}. \end{aligned}$$

После интегрирования (23) по $d\mathbf{v}$ с максвелловскими функциями распределения в работах [7, 10] найдено

$$\begin{aligned} \delta n_{\sigma, \mathbf{k}} \equiv & n_{\sigma 0} \int \delta f_{\sigma, \mathbf{k}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \\ = & -\phi_{\mathbf{k}} \frac{e_{\sigma} n_{\sigma 0}}{T_{\sigma}} + \frac{I_{S\sigma}(k)}{1 + I_{\Phi\sigma}(k)} n_{\sigma 0}, \quad (27) \end{aligned}$$

где интеграл $I_{S\sigma}(k)$ определен выражением

$$\begin{aligned} I_{S\sigma}(k) = & i \int \frac{S_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{v})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i\nu_{\sigma}} d\mathbf{v} = \\ = & -\frac{4\pi}{k} \int_0^{\infty} f_{\sigma 0} \sigma_{\sigma} \operatorname{arctg}\left(\frac{kv}{\nu_{\sigma}}\right) v^2 dv. \quad (28) \end{aligned}$$

Из выражения (27) следует, что возмущения концентраций заряженных частиц плазмы вызваны как электрическим полем заряженной макрочастицы, так и стоками электронов и ионов на макрочастицу.

В стационарном режиме для фурье-образа потенциала в случае максвелловских функций распределения имеем [7, 10]

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e q_0}{k^2 + k_D^2} + \frac{4\pi}{k^2 + k_D^2} \sum_{\sigma} e_{\sigma} n_{\sigma 0} \frac{I_{S\sigma}}{1 + I_{\Phi\sigma}}, \quad (29)$$

где k_D — постоянная экранирования: $k_D^2 = \sum_{\sigma} k_{D\sigma}^2$, $k_{D\sigma}$ — постоянная экранирования σ -компоненты плазмы:

$$k_{D\sigma}^2 = \frac{4\pi e_{\sigma}^2 n_{\sigma 0}}{T_{\sigma}}.$$

После обратного фурье-преобразования (27) и (29) для стационарного распределения потенциала и возмущений концентрации частиц плазмы находим

$$\begin{aligned} \phi(r) = & \frac{q_0 e^{-k_D r}}{r} + \frac{2}{\pi r} \sum_{\sigma} e_{\sigma} n_{\sigma 0} \int \frac{I_{S\sigma}(k)}{1 + I_{\Phi\sigma}(k)} \times \\ & \times \frac{\sin(kr)}{k^2 + k_D^2} k dk, \quad (30) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta n_{\sigma}(r) = & -n_{\sigma 0} \frac{e_{\sigma} \phi(r)}{T_{\sigma}} + \frac{n_{\sigma 0}}{2\pi^2 r} \times \\ & \times \int \frac{I_{S\sigma}(k)}{1 + I_{\Phi\sigma}(k)} \sin(kr) k dk. \quad (31) \end{aligned}$$

Первый член в правой части выражения (31) есть просто линейный член разложения распределения Больцмана, а второй член обусловлен стоком σ -частиц плазмы на макрочастицу.

При численном интегрировании (30) и особенно (31) возникают трудности, связанные с тем, что функции

$$F_\sigma(k) = \frac{I_{S_\sigma}(k)}{1 + I_{\Phi_\sigma}}$$

при больших k имеют асимптотики вида

$$F_\sigma(k) \asymp F_{\sigma,as}(k) = \frac{a_\sigma}{k} + \frac{b_\sigma}{k^2}. \quad (32)$$

Поэтому в численных расчетах по массивам данных $F_\sigma(k)$ при больших k методом наименьших квадратов находились коэффициенты a_σ и b_σ , затем из $F_\sigma(k)$ вычиталась $F_{\sigma,as}(k)$ и проводилось быстрое фурье-преобразование. Затем к полученному результату добавлялись асимптотические распределения потенциала и концентраций:

$$\begin{aligned} \phi_{as}(r) &\equiv \frac{2}{\pi r} \sum_\sigma e_\sigma n_\sigma \int \frac{F_{\sigma,as}(k)}{k^2 + k_D^2} \sin(kr) k dk = \\ &= \frac{\tilde{e}Q_{as}}{r} g(k_D r) + \frac{eQ_{as}}{r} (1 - e^{-k_D r}), \quad (33) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n_{\sigma,as}(r) &\equiv \frac{n_{\sigma 0}}{2\pi^2 r} \int F_{\sigma,as}(k) \sin(kr) k dk = \\ &= \frac{n_{\sigma 0}}{2\pi^2 r} \left(\frac{a_\sigma}{r} + \frac{\pi}{2} b_\sigma \right), \quad (34) \end{aligned}$$

где $\tilde{Q}_{as} = \sum_\sigma \tilde{Q}_{\sigma,as}$, $Q_{as} = \sum_\sigma Q_{\sigma,as}$, $g(k_D r) = e^{-k_D r} \text{Ei}(k_D r) + e^{k_D r} \text{E}_1(k_D r)$, $\text{Ei}(x)$, $\text{E}_1(x)$ — интегральные показательные функции, асимптотические заряды определены выражениями

$$\tilde{Q}_{\sigma,as} = \frac{a_\sigma e_\sigma n_\sigma}{\pi e k_D}, \quad Q_{\sigma,as} = \frac{b_\sigma e_\sigma n_\sigma}{e k_D^2}.$$

С учетом того, что при $x \rightarrow \infty$ функция $g(x) \rightarrow 2/x$, из (33) и (17) находим

$$C_0 = -\frac{2e^2 z (\tilde{Q}_{e,as} + \tilde{Q}_{i,as})}{T_i k_D a^2}. \quad (35)$$

4. СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ

В случае зондовых измерений потенциал зонда может быть произвольным, но в случае макрочастицы в плазме потенциал ее поверхности определяется равенством потоков электронов и ионов на нее:

$$S_e = S_i, \quad (36)$$

где

$$S_\sigma = n_{\sigma 0} \int S_\sigma^{(0)}(v) d\mathbf{v} = n_{\sigma 0} \int \sigma_\sigma(\phi_0, v) f_{\sigma 0}(\mathbf{v}) d\mathbf{v},$$

$\sigma_\sigma(\phi_0, v)$ — сечения зарядки, которые зависят от свойств окружающей плазмы. В качестве сечения зарядки мы будем использовать сечения поглощения в приближении ограниченных орбит [21]:

$$\sigma_\sigma(u) = \pi r_0^2 \begin{cases} 1 - \frac{2e_\sigma \phi_0}{m_\sigma u^2}, & u^2 > 2e_\sigma \phi_0 / m_\sigma, \\ 0, & u^2 < 2e_\sigma \phi_0 / m_\sigma. \end{cases} \quad (37)$$

Можно также учесть влияние столкновений на сечения поглощения ионов (см., например, работы [41–48]).

Используя сечения (37), в случае максвелловских функций распределения для потоков находим

$$\begin{aligned} S_e &= \pi r_0^2 n_{e0} \sqrt{\frac{8T_e}{\pi m_e}} \exp\left(\frac{e\phi_0}{T_e}\right), \\ S_i &= \pi r_0^2 z n_{i0} \sqrt{\frac{8T_i}{\pi m_i}} \left(1 - \frac{ez\phi_0}{T_i}\right). \end{aligned} \quad (38)$$

Выражения (38) не учитывают ионы, совершающие финитное движение вокруг зонда с отрицательным потенциалом, а также выражение для S_i справедливо только при поведении потенциала, описываемом случаем 1. Если поведение потенциала относится к случаю 2 или 3, то поток ионов на зонд уже зависит от всего хода потенциала, а не только от ϕ_0 , и определяется выражением [22]

$$\begin{aligned} S_i &= \pi r_0^2 z n_{i0} \sqrt{\frac{8T_i}{\pi m_i}} \left\{ C_0 + \frac{\varrho_0^2(a)}{a^2} - \left[\frac{\varrho_0^2(a)}{a^2} - 1 \right] \times \right. \\ &\times \exp \left[z\beta\varphi(\varrho_0|_{r=a}) + \frac{z\beta\varrho_0(a)}{2} \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=\varrho_0(a)} \right] + \\ &+ \int_{\varrho_0(a)}^\infty r_0 \left[1 - \exp \left(z\beta\varphi(r_0) + \frac{r_0 z\beta}{2} \times \right. \right. \\ &\left. \left. \times \frac{d\varphi(r_0)}{dr_0} \right) \right] dr_0 \left. \right\}. \quad (39) \end{aligned}$$

(В случае 2, напомним, $C_0 = 0$.) Здесь мы самосогласованную задачу не решаем, поэтому потенциал поверхности зонда определяется с использованием формулы (38) для потока ионов.

Если всюду в области $r_0 > \varrho_0(a)$ выполнено условие

$$\varphi(r_0) + \frac{r_0}{2} \frac{d\varphi(r_0)}{dr_0} \ll \frac{1}{z\beta}, \quad (40)$$

то выражение (39) переходит во второе выражение (38).

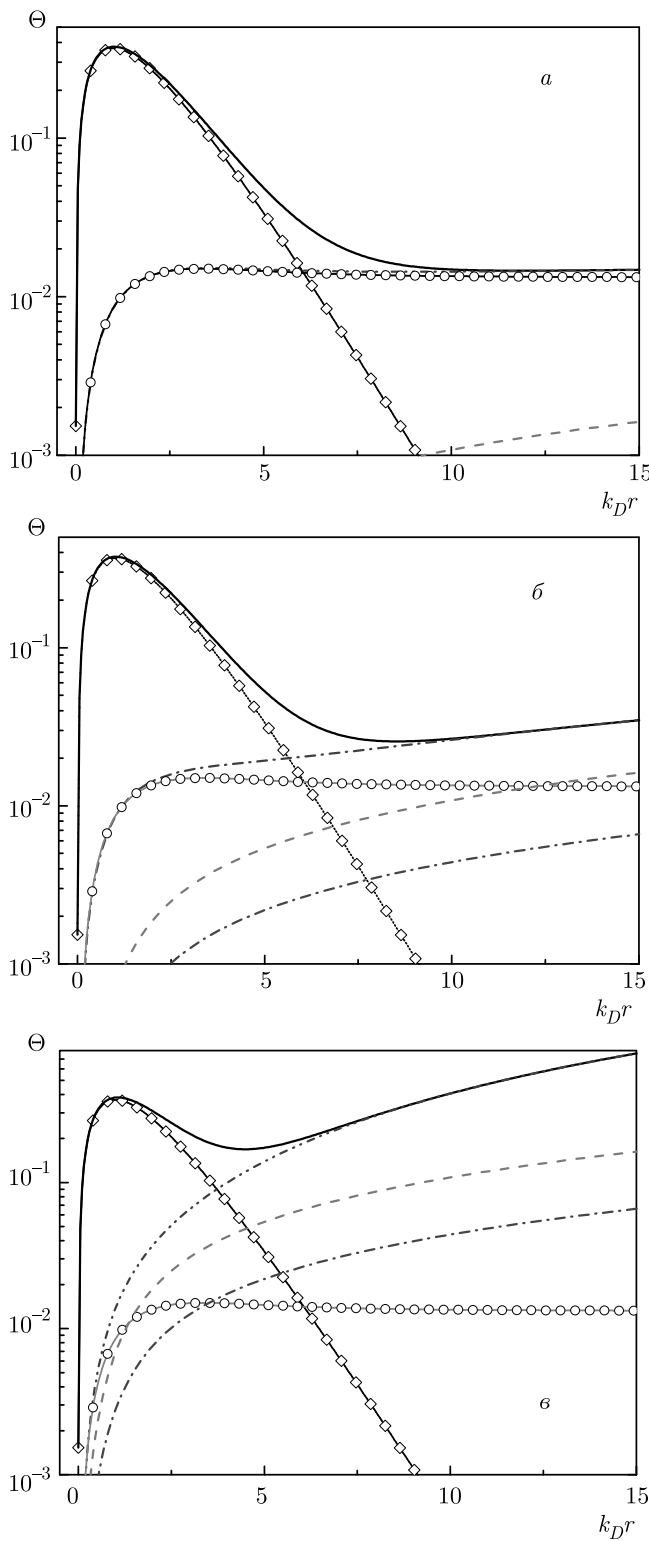


Рис. 1. Распределение приведенного потенциала $\Theta(r) = k_D r^2 \phi(r) / \phi_0$ самосогласованного электрического поля вокруг макрочастицы радиусом 1 мкм в изотермической плазме при $E/N = 1$ Тд, давлениях 0.1 Па (а), 1 Па (б) и 10 Па (в) в аргоне: сплошные кривые — полный потенциал (30), ромбы — дебаевский потенциал (42), штрихпунктирные кривые с двумя точками — полный потенциал (30) без дебаевского вклада, кружки — $\phi_g(r)$ (43), штриховые кривые — $\phi_Q(r)$, штрихпунктирные кривые — $\phi_S(r)$ (49)

На рис. 1 представлены распределения приведенного потенциала $\Theta(r) = k_D r^2 \phi(r) / \phi_0$ в аргоне при $E_{dis}/N = 1$ Тд при трех разных давлениях и, соответственно, разных частотах столкновений, найденные из выражения (30) путем быстрого фурье-преобразования. В расчетах использовались равномерные сетки по k и r в основном из $N = 2^{16}$ точек при максимальном значении волнового числа $k_{max} = 2^{11} k_D$ и максимальном значении радиальной координаты $R_{max} = \pi N / k_{max} = 32 \pi R_D$. Концентрации электронов и ионов задавались, как и в работе [10], следующими: $n_{e0} = n_{i0} = 10^9 \text{ см}^{-3}$ ($z_i = 1$), радиус пылевой частицы $a = 1$ мкм, температура ионов $T_i = 0.026$ эВ (300 К). Температура электронов задавалась соответствующей приведенной напряженности электрического поля E/N , равной 10^{-4} и 1 Тд (более подробно см. работу [10]).

В изотермической плазме ($T_e \approx T_i = 0.026$ эВ) распределения потенциала имели практически такой же вид, отличаясь только мелкими деталями. Интегралы $I_{S\sigma}$ (28) вычислялись методом трапеций с адаптивным выбором шага для достижения заданной относительной точности, равной 10^{-6} .

Из рис. 1 видно, что величина $\Theta(r)$ при давлении 0.1 Па проходит через максимум, а на больших расстояниях принимает постоянное значение, поэтому распределение потенциала при этом давлении относится к случаю 3. Такая же картина при этом давлении наблюдалась и в других инертных газах. С ростом давления на больших расстояниях величина $\Theta(r)$ начинает расти, что связано с вкладом потенциала ϕ_Q (см. ниже выражение (44)), убывающего как $1/r$. Это приводит к тому, что интеграл (8) при $b = \infty$ и интеграл в выражении для стока ионов (39) становятся расходящимися. Поэтому поведение потенциала уже при давлении газа 1 Па не описывается ни одним из рассмотренных в работе [22] случаев.

На рис. 1 также приведены распределения потенциала согласно аналитическому выражению [10]

$$\phi(r) = \phi_D(r) + \phi_g(r) + \phi_Q(r), \quad (41)$$

где ϕ_D — дебаевский потенциал (q_0 — заряд пылевой частицы):

$$\phi_D(r) = \frac{eq_0 e^{-k_D r}}{r}, \quad (42)$$

ϕ_g — обусловленная стоками электронов и ионов на пылевую частицу часть потенциала в бесстолкновительном пределе:

$$\phi_g(r) = -\frac{\sum e\tilde{Q}_\sigma}{r} g(k_D r), \quad (43)$$

ϕ_Q — обусловленная столкновениями электронов и ионов с нейтральными атомами часть потенциала:

$$\phi_Q(r) = -\frac{e \sum Q_\sigma}{r} (1 - e^{-k_D r}). \quad (44)$$

Здесь \tilde{Q}_σ и Q_σ — эффективные заряды, определенные выражениями

$$\tilde{Q}_\sigma = \frac{2\pi z_\sigma n_{\sigma 0}}{k_D} \int_0^\infty f_{\sigma 0} \sigma_\sigma v^2 dv, \quad (45)$$

$$Q_\sigma = \frac{\pi \nu_\sigma}{k_D} \sqrt{\frac{\pi m_\sigma}{2T_\sigma}} \tilde{Q}_\sigma. \quad (46)$$

При выполнении условия $k_D a \ll 1$ для нахождения заряда макрочастицы можно использовать вакуумную связь с потенциалом поверхности: $eq_0 = \phi_0 a$, в случае дебаевского экранирования нужно использовать формулу $eq_0 = \phi_0 a (1 + k_D a)$.

При интегрировании с максвелловскими функциями распределения в работе [10] получены выражения

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_i &= \frac{z_i n_{i0} \pi r_0^2}{2k_D} \left(1 - \frac{2ez_i \phi_0}{T_i} \right), \\ \tilde{Q}_e &= \frac{z_e n_{e0} \pi r_0^2}{2k_D} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{-\frac{e\phi_0}{T_e}} \exp\left(\frac{e\phi_0}{T_e}\right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{2e\phi_0}{T_e} \right) \operatorname{erfc}\left(\sqrt{-\frac{e\phi_0}{T_e}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (47)$$

При давлении 0.1 Па значение эффективного заряда Q_i ($Q_e \ll Q_i$), связанного со столкновениями, мало, поэтому (41) практически совпадает с суммой дебаевского потенциала (42) и потенциала (43). Отметим, что потенциал (43) на больших расстояниях $k_D r \gg 1$ выходит на асимптотику:

$$\phi_g(r) \simeq -\frac{2e(\tilde{Q}_e + \tilde{Q}_i)}{k_D r^2}. \quad (48)$$

Поэтому при определении величины C_0 в выражении (41) вместо $\tilde{Q}_{e,as}$ и $\tilde{Q}_{i,as}$ можно использовать

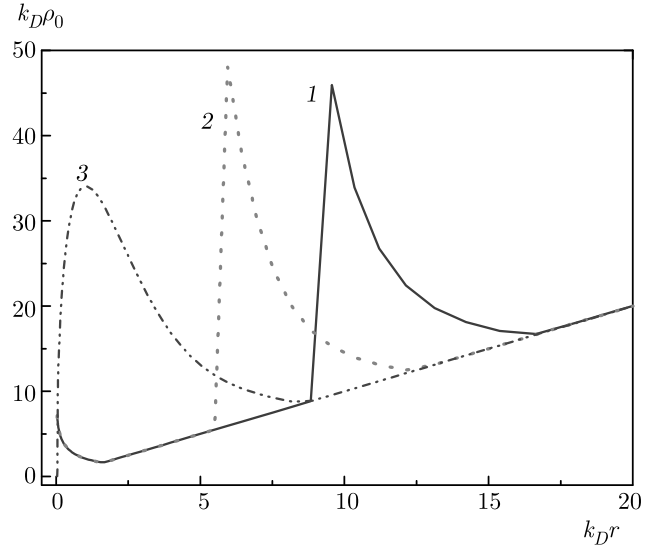


Рис. 2. Наибольший корень уравнения (10) в электрическом поле макрочастицы радиусом 1 мкм в изотермической плазме при $E/N = 10^{-4}$ Тд при давлении 0.1 Па (1), 1 Па (2) и 10 Па (3) в аргоне

заряды \tilde{Q}_e и \tilde{Q}_i (это значение параметра будем далее обозначать как C_{0Q}).

С ростом давления потенциал $\phi_g(r)$ практически не меняется, а $\phi_Q(r)$ растет пропорционально частоте столкновений. Это приводит к тому, что дебаевская часть потенциала $\phi_D(r)$ становится меньше остальной части на меньших расстояниях. Отметим, что согласно [7, 10] в сильно столкновительном режиме поведение потенциала описывается суммой $\phi(r) = \phi_D(r) + \phi_S(r)$, где ϕ_S — обусловленная стоками электронов и ионов на пылевую частицу часть потенциала в столкновительной плазме:

$$\phi_S(r) = -\frac{e \sum Q_{s\sigma}}{r} (1 - e^{-k_D r}), \quad (49)$$

$Q_{s\sigma}$ — эффективный заряд, определенный выражением

$$Q_{s\sigma} = \frac{z_\sigma m_\sigma \nu_\sigma S_\sigma}{k_D^2 T_\sigma}. \quad (50)$$

Из рис. 1 видно, что величина $\phi_S(r)$ с ростом давления становится все выше и выше.

Расчеты в других газах показали аналогичное поведение распределений потенциала с максимумом величины $\Theta(r)$ и линейным ростом на больших расстояниях при давлении выше 1 Па. Здесь обратим внимание на то, что в работе [41] отмечалось хорошее согласие распределений потенциала, рассчитанных из исходных кинетических уравнений Власова со столкновительным членом в форме Бхатнага-

Таблица 1. Потенциал поверхности пылевой частицы радиусом 1 мкм из уравнения (36), значение расчетного потенциала (36) при $r = a$, поток ионов из (38) и (39), значения величины C_0 с зарядами \tilde{Q}_e и \tilde{Q}_i и с асимптотическими зарядами (35) в инертных газах при давлении $p = 0.1$ Па и $E/N = 10^{-4}$ Тд

Газ	ϕ_0	$\phi(r = a)$	S_i (38)	S_i (39)	C_{0Q}	C_0 (35)
He	-0.079	-0.076	$1.60 \cdot 10^7$	$1.23 \cdot 10^7$	0.884	0.880
Ne	-0.096	-0.093	$8.30 \cdot 10^6$	$6.28 \cdot 10^6$	1.050	1.045
Ar	-0.103	-0.100	$6.25 \cdot 10^6$	$5.04 \cdot 10^6$	1.122	1.111
Kr	-0.111	-0.107	$4.58 \cdot 10^6$	$3.73 \cdot 10^6$	1.199	1.187
Xe	-0.116	-0.112	$3.79 \cdot 10^6$	$3.18 \cdot 10^6$	1.247	1.232

Таблица 2. Потенциал поверхности пылевой частицы из уравнения (36), значение расчетного потенциала (36) при $r = a$, поток ионов из (38) и (39), значения величины C_0 с зарядами \tilde{Q}_e и \tilde{Q}_i и с асимптотическими зарядами (35) в инертных газах при давлении $p = 0.1$ Па и $E/N = 1$ Тд

Газ	ϕ_0	$\phi(r = a)$	S_i (38)	S_i (39)	C_{0Q}	C_0 (35)
He	-0.853	-0.832	$1.34 \cdot 10^8$	$1.21 \cdot 10^8$	15.6	15.5
Ne	-5.644	-5.508	$3.86 \cdot 10^8$	$3.61 \cdot 10^8$	108.2	107.3
Ar	-4.229	-4.127	$2.06 \cdot 10^8$	$2.25 \cdot 10^8$	80.7	79.6
Kr	-4.179	-4.078	$1.41 \cdot 10^8$	$1.58 \cdot 10^8$	79.6	78.4
Xe	-3.718	-3.628	$1.00 \cdot 10^8$	$1.20 \cdot 10^8$	70.6	69.3

ра – Гросса – Крука (БГК) и в рамках линеаризованной теории [7].

На рис. 2 приведены зависимости наибольшего решения уравнения (10) при разных давлениях, найденные с использованием рассчитанных из (30) распределений потенциала. Видно, что при давлении аргона $p = 0.1$ Па на малых расстояниях до $k_D r \sim 10$ поведение ϱ_0 соответствует дебаевскому потенциалу (см. [22]), причем при $k_D r \geq (1 + \sqrt{5})/2 \varrho_0$ максимальное решение уравнения (10) достаточно быстро выходит на решение $\varrho_0 = r$, которое имеет место всегда. Далее начинается влияние растущей части величины $\Theta(r)$, что приводит к всплеску ϱ_0 и последующему возврату на линию $\varrho_0 = r$. При $p = 1$ Па этот всплеск сдвигается в сторону меньших расстояний, а при $p = 10$ Па начинается прямо от поверхности пылевой частицы.

В табл. 1 и 2 приведены значения ряда величин в инертных газах при давлении $p = 0.1$ Па в изотермической ($E/N = 10^{-4}$ Тд) и неизотермической ($E/N = 1$ Тд) плазме для пылевых частиц радиусом $a = 1$ мкм. Видно, что потенциал поверхности пылевой частицы из уравнения (36) с потоками (38) (потенциал поверхности без учета барьеров для движения ионов) очень близок к значению расчетного

потенциала (30) при $r = a$, а поток ионов из выражения (38), обычно используемого при определении заряда в ПОО, и выражения (39) также оказываются близкими. При этом выражение (39) в изотермической плазме дает чуть меньшие значения, а в неизотермической плазме в аргоне, криптоне и ксеноне — чуть большие значения. Это находится в согласии с работой [41], в которой наблюдалось прохождение через максимум зависимости потока ионов от произведения длины свободного пробега ионов ℓ_i на постоянную экранирования. В неизотермической плазме постоянная экранирования оказывается меньше примерно в $\sqrt{2}$ раз (см. [10]), поэтому произведение $k_D \ell_i$ во столько же раз уменьшается и в неизотермической плазме в аргоне, криптоне и ксеноне поток оказывается ближе к максимуму. Также интересно отметить близость значений параметров C_{0Q} , определенного с зарядами \tilde{Q}_e и \tilde{Q}_i (47), и C_0 , вычисленного с асимптотическими зарядами из (35).

При увеличении давления до 1 Па близость потенциалов поверхности из уравнения (36) с потоками (38) и расчетного потенциала (30) при $r = a$, а также величин C_0 и C_{0Q} сохраняется, а значения потока в тяжелых инертных газах начинают сильно расходиться (см. табл. 3). Еще большее расхождение

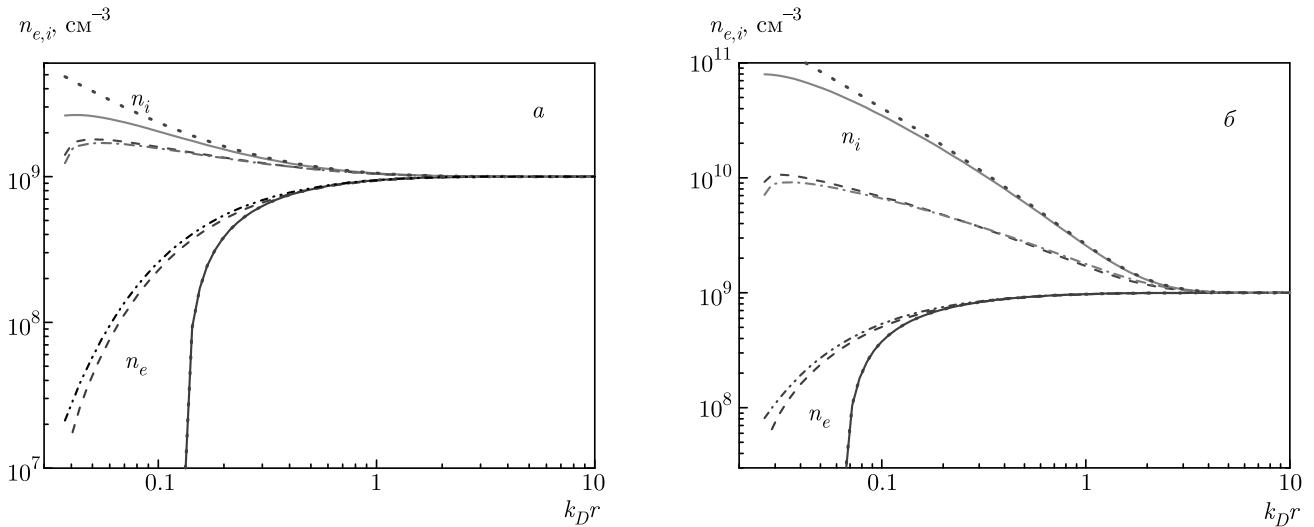


Рис. 3. Распределение концентрации электронов (n_e) и ионов (n_i) вокруг макрочастицы радиусом 1 мкм в изотермической плазме (а) и в неизотермической плазме при $E/N = 1$ Тд (б) и давлении 0.1 Па в аргоне. Сплошные кривые — из (31), штриховые — из (12) с добавочным членом (19) или (20) для ионов и из (2) для электронов, пунктирные — линеаризация распределений Больцмана: $n_\sigma(r) = n_{\sigma 0} [1 - e_{\sigma\phi}(r)/T_\sigma]$ (30), штрихпунктирные — модифицированное ПОО (22), штрихпунктирные с двумя точками — распределение Больцмана для электронов (1)

Таблица 3. Поток ионов на пылевую частицу радиусом 1 мкм в инертных газах при давлении $p = 1$ Па

Газ	$E/N = 10^{-4}$ Тд		$E/N = 1$ Тд	
	S_i (38)	S_i (39)	S_i (38)	S_i (39)
He	$1.60 \cdot 10^7$	$2.01 \cdot 10^7$	$1.34 \cdot 10^8$	$1.14 \cdot 10^8$
Ne	$8.30 \cdot 10^6$	$1.07 \cdot 10^7$	$3.86 \cdot 10^8$	$4.33 \cdot 10^8$
Ar	$6.25 \cdot 10^6$	$1.10 \cdot 10^7$	$2.06 \cdot 10^8$	$4.97 \cdot 10^8$
Kr	$4.58 \cdot 10^6$	$8.58 \cdot 10^6$	$1.41 \cdot 10^8$	$3.81 \cdot 10^8$
Xe	$3.79 \cdot 10^6$	$2.04 \cdot 10^6$	$1.00 \cdot 10^8$	$3.33 \cdot 10^8$

наблюдается при дальнейшем росте давления, что обусловлено растущей пропорционально давлению частью потенциала, имеющей кулоновскую зависимость. Поэтому возникает вопрос о точности определения потенциала поверхности пылевых частиц при давлениях выше 1 Па из уравнения (36) с потоками (38).

На рис. 3 приведены зависимости концентрации электронов и ионов в аргоне при давлении 0.1 Па. Видно, что уже при $k_D r \leq 2$ начинается расхождение между распределениями ионов в рамках ЛКТЭ и ПОО. При этом распределение электронов в ЛКТЭ практически полностью описывается линеаризованным распределением Больцмана, а ионов

достаточно близко к нему. Отметим, что распределение электронов (2) в ПОО оказывается достаточно близким к распределению Больцмана (1), что связано с незначительностью потерь электронов из-за стока на пылевую частицу.

Сравнение распределений ионов, найденных в ПОО и из модифицированного выражения (22), показывает, что при давлении 0.1 Па они различаются незначительно как при $E/N = 10^{-4}$ Тд, когда заряд пылевых частиц мал, так и при 1 Тд, когда заряд становится почти на два порядка выше (см. [10]). Это говорит о том, что при давлении 0.1 Па влияние потенциальных барьеров при приближении ионов к поверхности пылевой частицы незначительно.

При увеличении давления, как видно из рис. 4, на распределении ионов в ПОО на малых расстояниях появляются заметные нерегулярные отклонения, что связано с неприменимостью ни одного из рассмотренных в работе [22] случаев поведения потенциала при давлении выше 1 Па. При более высоких давлениях нерегулярное поведение распределения ионов только усиливается во всех рассмотренных в настоящей работе инертных газах. При этом выражение (22) позволяет рассчитать распределение ионов и при этих давлениях, но точность полученных значений концентрации ионов при этом остается неизвестной. В расчетах кинетических уравнений Власова со столкновительным членом в форме

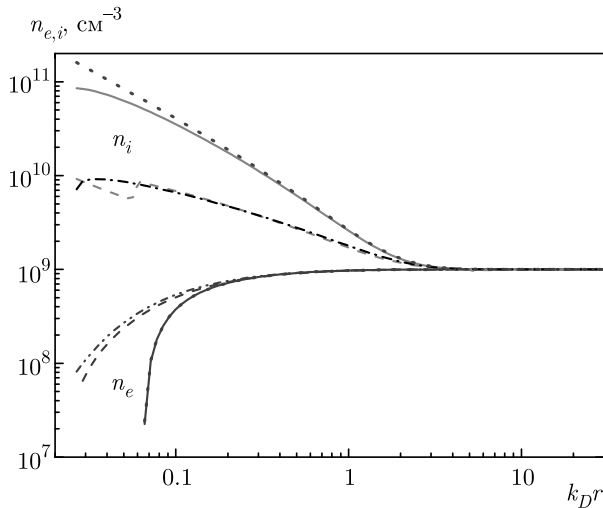


Рис. 4. Распределение концентрации электронов (n_e) и ионов (n_i) вокруг макрочастицы радиусом 1 мкм в неизотермической плазме при $E/N = 1$ Тд и давлении 1 Па в аргоне. Обозначения, как на рис. 3

БГК [49] было показано, что полученное распределение ионов при низких давлениях оказывается достаточно близким к распределению (22). Такой же вывод был сделан и в расчетах методом частиц в ячейках [50].

Близость распределений ионов и электронов в ЛКТЭ и линейаризованных распределений Больцмана позволяет сделать вывод, что область применимости ЛКТЭ близка к области применимости теории Дебая – Гюккеля и ограничивается областью малых значений отношения потенциальной и тепловой энергии электронов и ионов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования распределения электронов и ионов вокруг заряженной пылевой частицы на основе линейаризованной кинетической теории экранирования, включающей кинетические уравнения с самосогласованным полем, дополненные столкновительными интегралами в форме Бхатнагара – Гросса – Крука и точечными стоками электронов и ионов, показали ограниченную применимость приближения ограниченных орбит и ограниченную применимость линейаризованной кинетической теории экранирования на основе уравнений Власова с учетом столкновений и стоков электронов и ионов. Сравнение полученных распределений электронов и ионов с результатами теории зондов в рамках приближения ограничен-

ных орбит показало, что последнее в инертных газах применимо только в пределе низких давлений, а с ростом давления кулоновская асимптотика потенциала, пропорциональная частоте столкновений электронов и ионов с нейтральными атомами (молекулами), делает неприменимыми формулы приближения ограниченных орбит для распределения ионов. Распределения электронов и ионов, полученные в рамках столкновительной кинетической модели точечных стоков, оказались близки к линейаризованным распределениям Больцмана. Это позволяет сделать вывод, что область применимости столкновительной кинетической модели точечных стоков близка к области применимости теории Дебая – Гюккеля.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Власов, ЖЭТФ **8**, 291 (1938); УФН **93**, 444 (1967).
2. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **16**, 574 (1946); УФН **93**, 527 (1967).
3. N. S. Van Kampen, Physica **21**, 949 (1955).
4. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, Высшая школа, Москва (1988).
5. Б. Б. Кадомцев, *Коллективные явления в плазме*, Наука, Москва (1988), 304 с.
6. А. В. Тимофеев, *Резонансные явления в колебаниях плазмы*, Физматлит, Москва (2009), 296 с.
7. А. В. Филиппов, А. Г. Загородний, А. Ф. Паль, А. Н. Старостин, А. И. Момот, Письма в ЖЭТФ **86**, 873 (2007).
8. А. В. Филиппов, А. Г. Загородний, А. И. Момот, А. Ф. Паль, А. Н. Старостин, ЖЭТФ **131**, 164 (2007).
9. A. G. Zagorodny, Theor. Math. Phys. **160**, 1100 (2009).
10. А. В. Филиппов, А. Г. Загородний, А. И. Момот, А. Ф. Паль, А. Н. Старостин, ЖЭТФ **152**, 1088 (2017).
11. S. A. Khrapak, B. A. Klumov, and G. E. Morfill, Phys. Rev. Lett. **100**, 225003 (2008).

12. S. Khrapak and G. Morfill, *Contrib. Plasma Phys.* **49**, 148 (2009).
13. О. В. Козлов, *Электрический зонд в плазме*, Атомиздат, Москва (1969).
14. П. Чан, Л. Тэлбот, К. Турян, *Электрические зонды в неподвижной и движущейся плазме*, Мир, Москва (1978).
15. Б. В. Алексеев, В. А. Котельников, *Зондовый метод диагностики плазмы*, Энергоатомиздат, Москва (1988).
16. М. С. Бенилов, в сб. *Диагностика низкотемпературной плазмы*, под ред. М. Ф. Жукова, А. А. Овсянникова, Наука, Новосибирск (1994), с. 214–247.
17. M. S. Benilov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, 1683 (2000).
18. V. I. Demidov, S. V. Ratynskaia, and K. Rypdal, *Rev. Sci. Instr.* **73**, 3409 (2002).
19. A. Autricque, S. A. Khrapak, L. Coulldel, N. Fedorczak, C. Arnas, J.-M. Layet, and C. Grisolia, *Phys. Plasmas* **25**, 063701 (2018).
20. D. Darian, S. Marholm, M. Mortensen, and W. J. Miloch, *Plasma Phys. Control. Fusion* **61**, 085025 (2019).
21. H. M. Mott-Smith and I. Langmuir, *Phys. Rev.* **28**, 727 (1926).
22. Ya. L. Al'pert, A. V. Gurevich, and L. P. Pitaevskii, *Space Physics with Artificial Satellites*, Plenum Press, New York (1965).
23. J. Allen, B. Annaratone, and U. de Angelis, *J. Plasma Phys.* **63**, 299 (2000).
24. X.-Z. Tang and G. L. Delzanno, *Phys. Plasmas* **21**, 123708 (2014).
25. В. Н. Цытович, *УФН* **167**, 57 (1997).
26. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, В. И. Молотков, О. Ф. Петров, *УФН* **174**, 495 (2004).
27. V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak, and G. E. Morfill, *Phys. Rep.* **421**, 1 (2005).
28. A. Ivlev, H. Löwen, G. Morfill, and C. P. Royall, *Series in Soft Condensed Matter*, Vol. 5, World Sci., Singapore (2012).
29. I. Mann, N. Meyer-Vernet, and A. Czechowski, *Phys. Rep.* **536**, 1 (2014).
30. А. В. Ивлев, С. А. Храпак, В. И. Молотков, А. Г. Храпак, *Введение в физику пылевой и комплексной плазмы*, Издат. дом Интеллект, Москва (2017).
31. F. Greiner, A. Melzer, B. Tadsen, S. Groth, C. Killer, F. Kirchsclager, F. Wieben, I. Pilch, H. Krüger, D. Block, A. Piel, and S. Wolf, *Eur. Phys. J. D* **72**, 81 (2018).
32. Л. Кедель, В. М. Носенко, С. Жданов, А. В. Ивлев, И. Лаут, Е. В. Яковлев, Н. П. Крючков, П. В. Овчаров, А. М. Липаев, С. О. Юрченко, *УФН* **189**, 1070 (2019).
33. A. A. Samarian and B. W. James, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, B629 (2005).
34. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматлит, Москва (1963).
35. E. Jahnke, F. Emde, and F. Lüsich, *Tables of Higher Functions*, McGraw-Hill, New York (1960); Nauka, Moscow (1977).
36. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, ed. by M. Abramowitz and I. A. Stegun, Nat. Bureau of Standards, Appl. Math. Ser. **55** (1972).
37. M. Lampe, V. Gavrishchaka, G. Ganguli, and G. Joyce, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5278 (2001).
38. M. Lampe, R. Goswami, Z. Sternovsky, S. Robertson, V. Gavrishchaka, G. Ganguli, and G. Joyce, *Phys. Plasmas* **10**, 1500 (2003).
39. T. Bystrenko and A. Zagorodny, *Phys. Lett. A* **299**, 383 (2002).
40. С. А. Майоров, *Физика плазмы* **31**, 749 (2005).
41. I. L. Semenov, A. G. Zagorodny, and I. V. Krivtsun, *Phys. Plasmas* **19**, 043703 (2012).
42. A. V. Zobnin, A. D. Usachev, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, *Phys. Plasmas* **15**, 043705 (2008).
43. А. В. Зобнин, А. П. Нефедов, В. А. Синельщиков, В. Е. Фортов, *ЖЭТФ* **118**, 554 (2000).
44. О. С. Ваулина, А. Ю. Репин, О. Ф. Петров, К. Г. Адамович, *ЖЭТФ* **129**, 1118 (2006).
45. L. G. D'yachkov, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill, *Phys. Plasmas* **14**, 042102 (2007).
46. I. H. Hutchinson and L. Patacchini, *Phys. Plasmas* **14**, 013505 (2007).

-
47. S. A. Khrapak and G. E. Morfill, *Phys. Plasmas* **15**, 114503 (2008).
48. I. Pilch, L. Caillault, T. Minea, U. Helmersson, A. A. Tal, I. A. Abrikosov, E. P. Münger, and N. Brenning, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, 395208 (2016).
49. I. L. Semenov, A. G. Zagorodny, and I. V. Krivtsun, *Phys. Plasmas* **18**, 103707 (2011).
50. G. L. Delzanno and X.-Z. Tang, *Phys. Plasmas* **22**, 113703 (2015).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);

в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, *ФТТ* **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., *Phys. Rev. A* **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. Ф. АНДРЕЕВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук *И. Г. ЗУБАРЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *Е. И. КАЦ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук *В. П. КРАЙНОВ*, акад. *М. В. САДОВСКИЙ*, канд. физ.-мат. наук *С. С. СОСИН*,
канд. физ.-мат. наук *Ю. С. БАРАШ*, член-корр. РАН *С. В. ТРОИЦКИЙ* (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН *И. А. ФОМИН* (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук *Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании), акад. *А. М. ЧЕРЕПАЩУК*

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук *В. Т. ДОЛГОПОЛОВ*, член-корр. РАН *В. В. ЛЕБЕДЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *В. С. ПОПОВ*

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*