

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 162, ВЫПУСК 5 (11)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

НОЯБРЬ 2022

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Термоиндуцированные штарковские сдвиги высоковозбужденных состояний атома водорода	615
.....Залялютдинов Т. А., Аникин А. А., Соловьев Д. А.	
Фундаментальные основы зависимости энергии ионизации углеводородов от их размера	623
.....Бакулин И. К., Орехов М. А.	
Новый взгляд на «нутацию» спинов	630
.....Салихов К. М.	
Оптическая бистабильность и нарушение симметрии при резонансном рассеянии света на конечном фотонном кристалле с нелинейной резонансной полостью Шадрина Г. В., Булгаков Е. Н.	646
Квантовое рассеяние связанной пары на третьей частице в одномерном случае	657
.....Будылин А. М., Левин С. Б.	

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

О массовой функции на внутреннем горизонте регулярной черной дыры	Иофа М.З.	663
Gravitational Field Effects Produced by Topologically Non-trivial Geometry and Rotating Frames Subject to a Coulomb-Type Scalar Potential	Ahmed F.	673
Dimensionless physics: Continuation	Volovik G. E.	680

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Формирование дендритов Pt/Cu на ступенях поверхности Cu(111)	Докукин С. А., Колесников С. В., Салецкий А. М.	686
--	---	-----

© Российская академия наук, 2022

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

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

Взаимодействие солитонов с границей ферромагнитной пластины	Киселев В.В., Расковалов А.А.	693
Влияние диполь-дипольного взаимодействия на время перемагничивания атомных цепочек конечной длины	Колесников С. В., Сапронова Е. С.	708
Структурный и магнитные фазовые переходы в мультиферроике $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ по данным мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции	Фролов К. В., Алексеева О. А., Любутин И. С., Ксенофонтов В., Смирнова Е. С., Темеров В. Л., Гудим И. А., Любутина М. В.	718
Электронная структура ОЦК-лития в условиях внешнего воздействия	Попов В. А., Попов А. В.	730
Асимптотическая теория классического переноса примеси в неоднородных средах. Принцип Ферма	Кондратенко П. С., Мухаряпова А. В.	737
Пространственное распределение вакансий, образованных каскадом выбитых атомов в твердом теле	Метелкин Е. В., Лебедева М. В.	743
Граничные условия, распределение фаз и скрытая симметрия в одномерной локализации	Суслов И. М.	750
Структурные переходы в фрустрированных кобальтатах $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ при разбавлении Co -подсистемы	Казей З. А., Снегирев В. В., Столяренко М. С., Редчиц П. Е.	767

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

Многоквантовая ЯМР-спектроскопия и управление распространением квантовой информации в спиновых системах твердых тел	Зобов В. Е., Лундин А. А.	778
Проводимость неидеальной плазмы инертных газов и кулоновский логарифм	Хомкин А. Л., Шумихин А. С.	790
Динамика взаимодействия двух облаков солитонных газов	Камчатнов А. М., Шайкин Д. В.	796

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ШТАРКОВСКИЕ СДВИГИ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Т. А. Заллялютдинов^{a,b*}, А. А. Анижин^a, Д. А. Соловьев^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

^b Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт»
188300, Гатчина, Ленинградская область, Россия

Поступила в редакцию 26 апреля 2022 г.,
после переработки 3 июня 2022 г.
Принята к публикации 3 июня 2022 г.

Исследуются термоиндуцированные штарковские сдвиги и уширение линий высоковозбужденных уровней атомарного водорода. Проведены численные расчеты для ns/nd -состояний (n — главное квантовое число) с целью использования результатов в текущих и планируемых прецизионных измерениях частот переходов в атоме водорода. Результаты приведены для криогенной температуры и широкого диапазона значений, охватывающих комнатную температуру. Установлено, что для состояний с главным квантовым числом $n \geq 8$ аккуратные численные расчеты теплового эффекта Штарка с учетом лэмбовского сдвига и тонкой структуры выявляют значительное отклонение от значений, полученных ранее в рамках приближенных методов. Представленные результаты могут быть использованы для анализа данных современных прецизионных экспериментов и уточнения фундаментальных констант, в частности постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона.

DOI: 10.31857/S0044451022110013
EDN: KXYGSW

1. ВВЕДЕНИЕ

Высоково́збужденные состояния в простых атомных системах представляют фундаментальный интерес для прецизионных тестов квантовой электродинамики, поиска ограничений на “новую” физику, создания стандартов частоты и астрофизических исследований [1]. В то же время они имеют и перспективы прикладного применения при создании элементов логики квантовых компьютеров, в частности квантовых вентилях [2, 3]. Высоково́збужденные атомы, в свою очередь, чрезвычайно чувствительны к внешним полям, в том числе и к полю равновесного теплового излучения, что делает исследование его влияния на уровни энергий и времена жизни состояний чрезвычайно важным. Преследуя цель повышения точности определения стандартов частоты и времени, в прецизионных экспери-

ментах на нейтральных атомах в оптических решетках необходимо потребовать стабилизации внешних условий и, в частности, контроля тепловых эффектов. Таким образом, детальное теоретическое описание количественных характеристик термоиндуцированных сдвигов и уширения спектральных линий остается актуальным и в настоящее время [4–11].

В рамках квантовой механики (КМ) сдвиги энергии и вероятности излучения, индуцированные равновесным тепловым излучением (излучением абсолютно черного тела), возникают во втором порядке теории возмущений. Недавно в работе [12] было показано, что в рамках релятивистской квантовой электродинамики (КЭД) при конечной температуре квантовомеханические результаты возникают из радиационной поправки на собственную энергию связанного электрона в нерелятивистском пределе путем замены фотонного пропагатора на соответствующую тепловую функцию Грина. В частности, тепловой штарковский сдвиг представлен действительной частью термальной собственно-энергетической поправки, в то время как мнимая часть соответству-

* E-mail: t.zalialutdinov@spbu.com

ет уширению линии за счет переходов индуцированных равновесным тепловым излучением. Следует отметить, что КЭД-подход имеет очевидное преимущество по сравнению с КМ-теорией. Если действовать в полной аналогии с “обычной” квантовой электродинамикой для нулевых температур, становится возможным изучать тепловые радиационные эффекты, относящиеся к различным диаграммам Фейнмана. Так, в работах [13–17] в рамках метода контура линии и адиабатической S -матрицы [18–22] были рассчитаны однопетлевые термальные поправки к вероятностям переходов, сечениям рекомбинации, сдвигам энергий в одно- и двухэлектронных системах.

В данной работе представлены аккуратные теоретические расчеты теплового штарковского сдвига и уширения линий для ns/nd -состояний атомарного водорода для криогенной температуры и диапазона температур, охватывающего лабораторные (комнатные) условия. Такой выбор обусловлен следующими факторами. Во-первых, с целью уменьшения влияния внешних условий на измерения используются криогенные температуры. Во-вторых, поскольку излучение абсолютно черного тела является микроволновым и, как следствие, плохо экранируемым, уменьшение влияния комнатных температур требует использования специального оборудования [23]. Более того, весьма затруднительно с экспериментальной точки зрения охладить до криогенных температур область, где проводятся измерения. Наконец, теоретические расчеты для различных температур позволяют выявить характерное поведение исследуемых величин, допускающее последующую численную экстраполяцию на требуемые температуры.

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 в рамках релятивистской квантовой электродинамики при конечных температурах приводится краткий вывод однопетлевых тепловых поправок к связанным состояниям в одноэлектронных системах. Численные результаты термоиндуцированных сдвигов и уширений линий обсуждаются в разд. 3. В тексте используются релятивистские единицы (р.е.) ($\hbar = c = m = 1$, где m — масса электрона).

2. КЭД-ОПИСАНИЕ ТЕПЛОВЫХ СДВИГОВ И УШИРЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

В работе [12] в рамках КЭД-теории была рассмотрена температурно-зависимая однопетлевая

собственно-энергетическая (СЭ) поправка к связанному состоянию атомного электрона. Согласно этому подходу штарковский сдвиг возникает в качестве вещественной части СЭ-поправки, а соответствующая мнимая часть представляет скорость депопуляции, индуцированную чернотельным излучением (ЧИ), для данного атомного состояния.

В КЭД-теории радиационная однопетлевая СЭ-поправка для атомного электрона дается графиком Фейнмана на рис. 1.

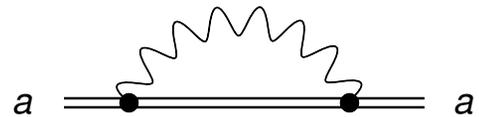


Рис. 1. Однопетлевая тепловая собственно-энергетическая поправка для энергии атомного электрона в состоянии a . Двойная сплошная линия обозначает электронные состояния и электронный пропагатор во внешнем потенциале ядра (картина Фарри). Волнистая линия обозначает фотон “тепловой бани”

В формализме S -матрицы можно записать [24]

$$S_{fi} = e^2 \int dx_1^4 dx_2^4 \times \times \bar{\psi}_f(x_1) \gamma^{\mu_1} S(x_1, x_2) \gamma^{\mu_2} \psi_i(x_2) D_{\mu_1 \mu_2}(x_1, x_2), \quad (1)$$

где интегрирование выполняется по пространственно-временным четырехвекторам $x_1, x_2, x \equiv (t, \mathbf{r})$, \mathbf{r} — пространственный вектор и t — время. Матрицы Дирака обозначаются как γ_{μ_i} , где индекс μ_i принимает значения $\mu_i = (0, 1, 2, 3)$, $\psi(x) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt}$ — дираковская волновая функция электрона (E — энергия соответствующего уровня), $\bar{\psi}$ — дираковски-сопряженная волновая функция. Индексы f и i обозначают конечные и начальные состояния, а $S(x_1, x_2)$ и $D_{\mu_1 \mu_2}(x_1, x_2)$ — соответственно электронный и фотонный пропагаторы.

Стандартный (при нулевой температуре) электронный пропагатор, определяемый как вакуумное среднее от Т-хронологического произведения операторов электрон-позитронного поля, может быть представлен в виде разложения [24]:

$$S(x_1 x_2) = -i \langle 0 | T [\psi(x_1) \bar{\psi}(x_2)] | 0 \rangle = = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t_1-t_2)} \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}_1) \bar{\psi}(\mathbf{r}_2)}{\omega - E_n(1-i0)}. \quad (2)$$

Суммирование в (2) ведется по всему дираковскому спектру энергий. В фейнмановской калибров-

Таблица 1. Тепловые штарковские сдвиги для ns -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в Гц для разных температур с учетом лэмбовского сдвига и тонкой структуры в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	2s	3s	4s	6s	8s	12s	20s
$T = 77$	$-4.94 \cdot 10^{-3}$	$-3.80 \cdot 10^{-2}$	-0.19	2.11	14.32	15.77	108.44
$T = 290$	-0.91	-7.67	-43.79	-262.68	338.72	1258.29	2004.9
$T = 300$	-1.04	-8.79	-50.80	-273.48	398.08	1520.74	2149.64
	-1.077	-9.103	-51.19	-274.7	390.08	1533	-
$T = 310$	-1.19	-10.05	-58.68	-282.11	462.22	1651.15	2299.27
$T = 320$	-1.35	-11.43	-67.51	-288.38	530.58	1782.03	2453.78
$T = 330$	-1.53	-12.95	-77.36	-292.09	604.55	1918.2	2613.16

Таблица 2. Тепловые штарковские сдвиги для nd -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в Гц для разных температур с учетом Лэмбовского сдвига и тонкой структуры в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	3d	4d	6d	8d	12d	20d
$T = 77$	$-6.80 \cdot 10^{-2}$	-0.28	2.66	16.54	18.02	110.75
$T = 290$	-14.25	-67.50	-310.06	434.02	1507.09	2032.34
$T = 300$	-16.35	-78.39	-318.86	505.91	1638.03	2178.59
	-16.60	-79.36	-323.0	490.3	1620	-
$T = 310$	-18.69	90.64	-324.39	583.10	1774.35	2329.74
$T = 320$	-21.27	104.39	-326.38	665.62	1916.14	2485.78
$T = 330$	-24.11	119.74	-324.62	753.54	2063.33	2646.72

ке стандартный фотонный пропагатор (при нулевой температуре) определяется как вакуумное среднее от T -хронологического произведения операторов электромагнитного поля и может быть представлен в следующем виде [24]:

$$D_{\mu_1\mu_2}(x_1, x_2) = -i\langle 0 | T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] | 0 \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega I_{\mu_1\mu_2}(|\Omega|, r_{12}) e^{-i\Omega r_{12}}, \quad (3)$$

$$I_{\mu_1\mu_2}(\Omega, r_{12}) = \frac{g_{\mu_1\mu_2}}{r_{12}} e^{i\Omega r_{12}}, \quad (4)$$

где $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ и $g_{\mu_1\mu_2}$ — метрический тензор (в дальнейшем используется псевдоевклидова метрика).

Поправка к уровню энергии атомного электрона a , возникающая из выражения (1), может быть представлена в виде вещественной и мнимой частей [24, 25]:

$$\Delta E_a = L^{SE} - \frac{i}{2} \Gamma_a. \quad (5)$$

Здесь L^{SE} обозначает низший порядок вклада собственной энергии электрона в лэмбовский сдвиг, а Γ_a определяет ширину уровня a . Другая радиационная поправка низшего порядка, также приводящая к сдвигу энергии, представляет собой поляризацию вакуума. Однако она не дает вклада в ширину уровня Γ_a и не важна для наших целей.

В дальнейшем мы рассмотрим влияние ЧИ на атом, когда связанные электроны подвержены воздействию “тепловой бани” (окружающей среды) при устойчивом тепловом равновесии. Теоретическое описание эффектов удобно проводить в рамках квантовой теории поля при конечных температурах. В соответствии с этой теорией (см., например, [26, 27]), вакуумное среднее бозе- и ферми-операторов заменяется на усреднение по каноническому ансамблю. В случае низких температур оказывается достаточным рассмотреть только бозонную часть (фермионная экспоненциально подавлена). Тогда фотонный пропагатор $D_{\mu_1\mu_2}$ может быть

определен следующим образом:

$$\begin{aligned} iD_{\mu_1\mu_2}(x_1, x_2) &= \langle T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \rangle_\beta = \\ &= \text{Tr} (\rho \{ T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \}) = \\ &= iD_{\mu_1\mu_2}^0(x_1, x_2) + iD_{\mu_1\mu_2}^\beta(x_1, x_2), \end{aligned} \quad (6)$$

где ρ обозначает (в нулевом приближении) статистический оператор для невзаимодействующих фотонов, электронов и позитронов. След, обозначенный как Tr , в выражении (6) пробегает все (много-частичные) фоковские состояния. Согласно теореме Вика, Т-хронологическое произведение операторов электромагнитного поля может быть представлено в виде суммы свертки (вакуумное среднее Т-произведения) и нормально упорядоченного произведения ($: \dots :$) [24]:

$$\begin{aligned} \langle T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \rangle_\beta &= \\ &= \langle 0 | T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] | 0 \rangle + \\ &\quad + \langle : A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2) : \rangle_\beta. \end{aligned} \quad (7)$$

Таким образом, фотонный пропагатор при конечных температурах возникает как сумма части с нулевой температурой $D_{\mu_1\mu_2}^0$ и зависящей от температуры части $D_{\mu_1\mu_2}^\beta$, включающей планковское распределение фотонов “тепловой бани” $n_\beta(\omega)$ [27], детальный вывод выражения (6) см. также в [13].

В рамках КЭД при конечных температурах газ свободных электронов (без внешнего поля) взаимодействует с фотонным газом. Обычно он рассматривается как находящийся в тепловом равновесии и определяется большим каноническим статистическим оператором, который модифицирует как электронный, так и фотонный пропагаторы. Поскольку наша задача состоит в описании влияния ЧИ на атомные уровни, где электроны являются сильно связанными кулоновским полем ядра, мы сохраняем стандартный электронный пропагатор Фейнмана, а соответствующая термальная поправка возникает из тепловой части фотонного пропагатора. Согласно [12], полная форма фотонного пропагатора (включая тепловую часть) в координатном пространстве может быть получена в виде

$$\begin{aligned} D_{\mu\nu}(x_1, x_2) &= \frac{g_{\mu\nu}}{2\pi i r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega|r_{12}-i\omega(t_1-t_2)} - \\ &\quad - \frac{g_{\mu\nu}}{\pi r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_\beta(|\omega|) \sin(|\omega|r_{12}) e^{-i\omega(t_1-t_2)}, \end{aligned} \quad (8)$$

где первый член дает фотонный пропагатор в фейнмановской калибровке при нулевой температуре, а

второй соответствует тепловому полю фотонов. Отметим, что второе слагаемое в (8) не имеет ультрафиолетовой расходимости, так как функция $n_\beta(\omega)$ обеспечивает естественное обрезание при $\omega \rightarrow \infty$.

Подстановка выражения (8) в (1) и вычисление вещественной части ΔE_a приводят к обычной СЭ-части лэмбовского сдвига и штарковского сдвига, индуцированного ЧИ. Температурно-зависимая однопетлевая СЭ-поправка дается выражением [12]

$$\Delta E_a = \frac{e^2}{\pi} \sum_n \left(\frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} I_{na}^\beta(r_{12}) \right)_{anna}, \quad (9)$$

где введено обозначение

$$I_{na}^\beta(r_{12}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_\beta(|\omega|) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{E_n(1-i0) - E_a + \omega} \quad (10)$$

и $\alpha_{1(2)}$ являются альфа-матрицами Дирака. Суммирование по n по-прежнему включает весь дираковский спектр энергий. Для легких атомных систем, таких как водород, удобно перейти к нерелятивистскому пределу в выражении (9). Тогда соответствующий сдвиг энергии в низшем порядке по α (постоянная тонкой структуры) равен

$$\begin{aligned} \Delta E_a &= \frac{2e^2}{3\pi} \sum_n \int_0^\infty d\omega n_\beta(\omega) \omega^3 |\langle a|\mathbf{r}|n \rangle|^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{E_n(1-i0) - E_a + \omega} + \frac{1}{E_n(1-i0) - E_a - \omega} \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь суммирование проводится уже по состояниям дискретного и сплошного спектров решения уравнения Шредингера, четность которых противоположна четности состояния a (согласно правилам отбора для дипольного матричного элемента $\langle a|\mathbf{r}|n \rangle$).

Интегрирование по частоте ω может быть проведено по формуле Сохоцкого:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \text{P.V.} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (12)$$

где обозначение P.V. подразумевает вычисление интеграла в смысле главного значения. Тогда зависящая от температуры вещественная часть выражения (11) определяет тепловой сдвиг

$$\begin{aligned} \Delta E_a^{\text{Stark}} &= \frac{2e^2}{3\pi} \sum_n \text{P.V.} \int_0^\infty d\omega n_\beta(\omega) \omega^3 |\langle a|\mathbf{r}|n \rangle|^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{E_n - E_a + \omega} + \frac{1}{E_n - E_a - \omega} \right], \end{aligned} \quad (13)$$

Таблица 3. Уширение линии для ns -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в с^{-1} для разных температур в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	$2s$	$3s$	$4s$	$6s$	$8s$	$12s$	$20s$
$T = 77$	$3.59 \cdot 10^{-6}$	$2.11 \cdot 10^{-6}$	$1.85 \cdot 10^{-6}$	$8.04 \cdot 10^{-2}$	88.15	$2.15 \cdot 10^3$	$3.65 \cdot 10^3$
$T = 290$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$3.97 \cdot 10^{-5}$	10.60	$6.07 \cdot 10^3$	$2.33 \cdot 10^4$	$3.38 \cdot 10^4$	$2.29 \cdot 10^4$
$T = 300$	$1.44 \cdot 10^{-5}$	$8.20 \cdot 10^{-5}$	15.95	$7.03 \cdot 10^3$	$2.54 \cdot 10^4$	$3.56 \cdot 10^4$	$2.38 \cdot 10^4$
	$1.42 \cdot 10^{-5}$	$7.97 \cdot 10^{-5}$	16.02	$7.04 \cdot 10^3$	$2.54 \cdot 10^4$	$3.59 \cdot 10^4$	-
$T = 310$	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$1.74 \cdot 10^{-4}$	23.37	$8.08 \cdot 10^3$	$2.75 \cdot 10^4$	$3.76 \cdot 10^4$	$2.48 \cdot 10^4$
$T = 320$	$1.54 \cdot 10^{-5}$	$3.64 \cdot 10^{-4}$	33.44	$9.20 \cdot 10^3$	$2.98 \cdot 10^4$	$3.96 \cdot 10^4$	$2.58 \cdot 10^4$
$T = 330$	$1.59 \cdot 10^{-5}$	$7.42 \cdot 10^{-4}$	46.82	$1.04 \cdot 10^4$	$3.21 \cdot 10^4$	$4.15 \cdot 10^4$	$2.68 \cdot 10^4$

Таблица 4. Уширение линии для nd -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в с^{-1} для разных температур в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	$3d$	$4d$	$6d$	$8d$	$12d$	$20d$
$T = 77$	$1.34 \cdot 10^{-5}$	$3.29 \cdot 10^{-5}$	0.11	$1.07 \cdot 10^2$	$2.40 \cdot 10^3$	$3.82 \cdot 10^3$
$T = 290$	$8.85 \cdot 10^{-4}$	17.88	$8.29 \cdot 10^3$	$2.90 \cdot 10^4$	$3.83 \cdot 10^4$	$2.42 \cdot 10^4$
$T = 300$	$1.03 \cdot 10^{-3}$	26.90	$9.61 \cdot 10^3$	$3.19 \cdot 10^4$	$4.04 \cdot 10^4$	$2.52 \cdot 10^4$
	$3.5 \cdot 10^{-4}$	27.02	$9.62 \cdot 10^3$	$3.16 \cdot 10^4$	$4.04 \cdot 10^4$	-
$T = 310$	$1.28 \cdot 10^{-3}$	39.42	$1.11 \cdot 10^4$	$3.43 \cdot 10^4$	$4.27 \cdot 10^4$	$2.62 \cdot 10^4$
$T = 320$	$1.75 \cdot 10^{-3}$	56.41	$1.26 \cdot 10^4$	$3.71 \cdot 10^4$	$4.49 \cdot 10^4$	$2.73 \cdot 10^4$
$T = 330$	$2.61 \cdot 10^{-3}$	78.98	$1.43 \cdot 10^4$	$4.00 \cdot 10^4$	$4.72 \cdot 10^4$	$2.83 \cdot 10^4$

совпадающий с КМ-результатом [28] для теплового сдвига Штарка. Соответствующая удвоенная мнимая приводит к выражению для термоиндуцированной ширины уровня, см. [12, 28]:

$$\Gamma_a^{BBR} = \frac{4e^2}{3} \sum_n \omega_{na}^3 |\langle a|\mathbf{r}|n\rangle|^2 n_\beta(\omega_{na}), \quad (14)$$

где $\omega_{na} = |E_n - E_a|$.

В выражениях (9), (11), (12) энергии в знаменателях не учитывают КЭД-поправок, так как являются собственными значениями гамильтониана для электрона в кулоновском поле ядра. Учет КЭД-эффектов, в частности лэмбовского сдвига, может быть проведен феноменологически, т.е. добавлением соответствующих сдвигов в энергетических знаменателях, как это было сделано в [29]. В работе [12] было показано, что тот же результат можно получить в рамках строгой квантовоэлектродинамической процедуры, которая заключается в суммировании бесконечного ряда однопетлевых собственно-энергетических фейнмановских диаграмм со всевозможными последовательными вставками фотонных и поляризационных петель (петля за петлей)

во внутренние и внешние электронные линии. Возникающая в результате геометрическая прогрессия приводит к возникновению соответствующих сдвигов энергий в энергетическом знаменателе выражения (13) [21].

3. РАСЧЕТ СДВИГОВ И УШИРЕНИЙ ДЛЯ ns/nd -СОСТОЯНИЙ

Согласно результатам (13) и (14) равновесное тепловое излучение вызывает сдвиги энергетических уровней и переходы между различными уровнями ($a \rightarrow n$). В рамках КМ-подхода эти эффекты изучались подробно в [28, 30] для температуры $T = 300$ К. Позже в работе [29] аналогичные расчеты, но с учетом лэмбовского сдвига, проводились и для легких водородоподобных ионов. Строгий КЭД-подход к выводу тепловых поправок для связанных одноэлектронных систем с учетом радиационных поправок был представлен в работах [12, 13]. Стоит отметить, что в реальных лабораторных условиях температура может значительно варьироваться. Это прежде всего связано с трудностью контро-

Таблица 5. Значения уширений и штарковских сдвигов, полученные в [32] и в данной работе. Все значения приведены для температуры $T = 330$ К. Абсолютные значения относительной разницы для уширений $\delta\Gamma$ и сдвигов δE приведены в процентах

Переход	Сдвиг, Гц	Сдвиг [32], Гц	δE , %	Уширение, кГц	Уширение [32], кГц	$\delta\Gamma$, %
$2s - 6s$	-290.566(13)	-360(90)	19.3	1.66	1.2(0.1)	38.3
$2s - 6d$	-323.1(1)	-430(105)	24.6	2.3	1.7(0.2)	35.3
$2s - 8s$	606.1(0.4)	520(130)	16.6	5.1	4.4(0.4)	15.9
$2s - 8d$	755.071(19)	650(160)	16.2	6.4	5.5(0.5)	18.2
$2s - 12d$	2064.9(3.1)	2100(500)	1.7	7.5	7.1(0.7)	5.6

ля нагрева отдельных элементов в конкретной экспериментальной установке. Так, в работах [31, 32] по измерению частот переходов $2s - ns/nd$ магнитный экран, окружающий атомный пучок, нагревается примерно до 330 К. Ввиду отсутствия в литературе значений штарковских сдвигов для этой температуры авторы [31, 32] предположили, что уширение линии ведет себя линейно по температуре, а сдвиги ведут себя как $T^{2.7}$. Такая экстраполяция следует непосредственно из выражений (13) и (14) соответственно.

В табл. 1, 2 представлены результаты численных расчетов тепловых штарковских сдвигов для широкого диапазона температур, включая криогенную $T = 77$ для ns/nd -состояний. Соответствующие уширения линий (мнимая часть однопетлевой тепловой собственной энергии) также представлены в табл. 3, 4. Вычисления для тепловых штарковских сдвигов проводились по формуле (13) с суммированием по состояниям как дискретного, так и сплошного спектров. Матричные элементы переходов вычислялись аналитически с использованием известных решений уравнений Шредингера для электрона в кулоновском поле точечного ядра [33] (см. также [34]), что позволяет провести прямое суммирование по спектру промежуточных состояний в выражении (13). Следует также отметить, что расчет выражения (13) также может быть проведен с помощью нерелятивистской кулоновской функции Грина [35], метода В-сплайнов [36], гипервириальных соотношений [37] и с использованием динамических групп симметрии для атома водорода [38].

Численные значения для лэмбовского сдвига ns/nd -состояний брались из работы [39]. Важно отметить, что непосредственный учет состояний непрерывного спектра сказывается на величине сдвига на уровне одного процента, что находится в полном согласии с выводами работы [28], где он не учитывался. Учет лэмбовского сдвига и тонкого

расщепления приводит к изменениям того же порядка. Результаты расчетов показывают, что для температуры $T = 330$ К относительная разница для тепловых штарковских сдвигов между значениями из табл. 1, 2 и полученными в работе [32] достигает 19% и уменьшается с ростом главного квантового числа. Последнее говорит о том, что использованная в [32] экстраполяция верна лишь для сильно возбужденных состояний. Результаты сравнения полученных значений сдвигов и уширений для различных переходов $2s - ns/nd$ при $T = 330$ К со значениями из работы [32] представлены в табл. 5. Указанные в табл. 5 погрешности рассчитанных значений относятся только к точности численного интегрирования по частоте ω в выражении (13).

Важно отметить, что тепловые эффекты также учитывались в недавней работе по измерению частоты перехода $2s_{1/2} - 8d_{5/2}$ в атоме водорода [40]. Так, в [40] термоиндуцированный сдвиг измеряемой линии полагался равным $-0.49(16)$ кГц, что соответствует температуре 300 К. При этом, учитывая невозможность точно контролировать температурные параметры в эксперименте, авторы использовали значение погрешности из работы [32], рассчитанной при значении $T = 330$ К. Таким образом, непосредственный численный расчет, проведенный в нашей работе, значительно уточняет значения термоиндуцированных сдвигов энергий для высоковозбужденных состояний, что, в свою очередь, должно уменьшить погрешность определения частот в экспериментах типа [31, 32], необходимых для определения фундаментальных констант, в частности, постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке грантов Президента Российской Федерации (грант № МК-4796.2022.1.2) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00111).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Gnedin, A. Mihajlov, L. Ignjatović, N. Sakan, V. Srećković, M. Zakharov, N. Bezuglov, and A. Klycharev, *New Astron. Rev.* **53**, 259 (2009).
2. H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletic, and M. Lukin, *Nature* **551**, 11 (2017).
3. B. Zelener, B. Zelener, and E. Zelener, *Energy* **2** (2018).
4. M. G. Kozlov, M. S. Safronova, J. R. Crespo López-Urrutia, and P. O. Schmidt, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 045005 (2018).
5. T. L. Nicholson, S. L. Campbell, R. B. H. G. E. Marti, B. J. Bloom, R. L. McNally, W. Zhang, M. D. Barrett, M. S. Safronova, G. F. Strouse, W. L. Tew, and J. Ye, *Nature Commun.* **6**, 263004 (2015).
6. M. S. Safronova, D. Jiang, B. Arora, C. W. Clark, M. G. Kozlov, U. I. Safronova, and W. R. Johnson, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **57**, 94 (2010).
7. M. S. Safronova and et al., *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **57**, 94 (2010).
8. M. S. Safronova, M. G. Kozlov, and C. W. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 143006 (2011).
9. W. M. Itano, L. L. Lewis, and D. J. Wineland, *Phys. Rev. A* **25**, 1233 (1982).
10. T. Middelmann, C. Lisdat, S. Falke, J. S. R. V. Winfred, F. Riehle, and U. Sterr, *Instrum. Measur. IEEE Trans.* **60**, 2550 (2011).
11. S. G. Porsev and A. Derevianko, *Phys. Rev. A* **74**, 020502(R) (2006).
12. D. Solovyev, L. Labzowsky, and G. Plunien, *Phys. Rev. A* **92**, 022508 (2015).
13. D. Solovyev, *Ann. Phys.* **415**, 168128 (2020).
14. D. Solovyev, T. Zalialutdinov, A. Anikin, J. Triaskin, and L. Labzowsky, *Phys. Rev. A* **100**, 012506 (2019).
15. D. Solovyev, T. Zalialutdinov, and A. Anikin, *Phys. Rev. A* **101**, 052501 (2020).
16. T. Zalialutdinov, D. Solovyev, and L. Labzowsky, *Phys. Rev. A* **101**, 052503 (2020).
17. T. Zalialutdinov, A. Anikin, and D. Solovyev, *Phys. Rev. A* **102**, 032204 (2020).
18. M. Gell-Mann and F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
19. F. Low, *Phys. Rev.* **88**, 53 (1952).
20. J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957).
21. O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and D. A. Solovyev, *Phys. Rep.* **455**, 135 (2008).
22. T. A. Zalialutdinov, D. A. Solovyev, L. N. Labzowsky, and G. Plunien, *Phys. Rep.* **737**, 1 (2018).
23. K. Beloy et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 260801 (2014).
24. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics*, Wiley-Interscience, New York (1965).
25. L. Labzowsky, G. Klimchitskaya, and Y. Dmitriev, *Relativistic Effects in Spectra of Atomic Systems*, Institute of Phys. Publ., Bristol, Philadelphia (1993).
26. J. F. Donoghue, B. R. Holstein, and R. W. Robinett, *Ann. Phys.* **164**, 233 (1985).
27. J. F. Donoghue and B. R. Holstein, *Phys. Rev. D* **28**, 340 (1983).
28. J. W. Farley and W. H. Wing, *Phys. Rev. A* **23**, 2397 (1981).
29. U. D. Jentschura and M. Haas, *Phys. Rev. A* **78**, 042504 (2008).
30. T. F. Gallagher and W. E. Cooke, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 835 (1979).
31. C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, O. Acaf, J.-J. Zondy, and A. Clairon, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4960 (1999).
32. B. Beauvoir, C. Schwob, O. Acaf, L. Jozefowski, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, A. Clairon, and F. Biraben, *Europ. Phys. J. D* **12**, 61 (2000).
33. W. Gordon, *Ann. Physik* **394**, 1031 (1929).
34. J. Chluba and R. A. Sunyaev, *Astron. Astrophys.* **512**, A53 (2010).

- 35. N. Manakov, A. Maquet, S. Marmo, and C. Szymanowski, *Phys. Lett. A* **237**, 234 (1998).
- 36. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 130405 (2004).
- 37. C. Lai, *Phys. Lett. A* **83**, 322 (1981).
- 38. S. P. Alliluev and I. A. Malkin, *Sov. Phys. JETP* **39**, 627 (1974).
- 39. A. Czarnecki, U. D. Jentschura, and K. Pachucki, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 180404 (2005).
- 40. A. D. Brandt, S. F. Cooper, C. Rasor, Z. Burkley, A. Matveev, and D. C. Yost, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 023001 (2022).

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ ОТ ИХ РАЗМЕРА

И. К. Бакулин ^{a,b}, М. А. Орехов ^{b,c*}

^a Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

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

^c Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
109028, Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 мая 2022 г.,
после переработки 13 мая 2022 г.
Принята к публикации 13 июня 2022 г.

Известно, что энергия ионизации молекул существенно зависит от их размера и числа атомов. Данная зависимость обычно описывается эмпирическими соотношениями. Проведен вывод аналитической формулы для описания зависимости энергии ионизации углеводородной молекулы от ее размера и химического состава. Предлагаемая модель основана на рассмотрении энергии молекулы в виде функционала от заряда атомов. Эта модель является уточненным вариантом существующих эмпирических зависимостей и отличается от них наличием физического смысла и более высокой точностью. Показано, что полученная формула позволяет описать экспериментальные данные на выборке из 667 молекул с погрешностью 0.5 эВ при общем диапазоне энергий от 7 до 12 эВ.

DOI: 10.31857/S0044451022110025
EDN: KYBBQR

1. ВВЕДЕНИЕ

Энергия ионизации является фундаментальным свойством молекул. Она оказывает определяющее влияние на химическую и фотоэлектронную активности молекулы. Ионизационные свойства органических молекул важны для систем электрохимического хранения энергии [1], таких как литий-ионные аккумуляторы и проточные редокс-батареи [2], и для трансформаторных систем [3]. Кроме того, ионизация важна для биотехнологии, генерации водорода, для модификации поверхности различных материалов [4].

Теоретические методы, используемые для описания энергий ионизации, можно условно разделить на высокоточные и упрощенные эмпирические модели. К высокоточным и вычислительно сложным относятся *ab initio* методы, такие как теория функ-

ционала электронной плотности [5] и теория возмущений MP2 [6]. Характерная точность этих методов составляет 0.2–0.3 эВ [5]. Для описания энергий ионизации используются методы машинного обучения [7–9]. Важной проблемой является необходимость больших выборок данных, которые обычно создаются на основе *ab initio* расчетов. Ошибка методов машинного обучения складывается из погрешности самого метода (0.2 эВ) [10, 11] и погрешности данных (0.3 эВ) [5] и, следовательно, может составлять до 0.4 эВ.

Возможно использование упрощенных эмпирических моделей. В отличие от методов машинного обучения, они содержат малое количество коэффициентов. С другой стороны, их точность обычно ограничена определенным классом молекул, для которых эти коэффициенты подобраны. Эмпирические модели энергии ионизации в основном рассматривают различные функции от размера молекулы. В частности, используется длина цепи в определенной группе молекул [3], суммарное число атомов в молекуле [12] или число атомов углерода [13]. Все эти модели дают зависимости вида $1/N$, где N —

* E-mail: mo2411@mail.ru

число атомов молекулы.

Для получения простых, имеющих физическое обоснование моделей можно использовать упрощенную версию теории функционала электронной плотности [14–17]. Этот подход предполагает существенное упрощение по сравнению с широко распространенной формулировкой Кона – Шэма. Предполагается, что электронная плотность описывается зарядами, которые находятся на атомах и энергию системы можно выразить простыми аналитическими формулами. Данный подход активно применяется для описания распределения заряда у нейтральных молекул [14–17].

В данной работе построена последовательность моделей, основанных на упрощенной форме теории функционала электронной плотности. В рамках этого подхода получены обобщения эмпирически наблюдаемой зависимости вида $1/N_C$, где N_C — число атомов углерода в молекуле. Показано, какая степень детализации модели является необходимой и достаточной для точного описания энергий ионизации. Предложенные модели верифицированы сравнением с экспериментальными данными по энергиям ионизации для 667 молекул из базы данных NIST [18].

В разд. 2 обсуждаются общие закономерности, обнаруженные при анализе экспериментальных данных из базы NIST. В разд. 3 приведены четыре модели ионизации молекул (M1–M4), расположенные по возрастанию сложности. В разд. 4 проводится сравнение предложенных моделей с экспериментом и обсуждение того, какой уровень детализации необходим для точного описания энергий ионизации.

2. АНАЛИЗ ИМЕЮЩИХСЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Из базы данных NIST [18] извлечены экспериментальные данные по энергиям ионизации углеводородов. Из полученных данных исключены радикалы. В результате получена выборка из 667 молекул. Проведено усреднение энергий ионизации для молекул с одинаковым числом атомов. На рис. 1 представлена зависимость средней энергии ионизации от числа атомов в молекуле. Приведенные ошибки соответствуют разбросу данных для разных молекул. Имеются два участка, описываемых зависимостью вида $1/N$. Они соответствуют молекулам с $N < 20$ и $N > 20$. В рамках ограниченного диапазона N возможно применение эмпирического закона

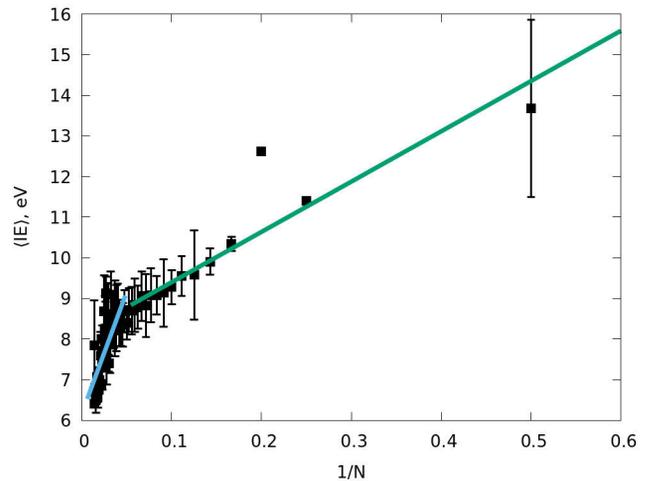


Рис. 1. Зависимость среднего значения экспериментально определенной энергии ионизации углеводородов из базы данных NIST от количества атомов в молекуле. Приведенные ошибки соответствуют разбросу данных для различных молекул с одинаковым количеством атомов N . Прямыми линиями показаны эмпирические аппроксимации вида $a + b/N$ для молекул с $N < 20$ и $N > 20$

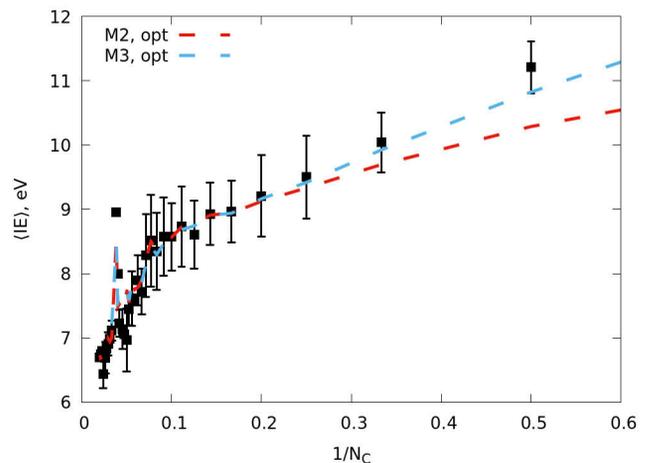


Рис. 2. Усредненные экспериментальные значения энергий ионизации углеводородов в зависимости от величины, обратной числу атомов углерода в молекуле N_C (значки). Штриховыми линиями показаны оценки энергий ионизации моделей M2, M3 с параметрами, подобранными методом минимизации среднеквадратичного отклонения от эксперимента (см. табл. 1)

$1/N$, однако он не может описать энергию ионизации во всем рассматриваемом диапазоне.

Аналогичная ситуация наблюдается и для зависимости средней энергии ионизации от количества атомов углерода в молекуле N_C (рис. 2). Видно, что

разброс точек существенно превышает размер приведенных ошибок. Таким образом, количество атомов углерода является достаточно хорошей величиной для предсказания энергии ионизации. На основе имеющихся данных об энергиях ионизации 667 молекул можно сделать вывод, что максимальная точность предсказания с использованием данных для N_C составляет 0.53 эВ. При использовании данных для N_H и N_C максимальная точность составляет 0.4 эВ. Эти данные получены на основе среднеквадратичного разброса энергий молекул с одинаковым химическим составом, но разной структурой.

3. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛЕЙ

Рассмотрим модели, основанные на функционале электронной плотности. Будем последовательно усложнять модель и анализировать, насколько улучшается точность описания массива экспериментальных данных.

3.1. Модель М1 — молекула с одинаковыми атомами

Зависимость вида $1/N$ может быть получена исходя из предположения, что молекула состоит из атомов, которые обладают абсолютно одинаковыми свойствами. В этом случае избыточный заряд $+1$ распределится равномерно по всем атомам. Заряд каждого атома будет равен $1/N$, где N — число атомов. Раскладывая энергию каждого i -го атома в ряд по заряду, получаем

$$E_i(q_i) = \alpha q_i + \beta q_i^2 = \alpha \frac{1}{N} + \beta \left(\frac{1}{N}\right)^2, \quad (1)$$

где α и β — коэффициенты разложения. Данные коэффициенты называются соответственно электроотрицательность (одно из определений) и химическая твердость. Полная энергия ионизации получается суммированием энергии по всем атомам:

$$IE = \sum_i \alpha q_i + \beta q_i^2 = N\alpha \frac{1}{N} + N\beta \left(\frac{1}{N}\right)^2 = \alpha + \beta \frac{1}{N}. \quad (2)$$

Таким образом, из предположения о равномерном распределении избыточного заряда и при упрощенном разложении энергии в ряд можно получить зависимость вида $1/N$, наблюдаемую экспериментально.

3.2. Модель М2 — равномерное распределение заряда по всем атомам

Следующим по точности будет приближение, предполагающее различные типы атомов в молекуле, которым будут соответствовать различные значения параметров α и β из разложения энергии в ряд (1). В таком случае для энергии ионизации получим оценку

$$IE = \sum_i [\alpha_H q_i + \beta_H q_i^2] + \sum_i [\alpha_C q_i + \beta_C q_i^2] = \\ = \alpha_H \frac{N_H}{N} + \beta_H \frac{N_H}{N^2} + \alpha_C \frac{N_C}{N} + \beta_C \frac{N_C}{N^2}, \quad (3)$$

где N_H — число атомов водорода в молекуле, N_C — число атомов углерода в молекуле, N — полное число атомов в молекуле, $q_i = 1/N$ — заряд атома с номером i . Введем переменную

$$x = \frac{N_H}{N_C}. \quad (4)$$

Эта переменная позволит учесть то, что в рамках одного класса молекул соотношение количества атомов углерода и водорода остается примерно постоянным. Например, у алканов, имеющих химическую формулу $C_{N_C}H_{2N_C+2}$, оно составляет $x_{Alkane} = 2 + 2/N_C$ и при увеличении длины цепи достаточно быстро выходит на постоянное значение 2. Рассматривая общий случай произвольного x и учитывая, что $N = N_H + N_C$ зависимость (3) можно переписать в виде

$$IE = \alpha_H \frac{x}{x+1} + \alpha_C \frac{1}{x+1} + \\ + \frac{1}{N_C} \beta_H \frac{x}{(x+1)^2} + \beta_C \frac{1}{N_C(x+1)^2}. \quad (5)$$

Таким образом, данное приближение позволяет получить обратную зависимость энергии ионизации от N_C . При этом количество параметров модели возрастает до четырех и учитывается влияние соотношения атомов углерода и водорода в молекуле.

3.3. Модель М3 — распределение заряда минимизирующее энергию системы

Наконец можно отказаться от предположения от том, что заряд распределяется равномерно по атомам. При этом можно воспользоваться методов выравнивания электроотрицательности [14, 17]. Идея метода состоит в минимизации полной энергии, представленной уравнением (3). При этом необходимо учесть, что энергия электронейтральной системы в таком приближении не будет нулевой. Это

связанно с тем, что различия в электротрицательности атомов приведут к перераспределению заряда и отрицательному значению полной энергии нейтральной системы. Отсюда следует следующая оценка для энергии ионизации:

$$IE = E(+1) - E(0), \quad (6)$$

где $E(+1)$ и $E(0)$ — энергии ионизированной и нейтральной молекул, которые определяются уравнениями

$$\begin{aligned} E(0) &= \min (N_H[\alpha_N q_H + \beta_N q_H^2] + N_C[\alpha_C q_C + \beta_C q_C^2]), \\ N_H q_H + N_C q_C &= 0, \\ E(+1) &= \min (N_H[\alpha_N q_H + \beta_N q_H^2] + N_C[\alpha_C q_C + \beta_C q_C^2]), \\ N_H q_H + N_C q_C &= 1. \end{aligned} \quad (7)$$

В формуле (7) q_C и q_H — заряды на атомах углерода и водорода. Условия минимизации энергии $N_H q_H + N_C q_C$ соответствуют полному заряду 0 и +1. Данная задача допускает аналитическое решение. В результате получаем оценку заряда атомов водорода:

$$q_H = \frac{2\beta_C \Delta}{N_C(2x\beta_C + 2\beta_H)} + \frac{\alpha_C - \alpha_H}{2x\beta_C + 2\beta_H}, \quad (8)$$

где $\Delta = 0$ для нейтральной системы и $\Delta = 1$ для заряженной системы. Изменение заряда при ионизации составляет

$$\Delta q = \frac{2\beta_C}{N_C(2x\beta_C + 2\beta_H)}. \quad (9)$$

Таким образом, избыточный заряд, получаемый атомами при ионизации молекулы, распределяется пропорционально $1/N_C$. Однако в данной формуле учтена и зависимость от доли атомов водорода (x) в молекуле. Энергия ионизации получается путем подстановки выражения для зарядов в уравнения (6) и (7).

Суммарный заряд, который приходится на атомы водорода, равен

$$\sum \Delta q = \frac{x}{x + \beta_H/\beta_C}. \quad (10)$$

Из формулы (10) видно, что избыточные заряды на атомах зависят только от параметра β и не зависят от параметра α . Например, чтобы получить одинаковые избыточные заряды на всех атомах, составляющие $1/N$, необходимо, чтобы $\beta_H = \beta_C$.

3.4. Модель М4 — учет взаимодействия зарядов на различных атомах

Следующим шагом по увеличению точности модели может быть явный учет взаимодействия заря-

дов на атомах. Это может быть сделано в предположении, что электронная плотность на атомах имеет форму функции Гаусса. Тогда энергия системы будет записана в виде [15]

$$E(q) = \sum [\alpha_N q_i + \beta_N q_i^2] + \sum [\alpha_C q_i + \beta_C q_i^2] + \sum \sum S_{ij}(r) \frac{q_i q_j}{r}, \quad (11)$$

где $S_{ij}(r)$ — коэффициент, описывающий перекрытие гауссовых функций атомов i и j . В данном случае явным образом вводится зависимость не только от количества атомов различных сортов, но и от геометрии молекулы. Чтобы вернуться к упрощенному рассмотрению задачи, можно провести усреднение последнего слагаемого по различным геометриям:

$$\left\langle S_{ij}(r) \frac{q_i q_j}{r} \right\rangle = S_{CC} q_C^2 + S_{CH} q_C q_H + S_{HH} q_H^2. \quad (12)$$

Здесь дополнительно проведено разделение суммы на вклады различных пар элементов. Величины $S_{CC} q_C^2$ и $S_{HH} q_H^2$, являясь квадратичными поправками, могут быть учтены увеличением параметров β_C и β_H . Учет этого эффекта может привести к изменению параметров β_H и β_C . Остается перекрестное произведение зарядов углерода и водорода, $S_{CH} q_C q_H$. Его учет требует введения в модель еще одного параметра γ . При этом данный параметр будет общим для обоих элементов. Будем учитывать только взаимодействие атомов углерода и водорода, имеющих химическую связь. Тогда количество слагаемых в сумме будет равно числу атомов водорода. Каждый атом водорода связан только с одним атомом углерода. Получаем формулу

$$E(q) = E_{M2}(q) + \gamma N_H q_H q_C. \quad (13)$$

Решая задачу минимизации энергии аналогично (6) и (7), получаем

$$q_H = \frac{2\beta_C \Delta}{N_C(2x\beta_C + 2\beta_H)} + \gamma x \frac{\alpha_C - \alpha_H}{2x\beta_C + 2\beta_H + x\gamma}. \quad (14)$$

Сравнивая с предыдущим приближением, видим, что различие заключается в поправке $x\gamma$, находящейся в знаменателе. Изменение суммарного заряда атомов водорода составит

$$\sum \Delta q = \frac{1}{1 + (2\beta_H + x\gamma)/x\beta_C}. \quad (15)$$

4. СРАВНЕНИЕ ПРЕДЛАГАЕМОЙ МОДЕЛИ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Все рассматриваемые модели используют данные только о количестве атомов углерода и водоро-

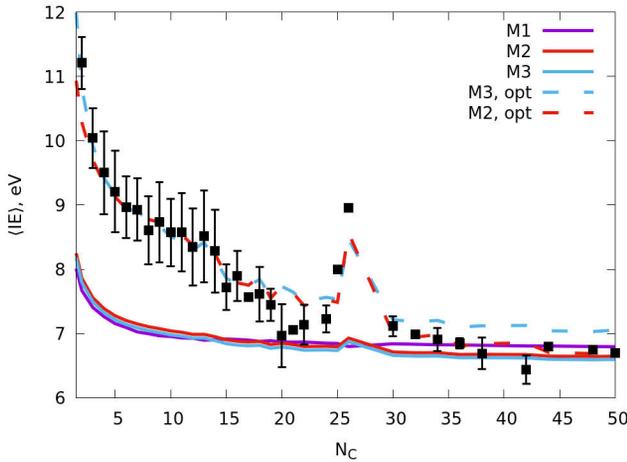


Рис. 3. Усредненные экспериментальные значения энергий ионизации углеводородов, содержащих N_C атомов углерода (значки). Сплошными линиями показаны оценки энергий ионизации моделей M1, M2, M3 с параметрами, основанными на энергиях ионизации атомов (см. табл. 2). Штриховые линии — оценки энергий ионизации моделей M2, M3 с параметрами, подобранными методом минимизации среднеквадратичного отклонения от эксперимента (см. табл. 1)

да. Это накладывает ограничения на максимальную достижимую точность. Согласно анализу экспериментальных данных, погрешность модели не может быть менее 0.4 эВ.

Для сравнения теории и эксперимента использовались два набора параметров моделей. Первый набор был получен исходя из энергий ионизации изолированных атомов водорода и углерода. Коэффициенты модели описываются формулами

$$\alpha = \frac{IE + EA}{2}, \quad (16)$$

$$\beta = \frac{IE - EA}{2},$$

где IE — энергия ионизации атома, EA — энергия сродства к электрону данного атома. Использовались экспериментальные значения энергий ионизации атомов углерода и водорода [19–21]

Второй набор параметров получен минимизацией среднеквадратичного отклонения предсказаний модели от экспериментальных значений энергии. Параметры представлены в табл. 1, 2.

На рис. 3 видно, что все модели позволяют корректно описать энергии ионизации больших молекул. При этом не требуется подгонки параметров

Таблица 1. Параметры моделей M2–M4, полученные оптимизацией среднеквадратичного отклонения от экспериментальных данных. Единицы измерения: α [эВ/е], β [эВ/е²]

	α_H	β_H	α_C	β_C	γ
M2	10.72	4.345	4.699	21.042	-
M3	12.8292	26.8379	6.092	7.283	-
M4	12.38	23.58	6.074	7.36675	0.75

Таблица 2. Параметры моделей M2–M3, полученные исходя из энергий ионизации атомов углерода и водорода, с использованием формул (16). Единицы измерения те же, что и в табл. 1

	α_H	β_H	α_C	β_C
M2/M3	7.1769	6.42	6.26	5

под данные. В моделях M1, M2 предельные значения энергии при больших размерах молекулы зависят только от параметров α . В модели M3 имеется слабая зависимость от параметра β через влияние на распределение заряда. Таким образом, значение электроотрицательности α позволяет описать предельные значения энергий ионизации при $N \rightarrow \infty$.

Дополнительно к корректному описанию ионизации крупных молекул, у моделей M2, M3 наблюдается небольшое увеличение энергии в области $N_C = 26$, которое совпадает с экспериментальной точкой, соответствующей молекуле с большим значением энергии ионизации. Особенностью этой точки является резкое увеличение доли атомов водорода по отношению к атомам углерода. Соседние с данной аномалией точки имеют $x = N_H/N_C \approx 0.7$, а при аномальном увеличении энергии $x = N_H/N_C = 1.8$.

На рис. 2 и 3 видно, что оптимизация параметров позволяет добиться хорошего согласия результатов моделей M2 и M3 с экспериментальными данными во всем диапазоне размеров молекул. Обе модели хорошо воспроизводят увеличение энергии при $N_C = 26$. При этом молекулы с $N_C = 25$ и $N_C = 26$ были специально исключены из выборки, которая использовалась для подгонки параметров. На рис. 2 видно, что модель M3 лучше воспроизводит как результаты для малых молекул, так и наклон зависимости вида $1/N_C$. С другой стороны, модель M2 несколько лучше воспроизводит значения энергии при больших N_C .

Среднеквадратичные погрешности по отношению ко всем 667 энергиям из выборки составили 0.5 эВ для моделей М2, М3, М4. Отклонение данных, полученных согласно модели М4, от результатов модели М3 составило 0.04 эВ. При этом значение параметра γ , отвечающего за поправку модели М4 по отношению к М3, оказалось равно 0.76, что много меньше значений параметров β_{H} и β_{C} (см. табл. 1). Таким образом, дальнейшее увеличение детализации модели не приводит к существенному повышению точности. Модели М2, М3 являются оптимальными для описания энергии ионизации.

5. ВЫВОДЫ

Проведен вывод и верификация аналитических формул, описывающих общие закономерности энергий ионизации органических молекул. Рассмотрена последовательность из четырех моделей нарастающей сложности. На основе сравнения их с экспериментом сделан вывод о степени детализации, которая необходима и достаточна для получения наибольшей точности описания зависимости энергии ионизации от размера и химического состава молекулы.

Показано, что предположение о том, что молекула состоит из абсолютно одинаковых, усредненных атомов, позволяет корректно описать предел энергий ионизации, который достигается при увеличении размера молекулы. Это приближение может быть использовано только для очень больших молекул с числом атомов углерода более 30. Предельное значение энергии ионизации крупных молекул может быть описано исходя из энергий ионизации атомов этой молекулы.

Предположение, что атомы разных сортов различаются, но заряд по молекуле распределяется равномерно, позволяет описать основные особенности зависимости энергии ионизации молекулы от ее состава и числа атомов. Такая модель дает лучшие результаты в случае крупных молекул. С другой стороны, корректный учет перераспределения заряда позволяет лучше описать энергии ионизации малых молекул. Точность данных приближений составляет около 0.5 эВ на выборке из 667 молекул при диапазоне энергий молекул от 6 до 12 эВ. При этом максимальная точность, которую можно получить на основе количества атомов в молекуле, составляет около 0.4 эВ. Данные приближения являются доста-

точными для получения высокой точности описания энергии ионизации.

Кроме того, получены формулы, позволяющие описать перераспределение избыточного заряда на молекуле при ионизации. В данном приближении распределение заряда зависит только от химической твердости атомов.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (грант 21-79-00150).

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Yu, H. Wang, X. Kong et al., , *Nature Energy* **5**, 526 (2020).
2. E. Sánchez-Díez, E. Ventosa, M. Guarnieri et al., *J. Power Sources* **481**, 228804 (2021)
3. K. Wang, F. Wang, Z. Lou et al., *Int. J. Mol. Sci.* **21**, 974 (2020)
4. A. Wang, S. Kadam, H. Li, et al. *npj Comput Mater* **4**, 15 (2018).
5. S. McKechnie, G. H. Booth, A. J. Cohen, and J. M. Cole, *J. Chem. Phys.* **142**, 194114 (2015)
6. S. Smiga and I. Grabowski, *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 4780 (2018)
7. R. Zubatyuk, J. S. Smith, B. T. Nebgen, et al., *Nature Comm.* **12**, 4870 (2021).
8. G. Montavon, M. Rupp, V. Gobre et al, *New J. Phys.* **15**, 095003 (2013).
9. H. A. Doan, G. Agarwal, H. Qian et al., *Chem. Mat.* **32**, 6338 (2020).
10. *Green Energy Materials Handbook*, ed. by Ming-Fa Lin and Wen-Dung Hsu, ISBN 9781138605916, CRC Press (2019).
11. *Lithium-Ion Batteries and Solar Cells Physical, Chemical, and Materials Properties*, ed. by Ming-Fa Lin, Wen-Dung Hsu, and Jow-Lay Huang, ISBN 9780367686239, CRC Press (2022).
12. J. L. Holmes and F. P. Lossing, *Organic Mass Spectrom.* **26**, 537 (1991).
13. G. Mallocia, G. Cappelliniab, G. Mulasb, and A. Mattonia, *Chem. Phys.* **384**, 19 (2011).
14. A. K. Rappé and W. A. Goddard III, *J. Phys. Chem.* **95**, 8340 (1991) 3358–3363.
15. S. Naserifar, D. J. Brooks, W. A. Goddard III, and V. Cvicekb, *J. Chem. Phys.* **146**, 124117 (2017).

16. D. Ongari, P. G. Boyd, O. Kadioglu et al., *J. Chem. Theory Comput.* **15**, 1 (2019)
17. T. Verstraelen, P. W. Ayers, V. Van Speybroeck, and M. Waroquier, *J. Chem. Phys.* **138**, 074108 (2013)
18. *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*, ed. by P. J. Linstrom and W. G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899.
19. R. L. Kelly, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **16**, Suppl. 1 (1987).
20. R. C. Shiell, X. K. Hu, Q. C. J. Hu, and J. W. Hepburn, *Faraday Disc. Chem. Soc.* **115**, 331 (2000).
21. M. Scheer, R. C. Bilodeau, C. A. Brodie, H. K. Haugen, *Phys. Rev. A* **58**, 2844 (1998).

НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА «НУТАЦИЮ» СПИНОВ

*К. М. Салихов**

*Казанский физико-технический институт,
Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской Академии наук»
420029, Казань, Россия*

Поступила в редакцию 25 мая 2022 г.,
после переработки 24 июня 2022 г.
Принята к публикации 28 июня 2022 г.

Показано, что теория нутации Торри на основе уравнений Блоха для вектора намагниченности не может быть использована для описания «нутации» взаимодействующих спинов (включая расщепление спиновых уровней энергии в нулевом магнитном поле). Уравнения Блоха предполагают, что вектор магнитного момента спинов полностью задает состояние спинов. Но это верно только для невзаимодействующих частиц со спином $S = 1/2$. На примере простейшей системы со спином $S = 1$ проведено систематическое рассмотрение отклика («нутации») спинов на внезапное включение переменного магнитного поля. Проведен детальный анализ зависимости «нутации» от спин-спинового взаимодействия и характера возбуждения спинов переменным полем. В условиях, когда спин-спиновые взаимодействия сопоставимы с энергией взаимодействия спинов с переменным полем, движение намагниченности спинов описывается как сумма вкладов, осциллирующих с разными частотами, которые равны частотам переходов между собственными состояниями спин-гамильтониана во вращающейся системе координат. Впервые для описания «нутации» спинов использован математический аппарат Гейзенберга. В этом подходе уравнения движения записываются непосредственно для измеряемых в опыте величин. Для спинов полный ортогональный набор величин составляют дипольный момент и мультипольные поляризации. Для демонстрации потенциала этого описания «нутации» рассмотрен конкретный случай парамагнитных частиц со спином $S = 1$. С учетом энергии расщепления в нулевом магнитном поле получены связанные уравнения движения для дипольного и квадрупольного моментов. Их можно назвать обобщенными уравнениями магнитной поляризации спинов. Эти уравнения показывают, что при наличии спин-спиновых взаимодействий происходит обратимое взаимное превращение дипольного и квадрупольного моментов. Это приводит к осцилляциям длины вектора намагниченности спинов, проекции которого наблюдаются обычно в эксперименте. Поэтому наблюдаемые в эксперименте осцилляции проекций намагниченности отражают как нутацию вектора намагниченности, так и модуляцию длины этого вектора за счет взаимопревращения дипольной и квадрупольной поляризации.

DOI: 10.31857/S0044451022110037

EDN: KYDZAF

1. ВВЕДЕНИЕ

Уже на ранних стадиях развития спектроскопии магнитного резонанса были предложены методы изучения намагниченности спинов в переходном режиме при внезапном включении или выключении внешнего переменного магнитного поля [1].

После внезапного выключения импульса переменного магнитного поля наблюдается сигнал свободной индукции. Этот метод особенно широко при-

меняется в спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [2]. Эволюция сигнала свободной индукции происходит под действием гамильтониана свободной системы при выключенном внешнем переменном магнитном поле. Когда начальное состояние системы является равновесным и переменное поле достаточно сильное, чтобы реализовалось неселективное возбуждение спинов, фурье-преобразование сигнала свободной индукции совпадает с формой стационарного спектра, регистрируемого в условиях линейного отклика [3].

Немалый интерес представляет регистрация намагниченности и в другом переходном режиме: при внезапном включении переменного магнитного поля $\mathbf{V}_1(t)$ [1, 4–6]. В этом подходе детектируется

* E-mail: kevsalikhov@mail.ru

движение спинов в постоянном магнитном поле \mathbf{B}_0 (ось z) и в перпендикулярном поле $\mathbf{B}_1(t)$. Этот подход привлекает внимание по нескольким соображениям [4–6].

- В переходной области амплитуда наблюдаемой намагниченности может существенно превышать намагниченность в условиях стационарного ЭПР-спектрометра. Поэтому измерение намагниченности в переходном интервале времени повышает чувствительность эксперимента.

- Временная зависимость намагниченности в переходном интервале времени дает, в принципе, возможность определить все параметры спин-гамильтониана, в том числе и времена релаксации продольной и поперечной компонент намагниченности. Конечно, для измерения времен релаксации в настоящее время развиты импульсные методы магнитного резонанса. Но далеко не каждая лаборатория имеет, например, установку импульсного электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). В то же время распространенные спектрометры ЭПР, которые предназначены для регистрации спектров в стационарных условиях, могут быть сравнительно легко модифицированы для регистрации намагниченности при внезапном включении переменного поля $\mathbf{B}_1(t)$ [6–8].

- Особый интерес представляет то, что регистрация временной зависимости намагниченности спинов при внезапном включении переменного поля $\mathbf{B}_1(t)$, в принципе, дает возможность определять величину мультиплетности электронных спинов изолированных парамагнитных частиц или спиновых кластеров [4–6].

Предложение использовать метод нутации для определения спиновой мультиплетности спиновых кластеров вызывает большой интерес [4, 5, 8]. К числу таких систем можно отнести, например, молекулы фуллерена с присоединенным свободным радикалом. При поглощении кванта света молекула фуллерена возбуждается в синглетное электронное состояние фуллерена со спином нуль. Благодаря спин-орбитальному взаимодействию, возбужденные молекулы фуллерена могут перейти в триплетное состояние со спином единица. Триплетная молекула фуллерена и присоединенный радикал со спином $1/2$ могут быть в состоянии с суммарным спином $1/2$ и $3/2$. В рассматриваемом случае суммарный спин $1/2$ может дать и фуллерен в синглетном возбужденном состоянии с присоединенным свободным радикалом. Прямое свидетельство образования состояния с суммарным спином электронов равным $3/2$ в этой системе представляет интерес. Другим при-

мером могут служить спин-коррелированные пары ион-радикалов, которые образуются в первичной стадии разделения зарядов в реакционном центре фотосинтетических систем.

В простейшем случае движение вектора намагниченности в постоянном магнитном поле \mathbf{B}_0 (ось z) и циркулярно поляризованном перпендикулярном поле $\mathbf{B}_1(t)$ представляет собой нутацию [3]. Используя уравнения Блоха для вектора намагниченности, Торри [1] показал, например, что при совпадении несущей частоты переменного поля с частотой прецессии магнитного момента в постоянном магнитном поле наблюдаемый во вращающейся системе координат вектор намагниченности имеет компоненты

$$\begin{aligned} M_y &= \langle S_y \rangle = -\sin(\omega_1 t), \\ M_z &= \langle S_z \rangle = \cos(\omega_1 t), \\ M_x &= \langle S_x \rangle = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\omega_1 = (g\beta/\hbar)B_1$ — частота Раби переменного поля, g — фактор спектроскопического расщепления, β — магнетон Бора. Согласно соотношениям (1), конец вектора намагниченности описывает окружность в плоскости yz . В теории Торри частота нутации спинов равна частоте Раби и не зависит от величины спина. Таким образом, теория нутации Торри не предсказывает возможности определять спиновую мультиплетность из данных по «нутации» спинов.

Отметим, что уравнения (1) не учитывают необратимой фазовой релаксации, которая в уравнениях Блоха задается временем релаксации T_2 . Для того чтобы детектировать нутацию (1) в эксперименте, должно выполняться условие $\omega_1 T_2 \gg 1$, т. е. частота Раби должна быть достаточно большой по сравнению со скоростью релаксации.

Уравнения Блоха для вектора намагниченности правильно описывают движение спинов в магнитных полях только для системы невзаимодействующих парамагнитных частиц со спином $S = 1/2$. В общем случае движение вектора намагниченности при внезапном включении переменного поля надо рассматривать в рамках последовательной квантовой теории. И тогда оказывается [4, 5], что при внезапном включении поля в переходной области, до момента достижения стационарного состояния, наблюдаемая намагниченность демонстрирует осцилляции, причем в общем случае проявляется не одна частота осцилляции, как в нутации (1). Это означает, что в общем случае движение намагниченности спинов не является нутацией, описанной Торри [3]. Несмотря на это, движение спинов после внезапного

включения переменного поля будем для краткости называть «нутацией».

В настоящее время квантовая теория динамики спинов в эксперименте по «нутации» строится следующим образом.

Предположим, что в отсутствие поля $\mathbf{B}_1(t)$ система спинов описывается спин-гамильтонианом H_0 . Для частиц со спином $S > 1/2$ спин-гамильтониан соержит зеемановское взаимодействие с постоянным полем B_0 и энергию расщепления в нулевом поле. При включении переменного поля спин-гамильтониан принимает вид (спин-гамильтониан записан в системе единиц, в которой $\hbar = 1$)

$$H = H_0 + 2\omega_1 S_x \cos(\omega t), \quad (2)$$

где ω_1 — частота Раби, ω — несущая частота линейно поляризованного поля. Дальнейшее рассмотрение существенно упрощается, если собственные состояния H_0 в хорошем приближении являются и собственными состояниями оператора S_z проекции спина на ось квантования z , параллельную \mathbf{B}_0 . Есть много ситуаций, в которых такое секулярное приближение для спин-гамильтониана оправдано. В этой ситуации, учитывая только одну циркулярно поляризованную компоненту поля и переходя во вращающуюся систему координат, получаем спин-гамильтониан

$$H_r = H_0 - \omega S_z + \omega_1 S_x. \quad (3)$$

Отметим, что в базисе собственных функций $|m\rangle$ оператора S_z ненулевые матричные элементы оператора x -проекции спина равны [9]

$$(S_x)_{m,m-1} = (S_x)_{m-1,m} = \frac{1}{2} \sqrt{(S+m)(S-m+1)}. \quad (4)$$

Отсюда видно, что матричный элемент перехода с уровня m на уровень $m - 1$ зависит от спина частицы, S . Это свойство взаимодействия спина с переменным полем, $\omega_1 S_x$ (см. (3), (4)), в конечном итоге дает возможность определить величину спина по «нутации».

Без учета парамагнитной релаксации спинов намагниченность спинов после внезапного включения поля B_1 задается величиной [9]

$$M_u = \text{Tr}\{S_u \rho(t)\} \equiv \text{Tr}\{S_u \exp(-iH_r t) \rho(0) \exp(iH_r t)\}, \quad (5)$$

$u = x, y, z.$

Здесь $\rho(0)$ — начальная матрица плотности спинов в момент внезапного включения поля B_1 . Если спины

находились в термодинамическом равновесии, то в высокотемпературном приближении можно в выражении (5) положить $\rho(0) = H_0$ [1, 5]. Например, в случае сильных полей B_0 , когда зеемановская энергия больше энергии расщепления в нулевом поле, имеем

$$\rho(0) = S_z. \quad (6)$$

Тогда уравнение (5) сводится к виду

$$M_u = \text{Tr}\{S_u \exp(-iH_r t) S_z \exp(iH_r t)\}, \quad (7)$$

$u = x, y, z.$

С помощью выражения (7) «нутация» спинов была рассчитана в ряде работ [4–8, 10]. Эти расчеты показали, что при внезапном включении поля B_1 проявляются осцилляции наблюдаемой намагниченности (7) с частотами, которые зависят от мощности переменного поля. Более того, при выполнении условия селективного возбуждения резонансного перехода наблюдается осцилляция с одной частотой, которая равна удвоенному матричному элементу перехода для оператора взаимодействия спина с полем B_1 , $\mathbf{V} = \omega_1 \mathbf{S}_x$, причем матричный элемент резонансного перехода рассчитывается в базисе собственных функций оператора S_z (см. (4)). На основании этого наблюдения появилось утверждение, что частота нутации для спинов произвольной величины определяется матричным элементом перехода для оператора $\mathbf{V} = \omega_1 \mathbf{S}_x$ [4, 5]. Поскольку эти матричные элементы перехода зависят от величины спина (см. (4)), измерение частоты нутации может быть использовано для определения спина частиц.

Расчеты «нутации» с конкретными магнитно-резонансными параметрами спинов показали, что в «нутации» могут проявиться одновременно несколько осциллирующих со временем вкладов в сигнал, наблюдаемый в эксперименте [4–6, 8, 10]. В такой ситуации возникает вопрос, какую из этих частот считать «частотой нутации».

В этой работе предлагается последовательный анализ проблемы. Анализ проведен для систем, в которых спин-гамильтониан H_0 (см. (2), (3)) свободного движения сохраняет z -проекцию спина, т. е. выполняется условие $[H_0, S_z] = 0$. Это позволяет систематизировать описание «нутации» спинов.

Статья построена следующим образом.

В разд. 2 кратко суммированы основные результаты теоретических расчетов динамики «нутации» с помощью уравнений (5), (7).

Показано, что при внезапном включении переменного поля движение вектора намагниченности представляет собой нутацию Торри только при

выполнении определенных соотношений между энергией спин-зависимых взаимодействий свободной спиновой системы и энергией взаимодействия спинов с переменным полем.

В общем случае движение намагниченности не сводится к нутаации Торри. В наблюдаемый сигнал вносят вклад осцилляции с частотами ЭПР-переходов во вращающейся системе координат. Сумма этих вкладов приводит к биениям сигнала «нутаации».

Таким образом, квантовая теория с использованием уравнений (5), (7) предсказывает проявление нескольких частот осцилляций сигнала «нутаации». Это согласуется и с экспериментальными данными. Казалось бы, все замечательно. В ходе вычислений возникло новое наблюдение. Анализ «нутаации» модельных систем спинов, проведенный в этой работе, показал, что в ходе «нутаации» изменяется довольно сложным образом не только направление вектора магнитного дипольного момента спинов (вектора намагниченности спинов), но и модуль (длина) этого вектора.

Наглядному объяснению этого наблюдения посвящен разд. 3 этой статьи. Для этого потребовалось уравнения Блоха для вектора намагниченности заменить более общими уравнениями, включив в явной форме наряду с дипольной поляризацией также и соответствующие мультипольные спиновые поляризации.

2. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИКИ СПИНОВ В УСЛОВИЯХ «НУТАЦИИ» ДЛЯ МОДЕЛЬНЫХ СИТУАЦИЙ

В общем виде описание нутаации спинов представляет весьма сложную задачу. Здесь я привожу результаты для нескольких простых ситуаций, которые позволяют выявить общие свойства «нутаации» взаимодействующих спинов.

2.1. Про обычно применяемый формализм расчета динамики спинов при «нутаации» (уравнение (5))

Согласно уравнению (5), динамика спинов после внезапного включения переменного магнитного поля определяется собственными значениями и собственными векторами спин-гамильтониана H_r (3) во вращающейся системе координат. В базисе собственных функций H_r (3) диагональные элементы матрицы плотности (населенности собственных состояний спин-гамильтониана) не изменяются со вре-

менем без учета парамагнитной релаксации. Недиагональные матричные элементы матрицы плотности спинов, т. е. когерентность спинов, в базисе собственных состояний спинов во вращающейся системе координат изменяются со временем известным образом [9]:

$$\rho_{k,n}(t) = (\rho_0)_{k,n} \exp(-i(E_n - E_k)t). \quad (8)$$

Здесь E_n, E_k — уровни энергии спин-гамильтониана во вращающейся системе координат (3).

Согласно выражениям (5), (7), (8), наблюдаемый в опыте дипольный момент (намагниченность) спинов есть сумма вкладов, которые осциллируют с частотами, равными разности энергии пар уровней, $E_n - E_k$, собственных состояний спин-гамильтониана во вращающейся системе координат (3).

После внезапного включения поля \mathbf{B}_1 осцилляции наблюдаемого сигнала с разными частотами будут иметь разную амплитуду, причем некоторые частоты (связанные с определенными квантовыми когерентностями) могут и не проявляться. Это зависит от двух факторов.

Во-первых, это зависит от начальных значений когерентностей спинов $(\rho_0)_{k,n}$ (5), (8) в базисе собственных состояний гамильтониана H_r во вращающейся системе координат. Если в момент внезапного включения микроволнового поля спины находились в термодинамическом равновесии (см. (5)), то речь идет о недиагональных элементах оператора S_z в представлении собственных функций спин-гамильтониана H_r (3).

Возможны и другие начальные состояния спинов. При импульсном фотовозбуждении молекул за счет спин-селективных безызлучательных синглет-триплетных переходов появляются триплетные возбужденные молекулы с неравновесной поляризацией спинов. Например, возможна ситуация, когда триплетные молекулы рождаются только в состояниях с проекцией спина $m = \pm 1$. Тогда начальную матрицу в (5) можно представить как $\rho(0) = S_z^2$.

Отметим, что начальное условие $\rho(0) = S_z^2$ может реализоваться и в условиях термодинамического равновесия, если поле B_0 достаточно мало и зеемановская энергия меньше энергии расщепления в нулевом поле.

Во-вторых, это зависит от того, какие когерентности спинов в базисе собственных состояний гамильтониана во вращающейся системе координат входят в оператор наблюдаемой в опыте намагниченности (см. оператор S_u в (5), (7)). Наблюдаемой

величиной в магнитном резонансе обычно является x -, y - или z -компонента магнитного дипольного момента спинов, т. е. в (5), (7) $S_u \equiv S_x, S_y, S_z$.

Ниже будет показано, что в предельной ситуации неселективного возбуждения переменным полем всех возможных спиновых переходов должна наблюдаться в хорошем приближении нутация Торри с частотой Раби для любых значений спина парамагнитных частиц. В этом случае эксперименты по нутации не дадут информации о величине спина.

Отметим, что неселективное возбуждение во многих ситуациях можно реализовать для ядерных спинов. Однако, как правило, ее нельзя реализовать для электронных спинов, так как обычно неоднородное уширение спектров ЭПР гораздо больше амплитуды поля B_1 .

При селективном возбуждении только одного резонансного перехода также в достаточно хорошем приближении наблюдается практически нутация. В отличие от предыдущего случая неселективного возбуждения спинов частота нутации зависит от величины спина.

На первый взгляд может показаться, что наблюдение нутации при селективном возбуждении только одного резонансного перехода между спиновыми уровнями является удобным и универсальным методом для измерения величины спина парамагнитных частиц. Однако для реализации такого вида возбуждения должны быть выполнены определенные условия. Во-первых, частота Раби должна быть существенно меньше разности частот для выделенного нами перехода и для других частот в спектре ЭПР. Во-вторых, частота Раби должна быть достаточно большой, чтобы за время парамагнитной релаксации нутация Торри успела совершить хотя бы один период движения. Например, если время фазовой релаксации электронных спинов составляет примерно 1 мкс, то частота Раби должна быть не меньше 1 Гс. Это означает, что для селективного возбуждения только одного перехода в спектре ЭПР разница частот между выделенным резонансно возбуждаемым переходом и ближайшим по частоте другим переходом спинов (другой линией спектра ЭПР) должна быть больше нескольких гауссов.

В случае ЭПР-спектроскопии эти условия селективного возбуждения только одного резонансного спинового перехода нередко могут оказаться невыполнимыми одновременно. Поэтому для электронных спинов особенно актуальным является развитие теории нутации, когда характер возбуждения спинов не сводится к рассмотренным выше предельным типам возбуждения спинов.

В общем случае отклик системы на внезапное включение переменного поля не является нутацией по Торри. Однако это не означает, что в каких-то ситуациях нельзя из экспериментальных данных по «нутации» получить величину спина частиц. Регистрация «нутации» позволяет определить величину спина. Для этого надо сопоставлять результаты симуляции (теоретические расчеты «нутации») с экспериментальными данными.

2.2. Предельный случай неселективного возбуждения спинов

Неселективное возбуждение спинов реализуется в случае такого сильного поля B_1 , когда частота Раби намного больше разброса частот переходов между собственными состояниями спин-гамильтониана $H_0 - \omega S_z$. Неселективное возбуждение спинов переменным полем означает, что при включенном переменном магнитном поле в спин-гамильтониане во вращающейся системе координат можно оставить только одно слагаемое:

$$H_r \approx \omega_1 S_x. \tag{9}$$

Движение спина с таким гамильтонианом легко находится. Действительно, собственные значения (уровни энергии) гамильтониана (9) хорошо известны для любого значения спина S . Они принимают значения

$$E = \{\omega_1 S, \omega_1(S - 1), \dots, -\omega_1 S\}. \tag{10}$$

Для каждого из этих эквидистантно расположенных уровней энергии легко можно найти собственные функции.

Подставляя (9) в (7), получаем очень простое выражение для сигнала нутации для ситуации неселективного возбуждения спинов:

$$M_u = \text{Tr}\{S_u \exp(-i\omega_1 S_x t) S_z \exp(i\omega_1 S_x t)\}, \tag{11}$$

$$u = x, y, z.$$

Из (11) следует, что в условиях термодинамического равновесия в начальном состоянии квантовая когерентность есть только между соседними уровнями энергии $m, m \pm 1$, для которых частота перехода равна ω_1 (см. (10)). В результате в переходном сигнале нутации появляются осцилляции только с частотой Раби ω_1 , и мы получаем

$$\begin{aligned} M_y &= -2 \sin(\omega_1 t), \\ M_z &= 2 \cos(\omega_1 t), \\ M_x &= 0. \end{aligned} \tag{12}$$

Таким образом, при выполнении условия неселективного возбуждения спинов нутация может быть описана теорией Торри, если в момент внезапного включения переменного поля спины находились в термодинамическом равновесии и состояние спинов можно задавать оператором (6).

Согласно приведенным выше рассуждениям в случае неселективного возбуждения спинов (9), в принципе, в нутации могут проявляться когерентности с частотами $\omega_1, 2\omega_1, \dots, 2\omega_1 S$. Какие частоты проявятся, зависит от двух факторов. Во-первых, какие когерентности в базисе собственных состояний спин-гамильтониана во вращающейся системе координат присутствуют в системе спинов в начальный момент внезапного включения переменного поля. Во-вторых, какая конкретная физическая величина измеряется в эксперименте. Когда наблюдаемой величиной является M_y - или M_z -компонента намагниченности спинов и начальное состояние спинов задается уравнением (6), в «нутации» проявляется только одноквантовая когерентность, задаваемая спин-гамильтонианом (9).

2.3. Предельный случай селективного по частоте возбуждения спинов

Селективное по одной из частот возбуждение спинов можно реализовать в случае сравнительно слабого поля B_1 , когда частота Раби ω_1 существенно меньше разброса частот переходов между собственными состояниями спин-гамильтониана спинов $H_0 - \omega S_z$. В этом случае селективного по частоте возбуждения спинов частота «нутации» зависит от величины спина парамагнитных частиц.

Чтобы наглядно показать, как в условиях селективного возбуждения спинов появляется зависимость частоты нутации от величины спина, рассмотрим систему частиц со спином $S = 1$ и изотропным g -тензором и предположим, что спин-гамильтониан спинов состоит из энергии зеемановского взаимодействия спинов с постоянным магнитным полем B_0 и энергии расщепления спиновых уровней в нулевом магнитном поле. Для дальнейших расчетов выберем энергию расщепления в простейшей форме в виде DS_z^2 , т. е. спин-гамильтониан во вращающейся системе координат имеет вид [10]

$$H_r = (\omega_0 - \omega)S_z + DS_z^2 + \omega_1 S_x. \quad (13)$$

Например, слагаемое с D в приведенной форме может быть связано с диполь-дипольным взаимодействием двух спинов. Отметим, что появление расщепления спиновых уровней энергии в нулевом маг-

нитном поле, $B_0 = 0$, является следствием спин-зависимого взаимодействия. Например, когда мы говорим, что парамагнитная частица имеет электронный спин $S = 1$, подразумевается наличие, по крайней мере, двух электронов. Суммарный спин двух электронов может иметь мультиплетность 1 (суммарный спин $S = 0$, синглетное состояние пары спинов) или мультиплетность 3 ($S = 1$, триплетное состояние пары спинов). Например, благодаря обменному взаимодействию, синглетное состояние может быть весьма высоко возбужденным состоянием, а триплетное может быть основным состоянием, как в случае молекул кислорода.

В базисе собственных функций S_z имеем представление спин-гамильтониана (13) в виде

$$H_r = \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega + D & \omega_1/\sqrt{2} & 0 \\ \omega_1/\sqrt{2} & 0 & \omega_1/\sqrt{2} \\ 0 & \omega_1/\sqrt{2} & -(\omega_0 - \omega) + D \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Матрица (14) принимает более простую форму, если частоту переменного поля выбрать равной резонансной частоте одного из переходов, например, $\omega = \omega_0 + D$. При выполнении этого условия резонанса частот в рассматриваемой ситуации селективного возбуждения только резонансного перехода, когда $\omega_1 < D$, в линейном по ω_1/D приближении спин-гамильтониан (14) можно записать как [4, 11]

$$H_r = \begin{pmatrix} 0 & \omega_1/\sqrt{2} & 0 \\ \omega_1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2D \end{pmatrix}. \quad (15)$$

В приближении (15) слабое поле B_1 не влияет на состояние спина с проекцией спина $m = -1$. Но даже очень слабое поле B_1 эффективно смешивает два вырожденных состояния спина с проекциями $m = 1$ и $m = 0$. Собственные значения и собственные состояния H_r (15) равны

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\omega_1}{\sqrt{2}}, & \Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle + |0\rangle), \\ E_2 &= -\frac{\omega_1}{\sqrt{2}}, & \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle + |0\rangle), \\ E_3 &= 2D, & \Psi_3 &= |-1\rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Используя (7), (15), (16), получаем

$$\begin{aligned} M_y &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\sqrt{2}\omega_1 t), \\ M_z &= \frac{1}{2} (3 + \cos(\sqrt{2}\omega_1 t)). \end{aligned} \quad (17)$$

Видно, что разность первых двух собственных значений (16) дает частоту нутации $\sqrt{2}\omega_1$.

Таким образом, в двух предельных ситуациях (неселективное возбуждение и селективное резонансное возбуждение одного из переходов) нутация происходит с разными частотами ω_1 (12) и $\sqrt{2}\omega_1$ (17), соответственно. Но оказывается, есть еще одно различие нутации в этих предельных ситуациях. При неселективном возбуждении конец вектора намагниченности описывает окружность в плоскости, перпендикулярной \mathbf{B}_1 (см. (12)), а в случае селективного возбуждения описывает эллипс (см. (17)). При этом большая полуось (вдоль M_y) в $\sqrt{2}$ раза больше малой полуоси эллипса (вдоль M_z) (рис. 1).

Осцилляции с малой амплитудой на рис. 1b связаны с тем, что переменное поле в небольшой мере возбуждает и нерезонансный переход. Когда мы говорим «селективное резонансное возбуждение спинов», это не означает, что возбуждается только один резонансный переход. В реальности другие, нерезонансные, переходы также возбуждаются, правда, с гораздо меньшей эффективностью, чем резонансный переход.

Приведенные для спина $S = 1$ рассуждения можно легко обобщить на произвольные спины. Для этого предположим, что из-за достаточно большого расщепления уровней энергии спинов в нулевом магнитном поле B_0 при заданной частоте переменного поля эффективно возбуждается только резонансный переход с изменением проекции спина m ($m, m - 1$, см. (4)). Если выполняются условие резонансного возбуждения одной из возможных линий в спектре ЭПР для гамильтониана H_0 и условия пренебрежимо малого возбуждения других (нерезонансных) линий, то проявляется нутация с частотой [4, 5]

$$\begin{aligned} \Omega_{nut} &= 2\omega_1(S_x)_{m,m-1} = \\ &= \omega_1\sqrt{(S+m)(S-m+1)}. \end{aligned} \quad (18)$$

Таким образом, при селективном резонансном возбуждении переходов между двумя уровнями с квантовыми числами $m, (m - 1)$ может проявляться нутация с частотой, равной удвоенному матричному элементу резонансного перехода, вызванного взаимодействием поля B_1 со спинами. Эта частота нутации максимальна при минимальных значениях m . Действительно, при наибольшем значении $m = S$ имеем $\Omega_{nut} = \omega_1\sqrt{2S}$ (см. (18)). При минимальном значении m частота нутации разная для целых и полуцелых спинов. Для целых значений S

имеем $\Omega_{nut} = \omega_1\sqrt{S(S+1)}$, а для полуцелых S получаем $\omega_{nut} = \omega_1(S+1/2)$. Зависимость частоты нутации от того, какой резонансный переход возбуждается переменным полем, позволяет определять величину спина, сравнивая результаты, полученные при возбуждении разных переходов.

2.4. Общий случай возбуждения спинов

В общем случае нужно определить собственные значения и собственные состояния спин-гамильтониана во вращающейся системе координат, H_r (3), и в итоге временную зависимость «нутации» можно рассчитать только численно.

Для иллюстрации на рис. 2 для спина $S = 1$ со спин-гамильтонианом (13) приведены рассчитанные зависимости M_y -компоненты намагниченности после внезапного включения переменного поля.

Отметим, что период колебаний равен $T = 2\pi/\omega$. На рис. 2 все кривые рассчитаны для $\omega_1 = 1$ Гс. В этих единицах для колебаний с частотой $\omega_1 = 1$ Гс период колебаний равен $T = 2\pi = 6.28$ в единицах 1/Гс. Период колебаний с частотой $\sqrt{2}\omega_1$ равен $T = 4.44$ 1/Гс.

На рис. 2 видно, что в отсутствие расщепления в нулевом поле ($D = 0$, синяя кривая на рис. 2a) период нутации равен 6.28, т. е. частота нутации равна $\omega_1 = 1$ Гс. Это ожидаемый результат, так как в этом случае реализуется неселективное возбуждение спинов, и поэтому $\Omega_{nut} = \omega_1$ (см. (14)).

Когда расщепление в нулевом поле намного больше ω_1 (красная кривая для $D = 20$ Гс на рис. 2a) период осцилляций практически совпадает с ожидаемым результатом для случая селективного возбуждения спинов: период нутации 4.44 1/Гс, т. е. частота нутации совпадает с $\sqrt{2}\omega_1$ (см. (19)).

В обеих указанных выше предельных ситуациях наблюдаемая величина осциллирует с одной частотой, ω_1 или $\sqrt{2}\omega_1$, в случае неселективного или селективного резонансного возбуждения спинов, соответственно.

Для промежуточного значения $D = 0.5$ Гс (см. рис. 2a и 2b) в наблюдаемый сигнал вносит вклад не одна, а все три возможные когерентности (одноквантовые и двухквантовые осциллирующие слагаемые наблюдаемой компоненты намагниченности).

Численными расчетами была найдена зависимость наблюдаемой в опыте величины в ситуации

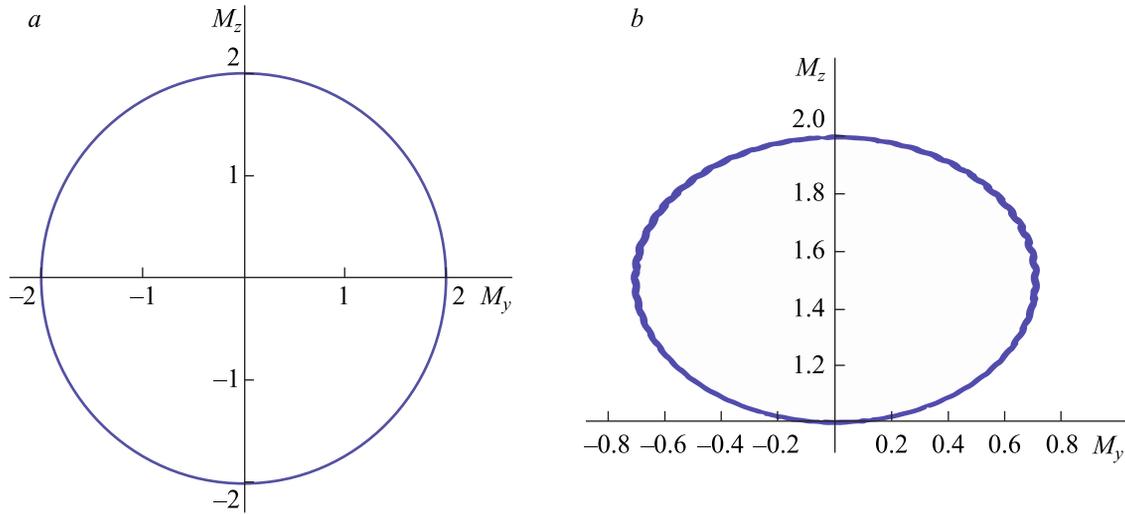


Рис. 1. Траектории движения конца вектора намагниченности при неселективном (а) и селективном (b) возбуждениях спина. Расчеты проведены для $\omega_1 = 1$ Гс, $D = 0$ (а) и $D = 40$ Гс (b). В этой статье частоты измеряются в гауссах. Чтобы перевести частоты в рад/с, надо величину в гауссах умножить на гиромагнитное отношение. Например, для свободного электрона надо умножить на $1.76 \cdot 10^7$.

$$D = 0.5 \text{ Гс}, \omega_1 = 1 \text{ Гс}, \omega = \omega_0 + D:$$

$$M_y = -0.76 \sin(1.05t) - 0.9 \sin(1.25t) - 0.024 \sin(2.3t). \quad (19)$$

Для этих параметров собственные значения спингамильтониана во вращающейся системе координат равны

$$E_1 = 1.45 \text{ Гс}, \quad E_2 = -0.85 \text{ Гс}, \quad E_3 = 0.40 \text{ Гс}. \quad (20)$$

В этом конкретном примере, основной вклад в наблюдаемую «нutation» вносят вклад когерентности между состояниями $1 \leftrightarrow 3$ и $2 \leftrightarrow 3$, а когерентность состояний $1 \leftrightarrow 2$ вносит пренебрежимо малый вклад.

В предельной ситуации, при $D \gg \omega_1$, при селективном резонансном возбуждении спинового перехода частота нutation зависит от величины спина (см. (19)). Для спина $S = 1$ частота нutation в этом случае равна $\sqrt{2}\omega_1$ (см. (19)).

В интервале $|D| \leq 2\omega_1$ могут проявляться осцилляции с двумя или тремя частотами. Когда вклады двух осцилляций сопоставимы, может наблюдаться их биение, как показывает кривая на рис. 2b.

В реальных ситуациях в эксперименте наблюдаются только такие осцилляции, период которых меньше времени декогеренции спинов. Поэтому в эксперименте могут наблюдаться только несколько периодов колебаний. В этой ситуации есть возможность ошибочно принять за период «нutation» мо-

мент времени первого прохождения наблюдаемого сигнала через нуль.

На рис. 2a моменты времени t^* , когда наблюдаемый сигнал проходит через нуль в первый раз в предельных случаях $D = 0$ и $D \gg \omega_1$, равны периоду нutation в соответствующих предельных ситуациях.

В промежуточном случае $D = 0.5 \text{ Гс}, \omega_1 = 1 \text{ Гс}$ момент времени t^* , когда наблюдаемый сигнал проходит через нуль в первый раз, не дает периода осцилляции ни одной из когерентностей. Например, в случае, когда две когерентности вносят практически одинаковый вклад в сигнал нutation, время t^* равно периоду колебаний с частотой, равной половине суммы частот двух спиновых когерентностей.

Таким образом, в общем случае определение спина из данных по «нutation» оказывается не таким форсированным, как в предельных случаях очень малого и очень большого расщеплений в нулевом магнитном поле. Однако это не означает, что в общем случае из экспериментальных данных по «нutation» нельзя определить величину спина. Можно измерить «нutation» при нескольких значениях ω_1 , которые соответствуют той или иной степени селективности возбуждения, и симулировать численными расчетами экспериментальные данные.

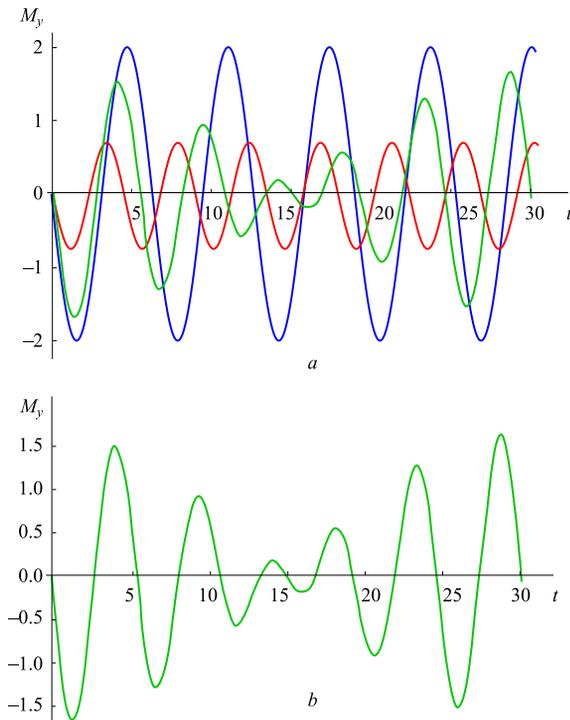


Рис. 2. (В цвете онлайн) *a*) Зависимости от времени M_y -компоненты намагниченности после внезапного включения переменного поля с частотой $\omega_1 = 1$ Гс (синяя, зеленая, красная кривые соответствуют $D = 0, 0.5, 20$ Гс). *b*) — кривая для $D = 0.5$ Гс приведена отдельно, чтобы лучше высветить биение двух осциллирующих вкладов с разными частотами. Все расчеты приведены для случая, когда несущая частота переменного поля совпадает с одной из резонансных частот спинов, в этих расчетах выбран резонансный переход на частоте $\omega = \omega_0 + D$. Время на оси абсцисс на рис. 2–4, 7, 8 надо умножить на $(2\pi/1.76) \cdot 10^{-7}$, чтобы перевести в секунды. Для поля 1 Гс угловая частота $\omega_1 = 1.76 \cdot 10^7$ рад/с, или $\nu_1 = 2.8$ МГц

2.5. Изменение длины вектора намагниченности при «нутации» за счет спиновой динамики, а не парамагнитной релаксации

В этой работе рассматривается поведение «нутации» только за счет спиновой динамики и не учитывается релаксация спинов к состоянию термодинамического равновесия. В такой ситуации оказалось, что рассчитанные по уравнению (7) проекции вектора дипольной намагниченности на оси координат x, y, z дают вектор, длина которого довольно сложным образом осциллирует со временем. Иллюстрация этого наблюдения будет приведена ниже.

Это наблюдение побуждает посмотреть на динамику спинов при «нутации» с другой позиции.

Хорошо известно, что для описания квантовых систем можно использовать математический аппарат Гейзенберга. В этом подходе уравнения движения записываются непосредственно для измеряемых в опыте величин. Такими величинами в изучаемой задаче являются проекции дипольной поляризации и компоненты мультипольных поляризаций спинов [12, 13]. Можно отметить, что подход Гейзенберга был успешно использован, например, в теории поляризации спинов, индуцированной спин-зависящей рекомбинацией радикальных пар [14, 15]. В следующем разделе этот подход реализован для анализа влияния спин-спинового взаимодействия на «нутацию» спинов.

3. ОБОБЩЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И «НУТАЦИЯ» СПИНОВ

Выше уже неоднократно отмечалось, что теория Торри не описывает в общем случае «нутацию» спинов. Это не удивительно. Торри использовал уравнения Блоха для намагниченности. Уравнения Блоха предполагают, что три проекции намагниченности дают полное описание системы спинов. В квантовой теории только для невзаимодействующих частиц со спином $S = 1/2$ три проекции спина задают полное описание. Например, для частицы со спином $S = 1$ для полного описания надо задавать уже не только три проекции спинового момента, но и пять компонент спинового квадрупольного момента [12].

Поэтому при анализе движения спинов в условиях, когда проявляются спиновые взаимодействия, попытки использовать уравнения Блоха как эквивалентную модель для описания динамики спинов не оправданы. Чтобы наглядно высветить роль мультипольных моментов в движении дипольного момента, полезно записать квантовые уравнения движения для полного набора физических величин, для дипольного и мультипольных моментов.

Для демонстрации такого подхода к описанию спиновой динамики в данной работе детально рассмотрена простейшая модельная система парамагнитных частиц со спином $S = 1$, которые не взаимодействуют между собой, но для каждого спина была учтена так называемая энергия расщепления спиновых уровней в нулевом магнитном поле.

Для частиц со спином $S = 1$ получена система уравнений для полного набора физических величин, которые описывают состояние спина. Численно рассчитана динамика каждой проекции дипольного момента спина и каждой компоненты квадрупольного

момента после внезапного включения переменного поля.

Показано, что в условиях, когда энергия спин-спиновых взаимодействий соизмерима с энергией взаимодействия спинов с переменным магнитным полем, важную роль играет обратимое взаимное превращение дипольной и квадрупольной поляризации спинов.

3.1. Взаимопревращения дипольного и квадрупольного моментов на примере парамагнитных частиц со спином $S = 1$

Рассмотрим систему частиц со спином $S = 1$ и изотропным g -тензором и предположим, что спин-гамильтониан включает энергию зеемановского взаимодействия спинов с постоянным магнитным полем B_0 и энергию расщепления спиновых уровней в нулевом магнитном поле в виде DS_z^2 , т.е. спин-гамильтониан во вращающейся системе координат имеет вид (см. (13))

$$\mathbf{H}_r = (\omega_0 - \omega)\mathbf{S}_z + DS_z^2 + \omega_1\mathbf{S}_x.$$

Все расчеты далее проведены при предположении, что частота переменного поля равна $\omega = \omega_0 + D$. Эта частота переменного поля является резонансной для одного из переходов в стационарном спектре ЭПР в условиях линейного отклика для спина $S = 1$ со спин-гамильтонианом

$$\mathbf{H}_0 = \omega_0\mathbf{S}_z + DS_z^2.$$

Любое состояние спина $S = 1$ задается матрицей плотности 3×3 , т.е. девятью числами. Учитывая условие нормировки и свойство эрмитовости матрицы плотности, $\rho_{km} = \rho_{mk}^*$ [9], получаем, что восемь измеряемых в опыте физических величин также могут дать полное описание состояния спина $S = 1$. Этими величинами являются три проекции спина и пять компонент квадрупольного тензора (квадрупольного момента) [12]:

$$\begin{aligned} & \mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z, \\ & \mathbf{Q}_{xxyy} = \mathbf{S}_x\mathbf{S}_x - \mathbf{S}_y\mathbf{S}_y, \\ & \mathbf{Q}_{zz} = \mathbf{S}_z\mathbf{S}_z - \frac{2}{3}\mathbf{F}, \\ & \mathbf{Q}_{xy} = \mathbf{S}_x\mathbf{S}_y + \mathbf{S}_y\mathbf{S}_x, \\ & \mathbf{Q}_{xz} = \mathbf{S}_x\mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z\mathbf{S}_x, \\ & \mathbf{Q}_{yz} = \mathbf{S}_y\mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z\mathbf{S}_y. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь \mathbf{F} — единичный оператор. Операторы (21) вместе с единичным оператором составляют полный ортогональный базис операторов.

Для всех проекций спинового момента \mathbf{S}_x , \mathbf{S}_y , \mathbf{S}_z и компонент квадрупольных тензоров $\mathbf{Q}_{k\ell m}$ можно написать уравнение движения Гейзенберга. Для произвольного оператора \mathbf{A} имеем уравнение

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i[\mathbf{H}, \mathbf{A}]. \quad (22)$$

Для операторов (21) получаем следующую систему линейных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{S}_x}{\partial t} &= D\mathbf{S}_y - D\mathbf{Q}_{yz}, \\ \frac{\partial \mathbf{S}_y}{\partial t} &= -D\mathbf{S}_x - \omega_1\mathbf{S}_z + D\mathbf{Q}_{xz}, \\ \frac{\partial \mathbf{S}_z}{\partial t} &= \omega_1\mathbf{S}_y, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{xy}}{\partial t} &= -2D\mathbf{Q}_{xxyy} - \omega_1\mathbf{Q}_{xz}, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{xz}}{\partial t} &= -D\mathbf{S}_y + \omega_1\mathbf{Q}_{xy} + D\mathbf{Q}_{yz}, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{yz}}{\partial t} &= D\mathbf{S}_x - \omega_1\mathbf{Q}_{xxyy} - 3\omega_1\mathbf{Q}_{zz} - D\mathbf{Q}_{xz}, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{zz}}{\partial t} &= \omega_1\mathbf{Q}_{yz}, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{xxyy}}{\partial t} &= 2D\mathbf{Q}_{xy} + \omega_1\mathbf{Q}_{yz}. \end{aligned} \quad (23)$$

Из этих уравнений видно, что при $D = 0$ нет взаимного превращения дипольного и квадрупольного моментов, переменное поле не индуцирует таких превращений. Спиновые взаимодействия ($D \neq 0$) вызывает обратимое превращение дипольного и квадрупольного моментов.

Отметим, что при $D = 0$ уравнения (23) для проекций дипольного момента совпадают с уравнениями Блоха без учета парамагнитной релаксации.

Измеряемые в эксперименте средние значения проекций спина (намагниченности) и компонент квадрупольного момента равны

$$\begin{aligned} S_u &\equiv \langle S_u \rangle = \text{Tr}(S_u \rho(0)), \\ Q_{uv} &\equiv \langle Q_{uv} \rangle = \text{Tr}(Q_{uv} \rho(0)), \end{aligned} \quad (24)$$

$u, v = x, y, z.$

Здесь $\rho(0)$ — начальная матрица плотности спинов в момент внезапного включения поля B_1 . Если спины находились в термодинамическом равновесии, то в высокотемпературном приближении в (24) величины $\rho(0)$ можно считать равной S_z (6).

Из уравнений (23), (24) видно, что средние значения физических величин (24) подчиняются тем же самым уравнениям (23) для операторов соответствующих физических величин.

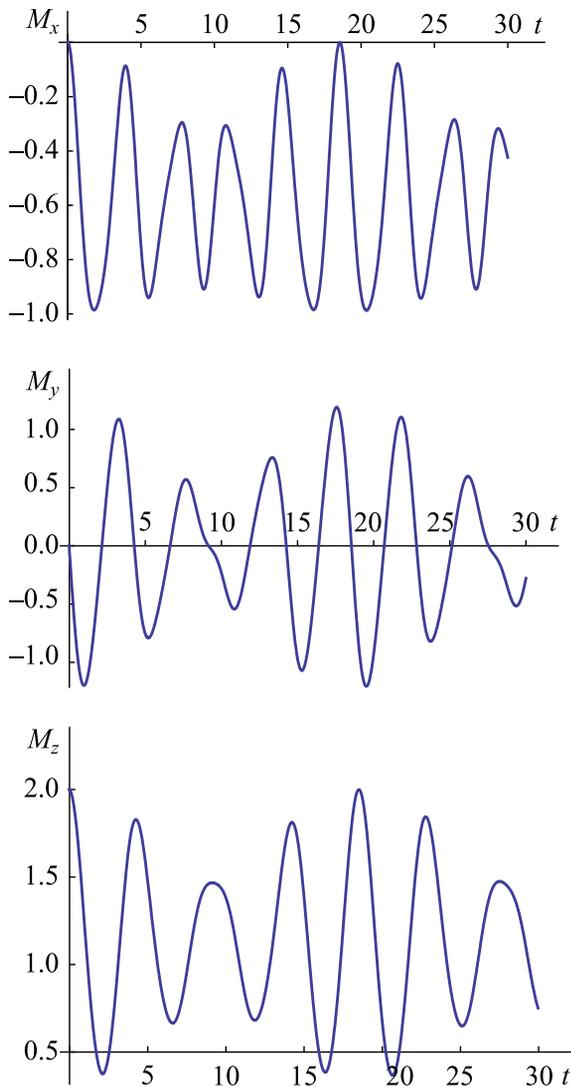


Рис. 3. Зависимости от времени проекций намагниченности спинов после внезапного включения переменного поля. Начальное состояние спинов считается равновесным (6). Параметры расчетов: $\omega = \omega_0 + D$, $\omega_1 = 1$ Гс, $D = 1$ Гс

Систему линейных дифференциальных уравнений (23) для средних значений (24) надо решать при начальных условиях, которые задаются матрицей плотности спина в момент внезапного включения переменного поля. Если спины находились в состоянии термодинамического равновесия и начальное состояние спинов дается выражением (6), то «нута́ция» спинов стартует из состояния, когда есть единственное отличное от нуля начальное условие: $S_z(0) = 2$, а все остальные проекции дипольного момента и все компоненты квадрупольного момента равны нулю.

При фотовозбуждении молекулы могут быть созданы в триплетном состоянии с неравновесной

поляризацией электронных спинов. Например, начальное состояние спина может описываться матрицей плотности $\rho(0) = S_z^2$ [5, 15]. В этом случае уравнения (23) для средних значений (24) надо решать со следующими начальными условиями: $Q_{zz}(0) = 2/3$, а все остальные величины равны нулю. «Нута́ция» спинов стартует из состояния, в котором дипольный момент равен нулю и только одна из компонент квадрупольного момента не равна нулю. В этом случае в эксперименте по «нута́ции» сначала сигнал будет равен нулю, а отличный от нуля сигнал будет наблюдаться только по мере превращения квадрупольного момента в дипольный, так как обычно в эксперименте регистрируется одна из проекций дипольного момента. Таким образом, если в эксперименте на малых временах наблюдается нарастание сигнала, то это означает, что к моменту включения микроволнового поля спин находился в состоянии с отличной от нуля квадрупольной поляризацией. Такое поведение «нута́ции» и наблюдается в экспериментах при поляризации спинов электронов электронно-возбужденных органических молекул по так называемому триплетному механизму поляризации спинов [5, 8, 15].

Заслуживает внимания тот факт, что вторые производные наблюдаемых величин также приводят к системе линейных уравнений

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 S_x}{\partial t^2} &= D(2D(-S_x + S_{xz}) + (S_{xxyy} - S_z + 3S_{zz})\omega_1), \\
 \frac{\partial^2 S_y}{\partial t^2} &= 2D^2(-S_y + S_{yz}) + S_{xy}D\omega_1 - S_y\omega_1^2, \\
 \frac{\partial^2 S_z}{\partial t^2} &= -\omega_1(D(S_x - S_{xz}) + S_z\omega_1), \\
 \frac{\partial^2 S_{xxyy}}{\partial t^2} &= -4D^2S_{xxyy} + D\omega_1(S_x - 3S_{xz}) - (S_{xxyy} + 3S_{zz})\omega_1^2, \\
 \frac{\partial^2 S_{zz}}{\partial t^2} &= -\omega_1(D(-S_x + S_{xz}) + (S_{xxyy} + 3S_{zz})\omega_1), \\
 \frac{\partial^2 S_{xy}}{\partial t^2} &= -4D^2S_{xy} + D\omega_1(S_y - 3S_{yz}) - S_{xy}\omega_1^2, \\
 \frac{\partial^2 S_{xz}}{\partial t^2} &= 2D^2(S_x - S_{xz}) + D\omega_1(-3S_{xxyy} + S_z - 3S_{zz}) - S_{xz}\omega_1^2, \\
 \frac{\partial^2 S_{yz}}{\partial t^2} &= 2D^2(S_y - S_{yz}) - 3D\omega_1S_{xy} - 4S_{yz}\omega_1^2.
 \end{aligned} \tag{25}$$

Необходимые для решения этих уравнений начальные условия задаются начальными значениями на-

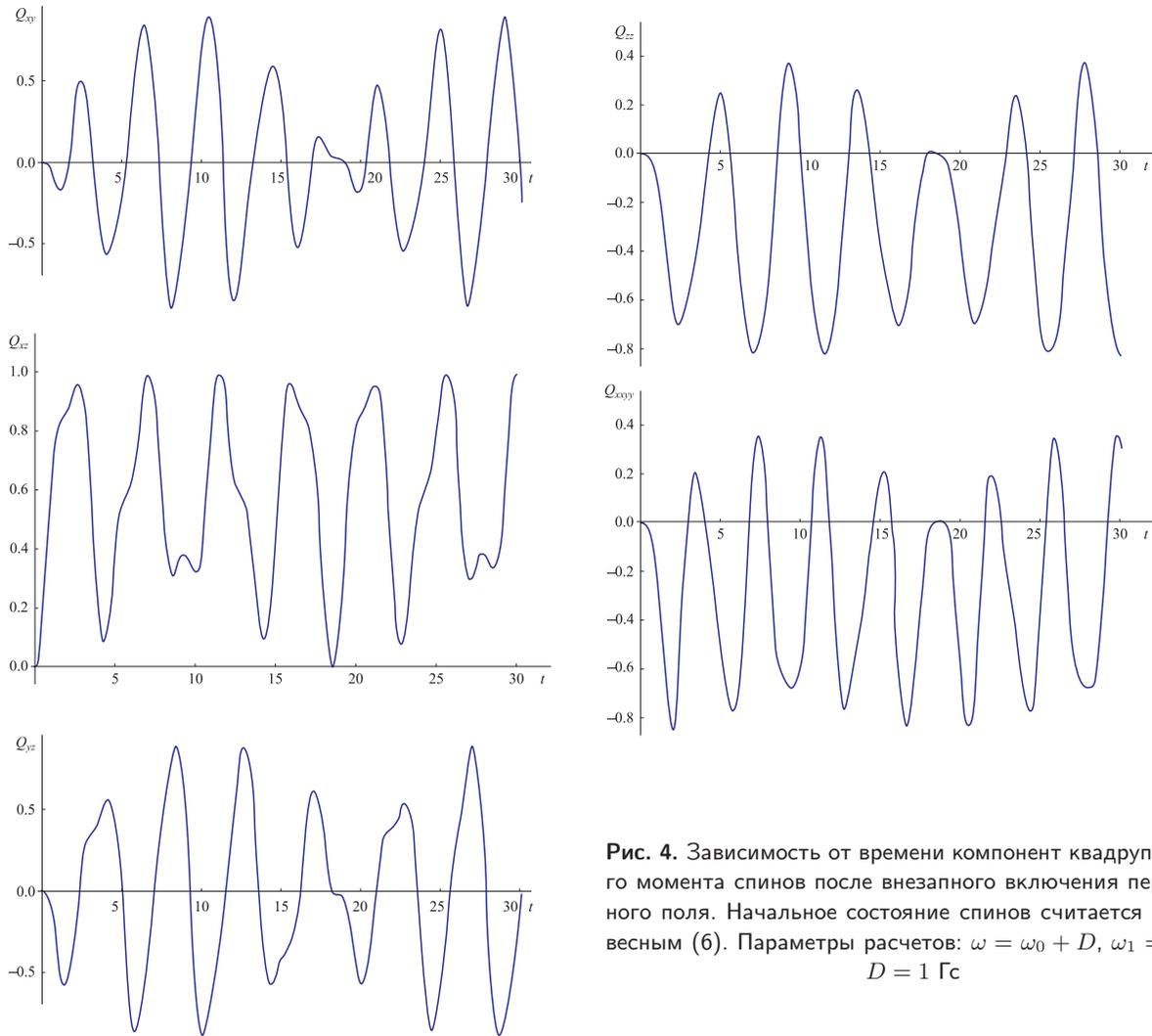


Рис. 4. Зависимость от времени компонент квадрупольного момента спинов после внезапного включения переменного поля. Начальное состояние спинов считается равновесным (6). Параметры расчетов: $\omega = \omega_0 + D$, $\omega_1 = 1$ Гс, $D = 1$ Гс

блюдаемых величин в момент $t = 0$, первые производные при $t = 0$ даются уравнениями (24).

Эти уравнения очень интересны тем, что по форме они совпадают с уравнениями связанных колебаний гармонических осцилляторов. Есть и одна особенность. Коэффициенты связи разных пар осцилляторов могут иметь разные знаки.

Очевидно, что для любой системы спинов со спин-гамильтонианом, который не изменяется со временем, для полного набора измеряемых на опыте физических величин можно записать аналогичную (25) систему уравнений связанных уравнений «гармонических осцилляторов».

В предельных случаях уравнения (23), (25) значительно упрощаются. Если расщепления в нулевом поле нет, в уравнениях (23), (25) надо положить $D = 0$. Тогда дипольный и квадрупольный моменты не обмениваются. Например, уравнения (25) для

дипольного момента дают

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \langle S_x \rangle}{\partial t^2} &= 0, \\ \frac{\partial^2 \langle S_y \rangle}{\partial t^2} &= -\omega_1^2 \langle S_y \rangle, \\ \frac{\partial^2 \langle S_z \rangle}{\partial t^2} &= -\omega_1^2 \langle S_z \rangle. \end{aligned} \tag{26}$$

Как и ожидалось, в этом случае вектор дипольного момента во вращающейся системе координат вращается в плоскости yz по окружности с частотой ω_1 , а в лабораторной системе координат совершает nutation Торри.

При наличии расщепления в нулевом поле движение вектора дипольного момента, согласно уравнениям (23), (25), происходит по гораздо более сложной траектории. Для демонстрации этого ниже приводятся результаты численного решения уравнений (23).

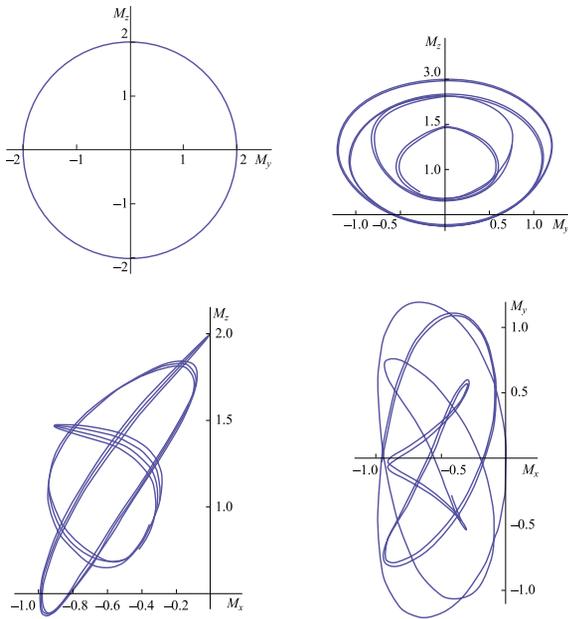


Рис. 5. Траектории движения конца вектора дипольного момента в проекции на разные плоскости, нарисованные на основе временных зависимостей, приведенных на рис. 3

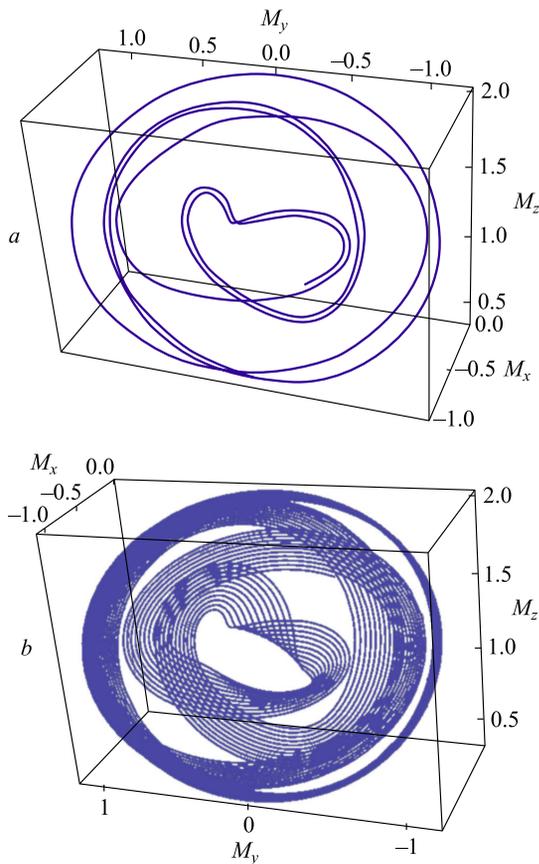


Рис. 6. Трехмерное представление движения вектора дипольного момента спина для $t = 30$ (a) и $t = 200$ (b). Параметры расчета те же, что на рис. 3

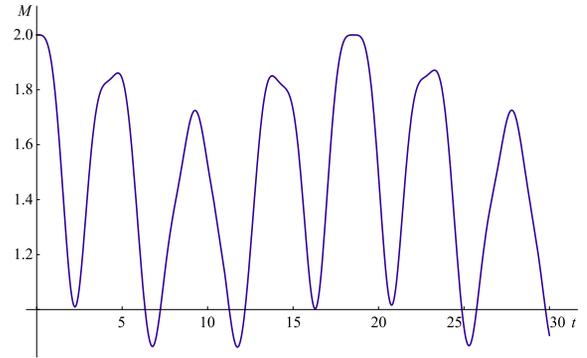


Рис. 7. Рассчитанная по данным рис. 3 зависимость от времени длины вектора дипольного момента намагниченности спина $M = \sqrt{M_x^2 + M_y^2 + M_z^2}$. Параметры расчета те же, что на рис. 3

3.2. Проявления расщепления в нулевом поле в «нутации» спина $S = 1$

«Нутация» спинов зависит от соотношения параметров ω_1 и D . В предельных случаях $\omega_1/|D| \gg 1$ и $\omega_1/|D| \ll 1$ в хорошем приближении движение вектора намагниченности является нутацией Торри соответственно с частотами ω_1 и $\sqrt{2}\omega_1$. Когда ω_1 и D сопоставимы, движение спина происходит гораздо более сложным образом. Для иллюстрации на рис. 3 приведены рассчитанные зависимости проекций дипольного момента (намагниченности) спина для $\omega_1 = 1$ Гс и $D = 1$ Гс.

Чтобы движение в рассматриваемом случае можно было бы описать нутацией Торри, проекции намагниченности во вращающейся системе координат должны были бы изменяться со временем с некоторой частотой нутации Ω_{nut} (см. выражение (12)) [1, 2].

Приведенные на рис. 3 кривые показывают, что динамику спинов никак нельзя описывать с одной частотой осцилляций проекций спинового момента. Рисунок 3 также четко демонстрирует, что во временной зависимости проекций проявляется биение частот. Для данного конкретного набора параметров основной вклад вносят два колебания с разными частотами.

Для демонстрации обратимого взаимопревращения дипольного и квадрупольного моментов спинов в условиях нутации на рис. 4 приведена временная зависимость компонент квадрупольного момента для тех же значений параметров системы, для которых на рис. 3 приведены временные зависимости проекций дипольного момента.

Сравнение временных зависимостей дипольного (рис. 3) и квадрупольного (рис. 4) моментов пока-

зывает, что для выбранных параметров с периодом около 1 мкс происходит взаимопревращение дипольного и квадрупольного моментов.

Сильное отличие траектории движения вектора конца вектора дипольного момента спина в пространстве для рассматриваемого набора параметров, найденной из решения уравнения (23), с одной стороны, от траектории, ожидаемой по теории Торри, с другой стороны, наглядно выражают параметрические кривые проекций этих траекторий на разные плоскости (рис. 5) и трехмерное представление (рис. 6).

Для сравнения на рис. 5 приведена также проекция на плоскость yz в случае, если бы проекции дипольного момента на оси задавались уравнениями (12), которые соответствуют нутации Торри, она является окружностью (см. кривую в верхнем ряду слева). В случае нутации Торри (12) проекции на плоскости xu или xz вырождаются в линию на оси y или z , соответственно. Наилучшее представление о движении вектора дипольного момента дает его трехмерное представление (см. рис. 6).

Отметим, что в отсутствие расщепления в нулевом поле (при $D = 0$) реализуется нутация Торри. На рис. 3, 5 и 6 хорошо видно, что включение расщепления в нулевом магнитном поле B_0 принципиально изменяет траекторию движения конца вектора дипольного момента спина.

Это очевидно. Но приведенные результаты расчета позволяют сделать еще одно менее очевидное, но важное наблюдение. Выясняется, что со временем изменяется не только направление вектора дипольного момента, но и длина этого вектора. Используя данные на рис. 3, с помощью формулы

$$M = \sqrt{M_x^2 + M_y^2 + M_z^2}$$

можно рассчитать длину этого вектора в любой момент времени (рис. 7). Этот рисунок показывает, что проявляются колебания как минимум с двумя частотами, так как явно виден эффект биения колебаний.

Колебания длины вектора дипольного момента при наличии расщепления в нулевом поле ($D \neq 0$) объясняются обратимыми превращениями дипольного и квадрупольного моментов, которые описываются уравнениями (23).

Наблюдаемая «нutation» вектора намагниченности зависит от начального состояния спинов. Приведенные выше численные расчеты были проведены для ситуации, когда в момент внезапного включения переменного поля спины находятся в термо-

динамическом равновесии (см. (6)). Но как уже отмечалось, начальное состояние спинов может быть неравновесным. Например, при фотовозбуждении органических молекул нередко молекулы в триплетном возбужденном состоянии находятся в состоянии с большим квадрупольным спиновым моментом [4, 5]. Решая уравнения (3) при начальном состоянии с ненулевой компонентой квадрупольной поляризации спинов, $\rho(0) = S_z^2$, находим проекции дипольного момента. Результаты показаны на рис. 8.

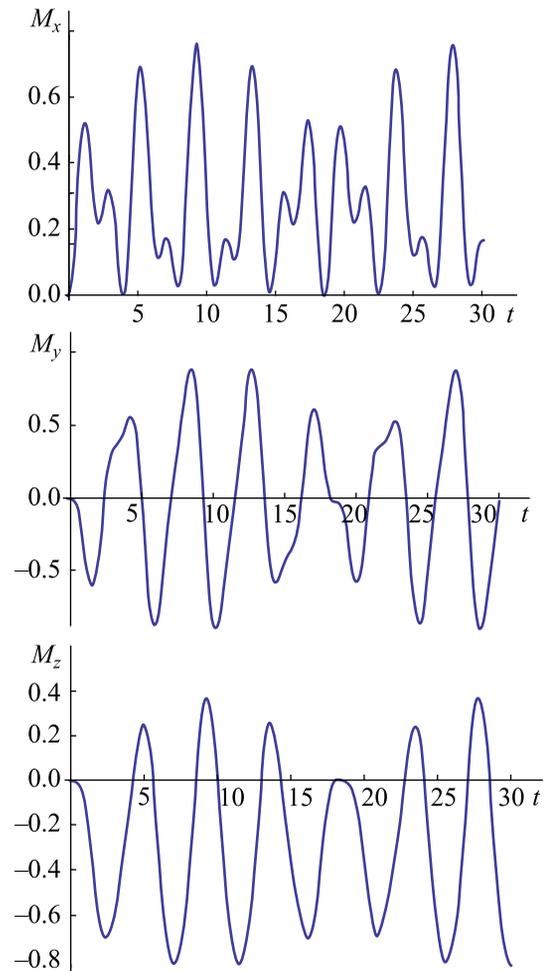


Рис. 8. Зависимости от времени проекций намагниченности спинов после внезапного включения переменного поля. Начальное состояние спинов считается равным $\rho(0) = S_z^2$. Параметры расчетов: $\omega = \omega_0 + D$, $\omega_1 = 1$ Гс, $D = 1$ Гс

Результаты, приведенные на рис. 3 и рис. 8, различаются только тем, что они получены для разных начальных состояний спинов. В случае рис. 3 в начальный момент спины имеют только дипольную поляризацию, а в случае рис. 8 отлична от нуля только квадрупольная поляризация. Видно, что временное поведение наблюдаемого в опыте спиново-

го дипольного момента очень сильно зависит от начального состояния спинов. Можно отметить, что на рис. 3 в начальный момент z -проекция намагниченности имеет наибольшее значение, а в условиях рис. 8 все проекции дипольного момента стартуют с нулевого значения. В обоих случаях наблюдаемая проекция дипольного момента является суммой вкладов осциллирующих слагаемых. Но эти осцилляции с разными частотами могут входить с совершенно разными амплитудами в наблюдаемую величину.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучение отклика системы спинов на внезапное включение переменного магнитного поля («нутация») позволяет, в принципе, определить все магнитно-резонансные параметры спинов. Регистрация «нутации» может быть хорошим методом для определения суммарного спина электронов парамагнитных частиц. Несмотря на большой потенциал этот метод довольно редко используется, например, в ЭПР-спектроскопии. В какой-то мере это можно объяснить тем, что теория «нутации» не привлекла достаточного внимания. На самом деле сегодняшний уровень теории спиновой динамики позволяет численно симулировать ожидаемую «нутацию» спинов во многих ситуациях.

Целью работы было выявить некоторые общие свойства динамики спинов при их «нутации». Чтобы облегчить задачу, мы не рассматривали эффект парамагнитной релаксации спинов, а сосредоточились на анализе динамики спинов с учетом спин-спинового взаимодействия и взаимодействия спинов с внешним переменным магнитным полем произвольной мощности. Рассмотрение было проведено в двух представлениях: с использованием квантовой механики в формулировке Шредингера и в формулировке Гейзенберга. В формулировке Шредингера полное описание спиновой системы дается волновой функцией (или матрицей плотности). По Гейзенбергу состояние системы задается полным набором измеримых на опыте физических величин систем. Оба подхода в конечном итоге приводят к совершенно одинаковым результатам. Но на промежуточных стадиях они оперируют разными понятиями, используют разный «язык». Разные подходы позволяют лучше понять то, что происходит со спинами в ходе их движения в тех или иных условиях, в частности, при «нутации».

Традиционно квантовая теория «нутации» строится с использованием подхода Шредингера [5, 6, 13]. Тогда сложный сигнал нутации, который представляет собой сумму вкладов, осциллирующих с разными частотами, интерпретируется как проявление разных одноквантовых и многоквантовых когерентностей. В этой работе показано, что подход Гейзенберга позволяет интерпретировать сложное поведение сигнала «нутации» по-другому и дает более наглядное описание поведения наблюдаемого сигнала. В экспериментах по «нутации» измеряемой величиной обычно является одна из проекций дипольного момента спинов. Однако в системе взаимодействующих между собой спинов дипольные моменты спинов не дают полного описания состояния спинов. Наряду с дипольной поляризацией спинов надо учитывать соответствующие мультипольные поляризации (моменты) спинов. Когда спин-спиновые взаимодействия успевают проявить себя в интервале переходного режима «нутации», во временной зависимости намагниченности помимо собственно нутации дипольного момента в магнитных полях проявляются, с одной стороны, периодические изменения величины дипольного момента за счет его обратимого превращения в мультипольные моменты и, с другой стороны, периодические изменения компонент мультипольных моментов.

Результаты данной работы позволяют сформулировать следующие заключения.

1. Уравнения Блоха не могут быть использованы для описания «нутации» взаимодействующих спинов (включая расщепление спиновых уровней энергии в нулевом магнитном поле).
2. «Нутация» дипольного момента спинов с учетом спин-спинового взаимодействия не может быть сведена к нутации Торри, в принципе.
3. «Нутация» спинов при наличии спин-спинового взаимодействия не может быть понята без учета мультипольных моментов спинов.
4. Для спина $S = 1$ в явном виде получена система связанных линейных дифференциальных уравнений для проекций дипольного магнитного момента и компонент квадрупольного магнитного момента. Эти уравнения в явной форме показывают, что в условиях «нутации» происходят обратимые превращения дипольного момента (вектора намагниченности) и мультипольных моментов спиновой системы.
5. В условиях «нутации» длина вектора намагниченности не остается постоянной даже без учета парамагнитной релаксации.

В этой работе рассматриваются изолированные системы спинов, в которых параметры спин-гамильтониана являются заданными константами, и не рассматривается вклад парамагнитной релаксации в движение спинов. Поэтому результаты этой работы относятся прежде всего к парамагнитным центрам в твердых матрицах. Полученные в данной работе результаты открывают новые горизонты в применении «нutation» спинов для исследования спиновой динамики, в развитии импульсной ЭПР-спектроскопии, в частности, в квантовых вычислениях и квантовой информатике с использованием электронных спинов в качестве кубитов.

Благодарности. Мой интерес к этой проблеме был вызван теми экспериментами, которые проводят мои коллеги Р. Б. Зарипов, А. А. Суханов, В. Ф. Тарасов в нашем институте. Р. Т. Галееву и А. Г. Марьясову я очень благодарен за многочисленные полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. C. Torry, *Phys. Rev.* **76**, 1059 (1949).
2. R. R. Ernst, G. Bodenhausen, and A. Wokaun, *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*, Clarendon Press, Oxford (1987).
3. I. J. Lowe and R. E. Norberg, *Phys. Rev.* **107**, 46 (1957).
4. A. V. Astashkin and A. Schweiger, *Chem. Phys. Letters*, **174**, 595 (1990).
5. A. Schweiger and G. Jeschke, *Principle of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, University Press, Oxford (2001).
6. S. S. Kim and S. I. Weissman, *J. Magn. Reson.* **24**, 167 (1976).
7. R. Furrer, E. Fujara, C. Lange et al., *Chem. Phys. Lett.* **75**, 332 (1980).
8. R. Hanaishi, Ya. Ohba, K. Akiyama et al., *J. Chem. Phys.* **103**, 4819 (1995).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2004).
10. R. Janssen and W. S. Veeman, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1*, **84**, 3747 (1988).
11. Г. М. Жидомиров, К. М. Салихов, *ЖЭТФ* **56**, 1933 (1969).
12. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
13. H.-J. Stoeckmann and D. Dubbers, *New J. Phys.* **16**, 1 (2014).
14. К. М. Салихов, F. S. Sarvarov, and R. Z. Sagdeev, *Chem. Phys.* **16**, 41 (1976).
15. К. М. Салихов, Yu. N. Molin, R. Z. Sagdeev, and A. L. Buchachenko, *Spin Polarization and Magnetic Effects in Radical Reactions*, Academic Kiado Budapest, Elsevier Amsterdam (1984).

ОПТИЧЕСКАЯ БИСТАБИЛЬНОСТЬ И НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ РАССЕЯНИИ СВЕТА НА КОНЕЧНОМ ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ С НЕЛИНЕЙНОЙ РЕЗОНАНСНОЙ ПОЛОСТЬЮ

Г. В. Шадрина ^{a,b*}, Е. Н. Булгаков ^b

^a *Институт вычислительного моделирования, ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 30 мая 2022 г.,
после переработки 10 июня 2022 г.
Принята к публикации 13 июня 2022 г.

Исследовалась оптическая бистабильность и явление нарушения симметрии в системе связанных фотонно-кристаллических микрорезонаторов с включением из материала с керровской восприимчивостью при падении плоской волны. Для этой цели предложено обобщение модального метода Т-матрицы на случай нелинейных микрорезонаторов, поддерживающих одну монополющую моду. Показано, что оба явления существенно зависят не только от интенсивности внешнего поля, но и от угла падения и размера фотонного кристалла. Обнаружены и исследованы различные режимы возбуждения.

DOI: 10.31857/S0044451022110049
EDN: KYGQJZ

ли [7–13], диоды и транзисторы, генерация гармоник [14–17].

1. ВВЕДЕНИЕ

Нелинейное распространение света в периодических структурах является привлекательной областью исследований и приложений. Для многих важных приложений желательно иметь сильное и почти мгновенное взаимодействие света со светом в минимальном объеме. Это может быть достигнуто с использованием нелинейных материалов в фотонно-кристаллических структурах. Фотонные кристаллы (ФК) обладают так называемой полной запрещенной щелью, что позволяет создавать на их основе простые и разветвленные волноводные структуры, резонансные микрополости, за счет чего удается эффективно управлять линейным и нелинейным распространением света [1–6]. Наиболее яркими примерами приложений нелинейных эффектов в ФК-структурах являются оптические переключате-

Оптическая бистабильность (ОБ) — классическое нелинейное оптическое явление [18], которое интенсивно изучается последние десятилетия. Простейшая нелинейная среда — это керровская среда, когда нелинейные эффекты моделируются добавлением члена, пропорционального квадрату электрического поля, к линейной диэлектрической константе. ОБ в микроструктурах [19–23] является основой для различных приложений, позволяющих управлять светом с помощью света, таких как оптические переключатели, оптические диоды и транзисторы, оптическая память [24]. ОБ на наномасштабах есть ключевая компонента интегрированных нанофотонных устройств. Однако нелинейный коэффициент чрезвычайно мал, и для достижения необходимого результата нужна либо большая величина падающего поля, либо большие размеры устройства для накопления эффекта. Ясно, что такие устройства неприемлемы для нанофотоники. Один из путей преодоления указанной проблемы — это усиление нелинейных эффектов за счет значительного усиления локального поля по сравнению с падаю-

* E-mail: galiiy_sha@mail.ru

щим. Для этой цели обычно используют фотоннокристаллические микрорезонаторы с высокой добротностью. Локальное поле усиливается в \sqrt{Q} раз. Строгий анализ [25] показывает, что в оценку порога бистабильности входит также модальный объем (объем пространства, занимаемый резонансной модой V) $P \sim V/(n_2 Q^2)$. В принципе, подходят любые моды с большим Q , но наиболее желательными являются моды, у которых $Q \rightarrow \infty$, а частота остается фиксированной. По этой причине простейшие резонаторы в виде диэлектрической сферы не очень подходят для наблюдения ОБ [22], так как при $Q \rightarrow \infty$ частота моды также стремится к бесконечности.

Интересным альтернативным подходом, открытым совсем недавно, для увеличения добротности в диэлектрических системах является использование связанных состояний в континууме (ССК), а именно неизлучающих состояний, погруженных в континуум состояний рассеяния [26]. Существенным моментом в использовании ССК является тот факт, что истинные ССК поддерживаются лишь периодическими наноструктурами, протяженными как минимум в одном пространственном измерении. Сами по себе ССК не взаимодействуют с электромагнитным излучением, падающим на систему, однако ближайшие в спектре моды обладают сколь угодно высокой добротностью. Это дает возможность наблюдать в присутствии нелинейности фактически беспороговые мультистабильные состояния и состояния с нарушенной симметрией, а также эффективно использовать такие микроструктуры для генерации гармоник [27–35].

В целом это многообещающее направление — нелинейное рассеяние света за счет ССК — находится пока на начальной стадии развития. При всей привлекательности использования ССК-структур они являются бесконечно протяженными. В реальности, если структура имеет N периодов, Q -фактор становится конечным и ведет себя по закону N^α (как правило $\alpha \sim 2 \div 3$), и обычно для достижения $Q \sim 10^6$ требуется порядка 100 периодов [36].

Другим интересным фундаментальным аспектом физики нелинейных оптических систем является явление нарушения симметрии (ЯНС). ЯНС возникает в симметричных нелинейных системах. Обычно несимметричная мода возникает при нелинейном взаимодействии близко расположенных по частоте мод разной симметрии. ЯНС, например, наблюдалось при распространении встречных пучков, падающих на нелинейную керровскую среду [37].

В нанофотонике это явление также наблюдалось в ФК-волноводных структурах, при взаимодействии распространяющейся волноводной моды с нелинейными резонансными дефектными модами [38–44], и в дифракционных решетках [28, 29]. Обычно ОБ и ЯНС сосуществуют в одной области параметров, но порог возникновения ОБ меньше. В качестве приложения ЯНС предлагалось использовать для резонансного переключения светового потока между ФК-волноводами [40].

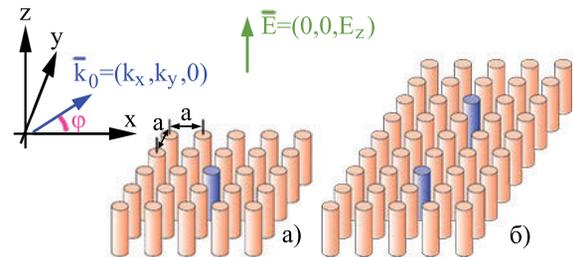


Рис. 1. ФК-структура, вид сбоку. а) Структура с одной микрополостью. б) Структура с двумя микрополостями, здесь дефектные цилиндры разделены тремя слоями обычных

В данной работе мы предлагаем простой дизайн оптической микроструктуры, отличный от ранее исследованного в литературе [7–13], для которого электромагнитное поле, возбуждающее нелинейный микрорезонатор, подается и рассеивается в присоединенные ФК-волноводы, что является оправданным, если сама микроструктура является элементом, интегрированным с другими микроустройствами по обработке сигналов. Однако для наблюдения ОБ волноводные каналы оказываются излишними. В нашем случае микроструктура представляет собой фотонный кристалл конечных размеров, внутри которого заключена одна или несколько взаимодействующих резонансных микрополостей, в центре каждой помещен диэлектрический цилиндр из керровского материала (нелинейный микрорезонатор), как это представлено на рис. 1. На микроструктуру падает плоская электромагнитная волна, которая непосредственно, благодаря конечной толщине окружающих стенок из цилиндров, взаимодействует с монопольной модой микрорезонатора. Расчет электромагнитного поля при рассеянии света на нелинейной среде представляет собой сложную проблему, для решения которой используются разные

подходы [6, 21, 22, 38, 45–47]. Как правило, ограничиваются двумерными моделями. Например, в случае ФК-пластины (мембраны), состоящей из периодически расположенных диэлектрических цилиндров конечной высоты, электромагнитное поле имеет все ненулевые компоненты. Собственные моды классифицируются как ТЕ-подобные и ТМ-подобные [25], которые при увеличении толщины пластины (высоты цилиндров) переходят в обычные двумерные ТЕ- и ТМ-моды. Использование двумерной модели для расчета ФК-мембраны является оправданным приближением, если толщина достаточно велика, по крайней мере, превышает период в несколько раз. Ситуация еще более усложняется, если сама мембрана имеет конечные размеры в плоскости. В этом случае расчет электромагнитного поля возможен только с использованием прямых численных алгоритмов, например, метода конечных элементов, либо очень изоциренных полуаналитических подходов [48]. Ситуация, когда в системе присутствует нелинейность, делает проблему практически неразрешимой. Поэтому разумные упрощения необходимы. В данной работе мы считаем цилиндры достаточно протяженными, чтобы считать проблему двумерной, кроме того, то обстоятельство, что диэлектриками являются именно цилиндры, дает возможность использовать для расчета мощный метод Т-матрицы [49, 50]. Нам удалось преодолеть очевидную трудность включения нелинейности в метод Т-матрицы хотя бы для случая монополярной резонансной моды с достаточно большим Q-фактором. Благодаря этому подходу, описанному в Приложении, нам удалось свести задачу к решению системы нелинейных алгебраических уравнений, что существенно облегчило численные расчеты. Нами исследовались явления оптической бистабильности и нарушения симметрии при рассеянии плоской волны при различных углах падения. Оба явления наблюдаются при низкой мощности падающей волны и сильно зависят от угла падения.

2. ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ С КЕРРОВСКИМ ДЕФЕКТОМ

Фотонный кристалл, который мы исследуем, представляет собой $2d$ -периодическую структуру, состоящую из бесконечных вдоль оси z диэлектрических цилиндров (рис. 1), центры которых образуют квадратную решетку. Хорошо известно [25] (рис. 2), что данная структура обладает полной запрещенной щелью в спектре в случае ТМ-поляризованного из-

лучения. Благодаря щели можно создавать локализованные резонансные полости, которые поддерживают локализованные моды разной симметрии — монополярные, дипольные и т.д.

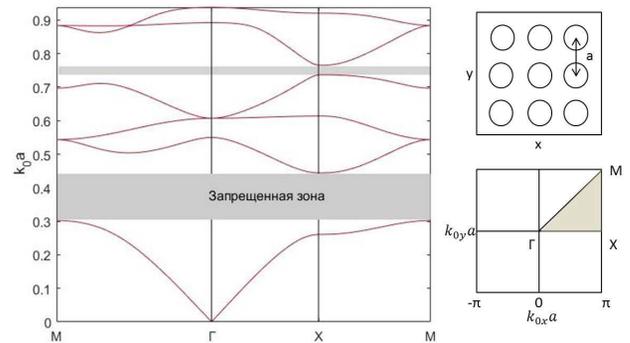


Рис. 2. Зонная структура для ТМ-поляризованного излучения (электрическое поле направлено вдоль оси стержней) для квадратной решетки цилиндрических диэлектрических стержней (радиус стержня $r/a = 0.18$ и $\epsilon = 11.56$, постоянная решетки a) в воздухе

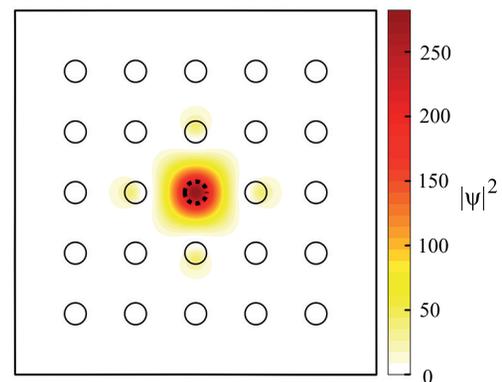


Рис. 3. Монополярная мода частоты $k_0 a = 0.3588$, локализованная на центральном дефектном цилиндре с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_0 = 3$, для остальных цилиндров ФК $\epsilon = 11.56$

Резонансная полость — микрорезонатор — появляется, если один из цилиндров заменить на дефектный цилиндр, у которого либо другой радиус, либо другая диэлектрическая проницаемость. Пример локализованной моды в микрорезонаторе показан на рис. 3. В нашем случае мы будем изменять только диэлектрическую проницаемость дефектного цилиндра, оставляя радиус постоянным. В этом случае возможна только монополярная локализованная мода, частота которой зависит от ϵ_0 (рис. 4) и которая

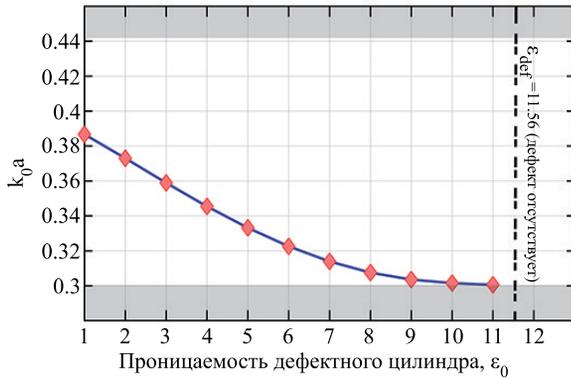


Рис. 4. Частота локализованной моды в зависимости от диэлектрической проницаемости ϵ_0 (радиус стержней $r/a = 0.18$ и $\epsilon = 11.56$)

расположена строго в запрещенной щели. В случае бесконечного ФК данная мода является незатухающей и обладает бесконечной добротностью. Однако если ФК имеет конечные размеры (несколько слоев вдоль направлений x и y), добротность резонансной моды становится конечной благодаря утечке электромагнитного излучения в радиационный континуум окружающего пустого пространства. Добротность резонансной моды тем выше, чем больше количество слоев, отделяющих резонансную полость от окружающего пространства (рис. 5). Как показывает рисунок, добротность экспоненциально быстро возрастает и при размере ФК 7×7 цилиндров достигает $Q \sim 10^6$.

Если дефектный цилиндр изготовлен из материала, у которого проницаемость ϵ_0 является константой (т.е. не зависит от амплитуды поля), то при рассеянии внешней плоской волны можно наблюдать резонансное рассеяние света при частоте, близкой к частоте локализованной моды. При строгом резонансе амплитуда электрического поля в полости резко повышается пропорционально \sqrt{Q} . Резонансное усиление электрического поля, как известно, является условием усиления нелинейных эффектов и наблюдения ОБ. В данной работе мы предполагаем, что дефектный цилиндр изготовлен из материала с керровской восприимчивостью, тогда показатель преломления

$$n = n_0 + n_2 I, \quad I = \frac{c}{8\pi} |\mathbf{E}|^2.$$

Уравнение для E_z -компоненты электрического поля в случае ТМ-моды имеет вид

$$\nabla^2 E_z(x, y) + \epsilon k_0^2 E_z(x, y) = 0. \quad (1)$$

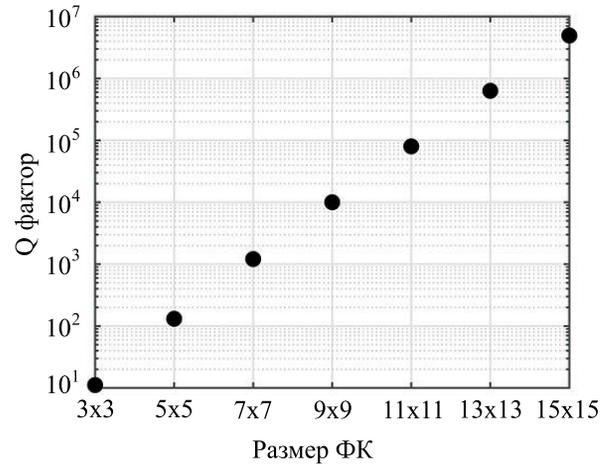


Рис. 5. Добротность резонансной моды в микрорезонаторе как функция размера ПК. Диэлектрическая проницаемость цилиндров такая же, как на рис. 3

Переходя к безразмерным величинам, перепишем уравнение (1) как

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi(x, y) + k_0^2 (\epsilon_0 + \lambda |\psi(x, y)|^2) \psi(x, y) &= 0, \quad (2) \\ k_0 &= \frac{\omega}{c} a, \quad \mathbf{r} \Rightarrow \frac{\mathbf{r}}{a}, \\ \lambda &= \frac{2n_0 n_2 c}{8\pi} |\mathbf{E}_0|^2, \quad \psi = \frac{E_z}{|\mathbf{E}_0|}, \quad (3) \end{aligned}$$

где \mathbf{E}_0 — напряженность поля внешней плоской волны $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, падающей на ФК-структуру, а a — период решетки ФК. Постоянную Керра n_2 в наших численных экспериментах выбираем равной $n_2 = 2 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{Вт}$, а $\epsilon_0 = 3$.

Уравнение (2) решалось численно, с использованием Т-модального метода, описанного в Приложении.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

На рис. 6 представлены результаты численного расчета возбуждения одной резонансной полости (рис. 3) в случае падения плоской волны под углом $\varphi = 0$ в зависимости от частоты внешнего поля $k_0 = \omega/c$ и нелинейной константы λ . Амплитуда ψ — это амплитуда возбуждения на нелинейном дефектном цилиндре. Кривые демонстрируют переход в бистабильное состояние при изменении λ . Как и ожидалось, переход происходит раньше для резонансной полости с большим Q -фактором. На рис. 7 показаны зависимости $|\psi|$ при резонансном возбуждении

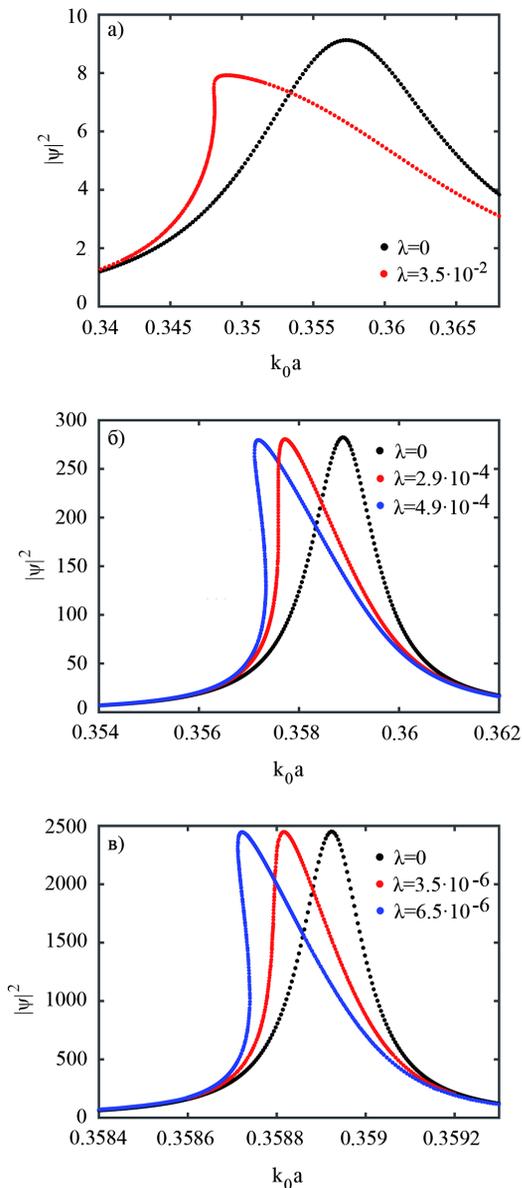


Рис. 6. Резонансное возбуждение электромагнитного поля на дефектном цилиндре $|\psi|$ для ФК разных размеров в зависимости от константы нелинейности λ . а) Для ФК 3×3 цилиндра существует пороговое значение константы нелинейности λ , при котором система переходит в режим бистабильности; б) для кристалла 5×5 цилиндров это событие наступает на два порядка раньше. в) Увеличение размеров ФК до 7×7 цилиндров приводит к еще большему уменьшению порогового значения λ

полости при фиксированной частоте, но с изменяющейся нелинейной константой λ . Надо отметить, что зависимости на рис. 6,7 являются довольно типичными для керровской неустойчивости, и бистабильность наступает при изменении потока мощно-

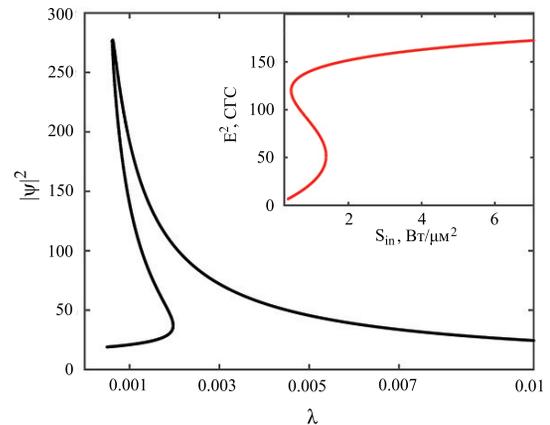


Рис. 7. Зависимость относительной амплитуды поля $|\psi|$ на дефектном цилиндре от константы нелинейности λ для кристалла размером 5×5 цилиндров при $k_0a = 0.35587$. Вставка: тот же график пересчитан в размерных величинах для нелинейности на центральном цилиндре $n_2 = 2 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{Вт}$

сти внешней волны (см. вставку на рис. 7), поскольку n_2 — фиксированная величина.

Однако в нашем случае появляется еще один параметр, который позволяет управлять переходом в бистабильный режим — это угол φ , угол падения плоской волны на ФК. Действительно, как показывает рис. 8, бистабильное решение сильно зависит от угла падения. И более того, от угла падения φ зависит сам порог перехода в бистабильный режим (рис. 9), причем эта зависимость носит крайне выраженный характер — порог может изменяться в три раза. На рис. 10 приводится решение при фиксированной мощности внешней волны как функция угла падения. Интересным наблюдением является тот факт, что бистабильность при разной мощности волны (фиолетовая и красная линии) существует при разных углах падения, причем области существования ОБ не перекрываются.

Перейдем к рассмотрению более сложного случая — две близко расположенные одинаковые резонансные полости. Прежде всего сфокусируемся на явлении нарушения симметрии решения для электрического поля при симметричном падении плоской волны ($\varphi = 0$). На рис. 11а представлен случай, когда между дефектными цилиндрами находится два слоя обычных цилиндров. Черной линией показано решение с ненарушенной симметрией (резонансные полости возбуждаются одинаково), линия с двумя цветами (синий и фиолетовый) показывает решение с нарушенной симметрией (полости воз-

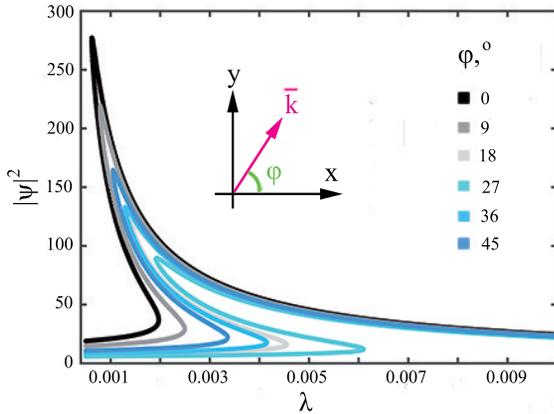


Рис. 8. (В цвете онлайн) Зависимости относительной амплитуды поля $|\psi|^2$ на дефектном цилиндре от константы нелинейности λ при разных углах падения внешней волны с частотой $k_0a = 0.35587$ для кристалла 5×5 цилиндров

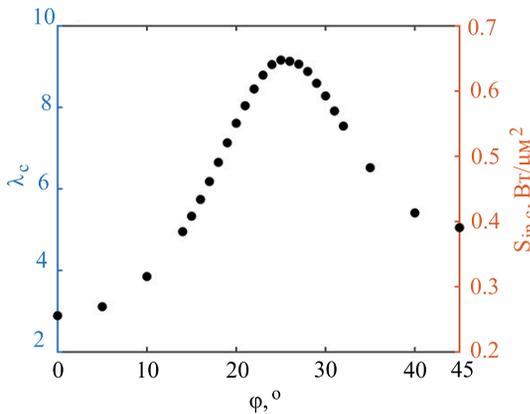


Рис. 9. Критическое (пороговое для наступления ОБ) значение константы нелинейности λ (левая ось) и критическая мощность внешней волны S_{in} (правая ось) в зависимости от угла падения на кристалл размера 5×5 при частоте $k_0a = 0.35759$

буждаются неодинаково), причем разными цветами показаны разные решения. Стоит отметить, что во всех рассмотренных нами случаях ЯНС наступает, как правило, после появления ОБ и очень сильно изменяется при изменении мощности внешней волны (серповидная кривая очень быстро увеличивается в размере). На рис. 11б построены решения для амплитуд $|\psi|^2$ возбуждения полостей, когда число изолирующих слоев равно 3. Как видно, характер решения резко поменялся — теперь ЯНС-решения строго изолированы от решений не нарушающих симметрию. На рис. 12 детально показано, как возбужда-

ются резонансные полости в случае разных решений. На рис. 13 представлены пороги для появления

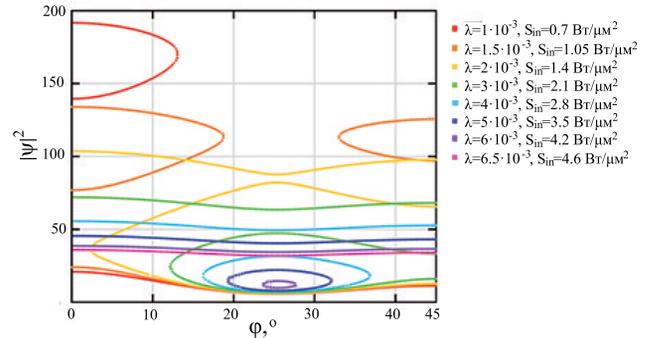


Рис. 10. (В цвете онлайн) Зависимости относительной амплитуды поля $|\psi|^2$ на дефектном цилиндре от угла падения внешней волны ϕ на кристалл 5×5 цилиндров при разных константах нелинейности λ на частоте $k_0a = 0.35587$. Справа от λ в легенде показана мощность падающей волны, которая соответствует конкретному значению λ при $n_2 = 2 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{Вт}$

обычной ОБ (без нарушения симметрии) и ЯНС. Хотя величины могут отличаться даже в три раза, в целом порядок величин один и тот же, что позволяет нам сделать вывод, что оба явления обычно сосуществуют примерно при одних и тех же значениях амплитуды внешнего поля. Этот момент не является столь очевидным, хотя и был продемонстрирован ранее в работе [41], когда источником возбуждения резонансных полостей являлись волноводные моды ФК.

Явление нарушения симметрии и оптическая бистабильность являются ярким примером управления света с помощью света на микроновых масштабах. Оба явления могут наблюдаться при умеренных значениях амплитуды внешнего поля, легко достигаемых на практике, если Q -фактор резонансной полости $Q \gtrsim 10^4 - 10^5$.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00070).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Опишем решение задачи о рассеянии плоской волны системой диэлектрических цилиндров с проницаемостью ϵ , используя Т-модальный метод [50].

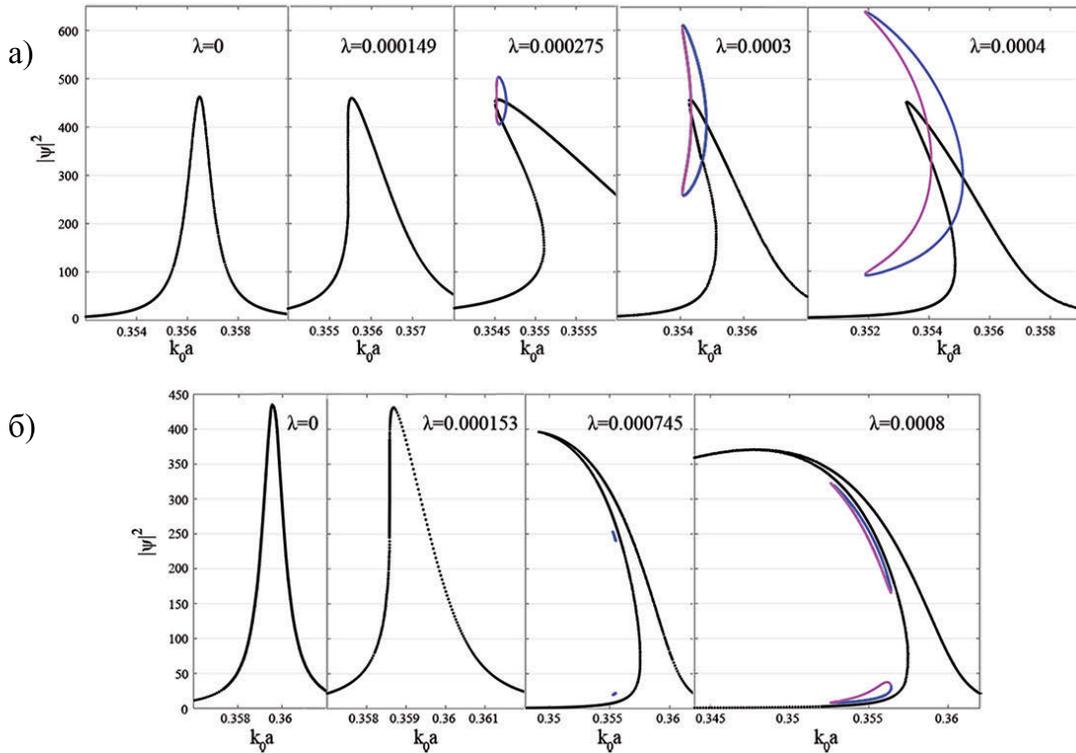


Рис. 11. (В цвете онлайн) Относительная амплитуда поля $|\psi|^2$ на двух дефектных цилиндрах для ФК размером: а) 5×8 цилиндров, дефектные цилиндры разделены двумя обычными; б) 5×9 цилиндров, как на рис. 16. Черным цветом обозначены симметричные решения, фиолетовым и синим — с нарушенной симметрией

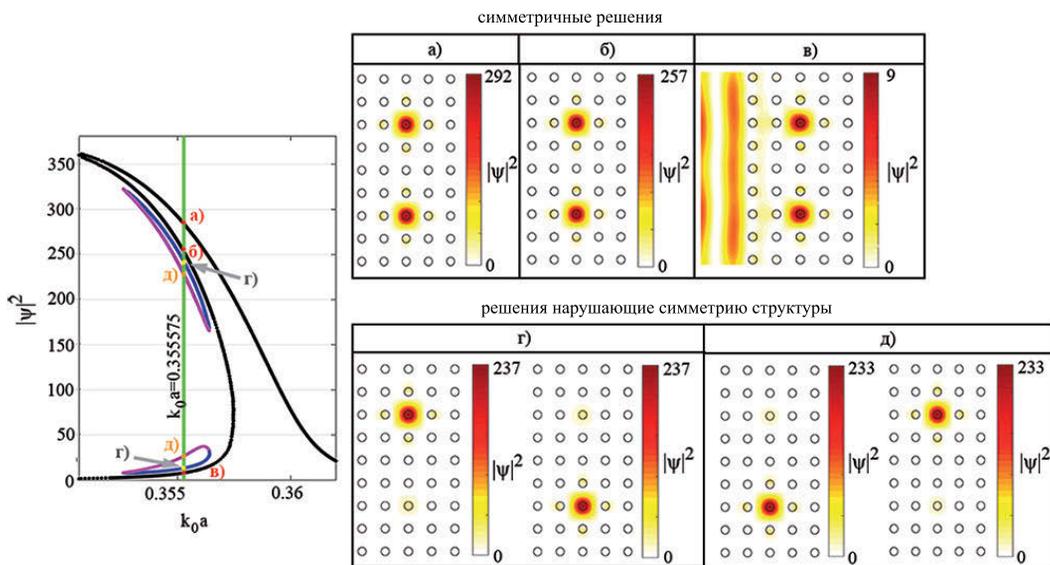


Рис. 12. (В цвете онлайн) Варианты возбуждения двух керровских полостей в ФК 5×9 цилиндров на длине волны $k_{0a} = 0.355575$. Волновые функции в верхней части рисунка симметричны, волновые функции в нижней части рисунка обладают нарушенной симметрией

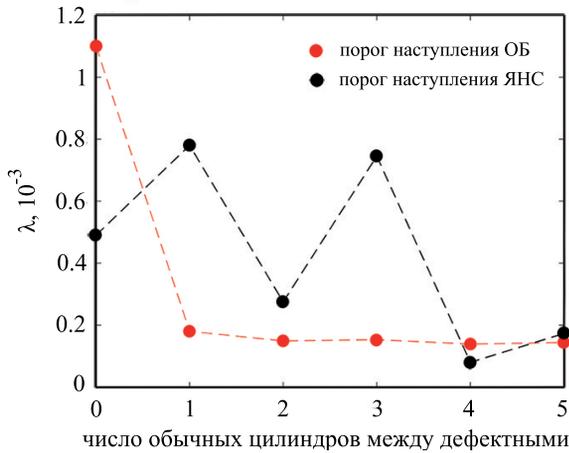


Рис. 13. (В цвете онлайн) Пороги наступления оптической бистабильности и явления нарушения симметрии для кристаллов разных размеров

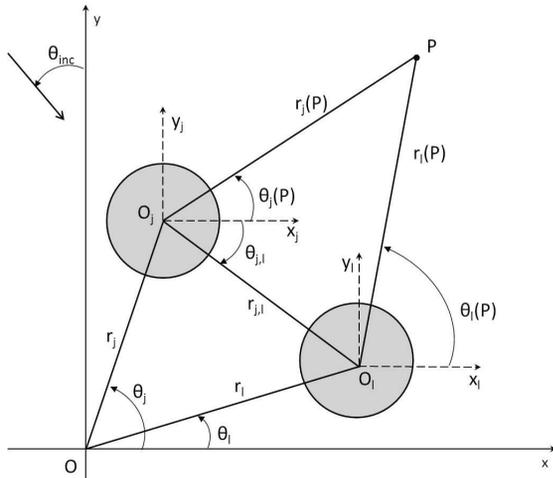


Рис. 14. Глобальная xu и локальные x_jy_j, x_iy_i системы координат

При изложении материала следуем работе [49]. Электрическое поле в Т-методе разлагается по цилиндрическим гармоникам как внутри, так и вне j -го цилиндра в локальной системе координат

(см. рис. 14):

$$E_z = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_{jm} J_m(\sqrt{\epsilon} k_0 r_j) e^{im\varphi_j}, \quad r_j < R_j,$$

$$E_z = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} a_{jm} J_m(k_0 r_j) e^{im\varphi_j} + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_{jm} H_m^{(1)}(k_0 r_j) e^{im\varphi_j}, \quad r_j > R_j, \quad (4)$$

где $k_0 = \omega/c$. Коэффициенты a_{jm} — амплитуды гармоник падающего на j -й цилиндр поля, а b_{jm} — амплитуды рассеянного поля. Амплитуды a_{jm} представим в виде

$$a_{j,m} = a_{j,m}^{inc} + a_{j,m}^{rods}, \quad (5)$$

где

$$a_{j,m}^{inc} = (-1)^m e^{ik_0 R_j \sin(\theta_{inc} - \theta_j) - im\theta_{inc}} \quad (6)$$

— амплитуды падающей на систему плоской волны, R_j, θ_j — положение j -го цилиндра относительно глобальной системы координат. Амплитуды $a_{j,m}^{rods}$ представляют поле, рассеянное от остальных цилиндров $l \neq j$. Используя формулу Графа, можно связать амплитуды $a_{j,m}^{rods}$ и амплитуды рассеянных волн $b_{l,m} (l \neq j)$:

$$a_{j,m}^{rods} = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \sum_{l \neq j} b_{l,q} e^{i(m-q)\theta_{j,l}} H_{m-q}^{(1)}(k r_{j,l}). \quad (7)$$

Используя (5)–(7), получаем

$$\mathbf{a}_j = \mathbf{Q}_j + \sum_{l \neq j} \hat{T}_{j,l} \mathbf{b}_l, \quad (8)$$

где

$$a_{j,m} = (\mathbf{a}_j)_m, \quad (9)$$

$$b_{j,m} = (\mathbf{b}_j)_m, \quad (10)$$

$$(\mathbf{Q}_j)_m = (-1)^m e^{ik_0 R_j \sin(\theta_{inc} - \theta_j) - im\theta_{inc}}, \quad (11)$$

$$(\hat{T}_{j,l})_{m,q} = e^{i(q-m)\theta_{j,l}} H_{m-q}^{(1)}(k_0 r_{j,l}). \quad (12)$$

Чтобы замкнуть систему (8), используем связь амплитуд (\mathbf{b}_j) и (\mathbf{a}_j) через диагональную t -матрицу:

$$\mathbf{b}_j = \hat{t}_j \mathbf{a}_j, \quad (13)$$

$$\hat{t}_{m,m} = - \left(\sqrt{\epsilon} k_0 J_m(k_0 R) J'_m(k_0 \sqrt{\epsilon} R) - k_0 J_m(k_0 \sqrt{\epsilon} R) J'_m(k_0 R) \right) \times \left(\sqrt{\epsilon} k_0 H_m^{(1)}(k_0 R) J'_m(k_0 \sqrt{\epsilon} R) - k_0 J_m(k_0 \sqrt{\epsilon} R) H_m^{(1)'}(k_0 R) \right)^{-1}. \quad (14)$$

Приходим к системе линейных уравнений для амплитуд \mathbf{b}_j :

$$\mathbf{b}_j - \sum_{l \neq j} \hat{t}_j \hat{T}_{j,l} \mathbf{b}_l = \hat{t}_j \mathbf{Q}_j. \quad (15)$$

Если цилиндры обладают керровской нелинейной поправкой к диэлектрической проницаемости $\varepsilon = \varepsilon_0 + \lambda |E_z(\mathbf{r})|^2$, то формула (15) по-прежнему пригодна при условии, что нам известна связь между амплитудами $\mathbf{b}_j^{(nonlin)}$ и $\mathbf{a}_j^{(nonlin)}$ через нелинейную t -матрицу:

$$\mathbf{b}_j^{(nonlin)} = \hat{t}_j^{(nonlin)} \mathbf{a}_j^{(nonlin)}. \quad (16)$$

Существование такой связи в виде формулы (16) отнюдь не очевидно. Далее мы выведем явное выражение для $\hat{t}_j^{(nonlin)}$ при двух предположениях: 1) нелинейные цилиндры расположены только в резонансных полостях, 2) при резонансном рассеянии света, когда нелинейность начинает играть сколько-нибудь заметную роль, внутри каждой из полостей возбуждается монополярная мода, т.е. на нелинейном цилиндре доминирует s -рассеяние.

Уравнение для E_z -компоненты поля на нелинейном цилиндре в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + k_0^2 (\varepsilon_0 + \lambda |E_z(r, \varphi)|^2) \right] E_z(r, \varphi) = 0. \quad (17)$$

Волновую функцию ищем по-прежнему в виде ряда:

$$E_z(r, \varphi) = \sum_{m \in Z} \psi_m(r) e^{im\varphi}. \quad (18)$$

Уравнение (17) после подстановки (18) приближенно представляется в виде системы несвязанных уравнений

$$\psi_m'' + \frac{1}{r} \psi_m' + k_0^2 \left(\varepsilon_0 - \frac{m^2}{r^2} \right) \psi_m = 0, \quad m \neq 0, \quad (19a)$$

$$\psi_0'' + \frac{1}{r} \psi_0' + k_0^2 (\varepsilon_0 + \lambda |\psi_0|^2) \psi_0 = 0, \quad m = 0. \quad (19b)$$

Нелинейный член нужно учитывать только в уравнении на ψ_0 , в силу того что $|\psi_m| \ll |\psi_0|$ при резонансном s -рассеянии. В отсутствие же резонанса нелинейностью можно пренебречь. Таким образом, задача сводится к решению уравнения (19 b). Это можно сделать приближенно, по теории возмущений, учитывая то обстоятельство, что даже при резонансном рассеянии $\lambda |\psi_0|^2 \ll \varepsilon_0$.

Для этой цели сформулируем вспомогательную краевую задачу:

$$\begin{aligned} \psi(r)'' + \frac{1}{r} \psi(r)' + k_0^2 (\varepsilon_0 + \lambda |\psi(r)|^2) \psi(r) &= 0, \quad (20) \\ \psi(r=0) < \infty, \quad \psi(r=R) &= A. \end{aligned}$$

В дальнейшем считаем $\psi \equiv \psi_0$. Задача (20) может быть решена через функцию Грина $g(r)$:

$$\begin{aligned} r g''(r) + g' + \left(k_0^2 r - \frac{m^2}{r} \right) g(r) &= -\delta(r - \rho), \quad (21) \\ g(r=0) < \infty, \\ g(r=R) &= 0. \end{aligned}$$

Уравнение (21) имеет явное решение:

$$\begin{aligned} g(r, \rho) = \frac{\pi J_m(k_0 r_<)}{2 J_m(k_0 R)} \left(J_m(k_0 r_<) Y_m(k_0 R) - \right. \\ \left. - J_m(k_0 R) Y_m(k_0 r_>) \right), \quad (22) \end{aligned}$$

где $r_> = \max(r, \rho)$, $r_< = \min(r, \rho)$. Тогда уравнение (20) имеет формальное решение

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(r) = \int_0^R g(r, \rho) [k_0^2 \varepsilon_0 \rho A + \lambda k_0^2 \rho |\psi|^2 \psi] d\rho, \quad (23) \\ \tilde{\psi}(r) = \psi - A. \end{aligned}$$

Легко проверить, что

$$\begin{aligned} A \int_0^R g(r, \rho) k_0^2 \rho d\rho = A \frac{J_0(kr)}{J_0(kR)} - A, \quad (24) \\ k = \sqrt{\varepsilon_0} k_0, \end{aligned}$$

Так, при $\lambda = 0$ имеем

$$\tilde{\psi}(r) = A \left(\frac{J_0(kr)}{J_0(kR)} - 1 \right). \quad (25)$$

Поэтому интегральное уравнение (23) можно записать в виде

$$\psi(r) = \psi(r)_g + \lambda k_0^2 \int_0^R \rho |\psi(\rho)|^2 \psi(\rho) g(r, \rho) d\rho, \quad (26)$$

$$\psi(r)_g = A \frac{J_0(kr)}{J_0(kR)}.$$

В приближении $\lambda \rightarrow 0$ уравнение (26) приближенно можно решать методом итерации. В первом борновском приближении находим

$$\begin{aligned} \psi(r) \approx \psi(r)_g + \lambda k_0^2 \int_0^R \rho |\psi_g(\rho)|^2 \psi_g(\rho) g(r, \rho) d\rho = \\ = \psi(r)_g + \psi_{corr}(r). \quad (27) \end{aligned}$$

Поправочный член $\psi_{corr}(r)$ может быть приведен к виду

$$\begin{aligned} \psi_{corr}(r) &= \lambda k_0^2 \int_0^R \rho |\psi_g|^2 \psi_g g(r, \rho) d\rho = \\ &= \frac{\pi\gamma}{2k^2} J_0(kr) \left[\frac{Y_0(kr)}{J_0(kR)} \int_0^{kR} x J_0^4(x) dx - \right. \\ &\quad \left. - \int_0^R x Y_0(x) J_0^3(x) dx \right] - \\ &\quad - \lambda k_0^2 Y_0(kr) \int_0^{kr} x J_0^4(x) dx + \\ &\quad + \lambda k_0^2 J_0(kr) \int_0^{kr} x Y_0(x) J_0^3(x) dx, \quad (28) \\ \gamma &= \frac{\lambda k_0^2 |A| A}{J_0^3(kR)}. \end{aligned}$$

Заметим, что $\psi_{corr}(r = R) = 0$. Для сшивки решения внутри цилиндра (27) с внешним решением необходимо знание $\psi'_{corr}(r = R)$. Оно находится из уравнения (28):

$$\psi'_{corr}(r = R) = -\frac{\lambda}{\varepsilon_0} \frac{|A|^2 A}{R J_0^4(kR)} \int_0^{kR} x J_0^4(x) dx. \quad (29)$$

Следовательно, приближенное решение внутри цилиндра имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(r) &= \psi_g(r) + \psi_{corr}(r), \\ \psi(r = R) &= A, \\ \psi'(r = R) &= k \frac{J'_0(kR)}{J_0(kR)} A - \varkappa |A|^2 A, \quad (30) \\ \varkappa &= \frac{\lambda}{\varepsilon_0} \frac{1}{R J_0^4(kR)} \int_0^{kR} x J_0^4(x) dx. \end{aligned}$$

Теперь можно выполнить сшивку с внешним решением

$$\psi(r) = a_0 J_0(k_0 r) + b_0 H_0^{(1)}(k_0 r),$$

получаем

$$b_0 = t_0 a_0 - \frac{\varkappa |A|^2 A}{k_0 H_0^{(1)'}(k_0 R) - k \frac{J'_0(kR)}{J_0(kR)} H_0^{(1)}(k_0 R)}, \quad (31)$$

где t_0 — элемент t -матрицы при линейном рассеянии (14).

Чтобы исключить параметр A из выражения (31), можно взять его значение в линейной задаче ($\lambda = 0$):

$$A \approx b_0 \left[\frac{J_0(k_0 R)}{t_0} + H_0^{(1)}(k_0 R) \right] + O(\Lambda). \quad (32)$$

Тогда

$$t_0 a_0 = b_0 (1 + \Lambda |b_0|^2), \quad (33)$$

$$\Lambda = \frac{\varkappa \left| \frac{J_0(k_0 R)}{t_0} + H_0^{(1)}(k_0 R) \right|^2 \left(\frac{J_0(k_0 R)}{t_0} + H_0^{(1)}(k_0 R) \right)}{k_0 H_0^{(1)'}(k_0 R) - k \frac{J'_0(kR)}{J_0(kR)} H_0^{(1)}(k_0 R)}.$$

Итак, формула (33) задает необходимую связь между амплитудами a_0 и b_0 . В результате в нелинейном случае формула (15) приобретает вид

$$\begin{aligned} \left(1 + \Lambda \sum_{k \in N_k} |b_{k0}|^2 \hat{P}_k \right) \mathbf{b}_j - \sum_{l \neq j} \hat{t}_j \hat{T}_{jl} \mathbf{b}_l = \hat{t}_j \mathbf{Q}_j, \quad (34) \\ (\hat{P}_k b_j)_m = \delta_{jk} \delta_{0m} b_{j0}, \end{aligned}$$

где N_k — множество нелинейных цилиндров. Уравнение (34) — замкнутая система уравнений для амплитуд \mathbf{b}_j . В компьютерных вычислениях азимутальное число m пробегает конечный ряд значений $m \in [-M, -M + 1, \dots, +M]$.

ЛИТЕРАТУРА

1. D.N. Neshev, A.A. Sukhorukov, W. Krolikowski, Y.S. Kivshar, and S. Lan, *J. Nonlin. Opt. Phys. Mater.* **16**, 1 (2007).
2. J. Bravo-Abad, A. Rodriguez, P. Bermel, S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *Opt. Express* **15**, 16161 (2007).
3. A.R. McGurn and G. Birkok, *Phys. Rev. E* **69**, 235105 (2004).
4. A.E. Miroshnichenko, S.F. Mingaleev, S. Flach, and Y.S. Kivshar, *Phys. Rev. E* **71**, 036626 (2005).
5. K. Frizyuk, *J. Opt. Soc. Amer. B* **8**, F32 (2019).
6. A.R. McGurn, *Phys. Rev. B* **77**, 115105 (2008).
7. J. Bravo-Abad, S. Fan, S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *J. Light. Technol.* **25**, 2539 (2007).
8. M. Soljačić, E. Lidorikis, J.D. Joannopoulos, and L.V. Hau, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 171101 (2005).
9. D. Vujic and S. John, *Phys. Rev. A* **72**, 013807 (2005).
10. E. Bulgakov, K. Pichugin, and A. Sadreev, *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 395304 (2013).
11. X-S. Lin, W-O. Wu, H. Zhou, K-F. Zhou, and S. Lan, *Opt. Express* **14**, 2429 (2006).

12. S.F. Mingaleev and Y.S. Kivshar, *J. Opt. Soc. Amer.* **19**, 2241 (2002).
13. S.F. Mingaleev, A.E. Miroshnichenko, Y.S. Kivshar, and K. Busch, *Phys. Rev. E* **74**, 046603 (2006).
14. L. Yuan and Y.Y. Lu, *SIAM J. Appl. Math.* **80**, 864 (2020).
15. M. Bahl, N.C. Panoiu, and I.V. Iorsh, Jr, *Phys. Rev. E* **67**, 056604 (2003).
16. A. Rodriguez, M. Soljačić, J.D. Joannopoulos, and S.G. Johnson, *Opt. Express* **15**, 7303 (2007).
17. J. Wang, M. Clementi, M. Minkov, A. Barone, J.-F. Carlin, N. Grandjean, D. Gerace, S. Fan, M. Galli, and R. Houdré, *Optica* **7**, 1126 (2020).
18. H.M. Gibbs, *Optical Bistability: Controlling Light with Light*, Academic Press (1985).
19. F. Zhou, Y. Liu, Z.-Y. Li, and Y. Xia, *Opt. Express* **18**, 13337 (2010).
20. Y. Liu, F. Qin, Y. Xia, F. Zhou, and Z.-Y. Lia, *J. Appl. Phys.* **106**, 083102 (2009).
21. E.N. Bulgakov and A.F. Sadreev, *J. Opt. Soc. Amer. B* **29**, 2924 (2012).
22. M.M. Mazumder, S.C. Hill, D.Q. Chowdhury, and R.K. Chang, *J. Opt. Soc. Amer. B* **12**, 297 (1995).
23. M.F. Yanik, S. Fan, and M. Soljačić, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2739 (2003).
24. E.N. Bulgakov, K.N. Pichugin, and A.F. Sadreev, *Opt. Express* **23**, 20636 (2015).
25. J.D. Joannopoulos, S.G. Johnson, J.N. Winn, and R.D. Meade, *Photonic Crystals: Molding Flow of Light*, Princeton Univ. press (2008).
26. K. Koshelev, G. Favraud, A. Bogdanov, Y. Kivshar, and A. Fratallocchi, *Nanophotonics* **8**, 725 (2019).
27. D. Dolinina and A. Yulin, *Opt. Lett.* **45**, 3781 (2020).
28. S.D. Krasikov, A.A. Bogdanov, and I.V. Iorsh, *Phys. Rev. B* **97**, 224309 (2018).
29. A. Chukhrov, S. Krasikov, A. Yulin, and A.A. Bogdanov, *Phys. Rev. B* **103**, 214312 (2021).
30. L. Yuan and Y.Y. Lu, *Phys. Rev. A* **94**, 013852 (2016).
31. L. Yuan and Y.Y. Lu, *Phys. Rev. A* **95**, 023834 (2017).
32. L. Yuan and Y.Y. Lu, *Opt. Express* **23**, 20636 (2015).
33. Q. Yang, Y. Liu, X. Gan, C. Fang, G. Han, and Y. Hao, *IEEE Photon. J.* **12**, 4601209 (2020).
34. E.N. Bulgakov and D.N. Maksimov, *Sci. Rep.* **9**, 7153 (2019).
35. D.N. Maksimov, A.A. Bogdanov, and E.N. Bulgakov, *Phys. Rev. A* **102**, 033511 (2020).
36. E.N. Bulgakov and A.F. Sadreev, *Phys. Rev. A* **99**, 033851 (2019).
37. T. Peschel, U. Peschel, and F. Lederer, *Phys. Rev. A* **50**, 5153 (1994).
38. L. Yuan, *2015 IEEE Int. Conf. on Computational Electromagnetics (2015)*, p. 212.
39. L. Yuan and Y.Y. Lu, *Opt. Express* **22**, 30128 (2014).
40. B. Maes, M. Soljačić, J.D. Joannopoulos, P. Bienstman, R. Baets, S.-P. Gorza, and M. Haelterman, *Opt. Express* **14**, 10678 (2006).
41. E. Bulgakov, A. Sadreev, and K. Pichugin, in: *Progress in Optical Science and Photonics* (2013), p. 89.
42. E.N. Bulgakov and A.F. Sadreev, *Phys. Rev. E* **86**, 075125 (2012).
43. A. Mirzaei, A.E. Miroshnichenko, N.A. Zharova, and I.V. Shadrivov, *J. Opt. Soc. Amer. B* **31**, 1595 (2014).
44. E. Bulgakov and A. Sadreev, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 315303 (2011).
45. L. Yuan and Y.Y. Lu, *Opt. Express* **21**, 11952 (2013).
46. E. Centeno and D. Felbacq, *Phys. Rev. B* **62**, 7683 (2000).
47. T. Christopoulos, O. Tsilipakos, and E.E. Kriezis, *Opt. Lett.* **45**, 6442 (2020).
48. Y. Liang, C. Peng, K. Sakai, S. Iwahashi, and S. Noda, *Opt. Express* **20**, 15945 (2012).
49. K. Yasumoto, *Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals*, Taylor and Francis Group (2006).
50. M.I. Mishchenko, L.D. Travis, and A.A. Lacis, *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles (Revised electronic edition)*, Goddard Institute for Space Studies (2004).

КВАНТОВОЕ РАССЕЯНИЕ СВЯЗАННОЙ ПАРЫ НА ТРЕТЬЕЙ ЧАСТИЦЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

А. М. Будылин*, С. Б. Левин**

Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный Университет,
199034, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 16 августа 2022 г.,
после переработки 16 августа 2022 г.
Принята к публикации 03 сентября 2022 г.

В рамках дифракционного подхода рассматривается задача рассеяния $2 \rightarrow 2(3)$ трех одномерных квантовых частиц с парными короткодействующими потенциалами притяжения. Решение задачи рассеяния строится в терминах решения модельной неоднородной граничной задачи в круге большого радиуса с условиями излучения на границе. Рассмотрены возможные физические приложения построенной модели.

DOI: 10.31857/S0044451022110050

EDN: KYLNDE

1. ВВЕДЕНИЕ

Идеи дифракционного подхода в задаче рассеяния трех одномерных квантовых частиц были предложены в работах [1–3] и получили дальнейшее развитие в работах [4–7]. В перечисленных выше работах рассматривалась задача рассеяния трех частиц с парными потенциалами отталкивания.

Данная работа посвящена случаю парных потенциалов притяжения, поддерживающих связанные состояния в каждой паре. Решение задачи рассеяния $2 \rightarrow 2(3)$ будет построено в два этапа. на первом этапе мы предложим схему, позволяющую установить связь амплитуд рассеяния процессов $2 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$. Эта связь будет получена в терминах некоторого внешнего объекта – срезающей функции, влияние которой будет нивелировано на втором этапе. На этом (втором) этапе будет предложен численный механизм восстановления полного решения задачи рассеяния во всем конфигурационном пространстве. Будет сформулирована граничная задача для неоднородного дифференциального уравнения в частных производных второго порядка в круге большого радиуса с условием излучения на границе.

В случае задачи рассеяния $3 \rightarrow 3$ похожая схема решения была предложена в работе [4] и реализована численно в работах [5, 6].

Отметим, что общая схема построения решения задачи рассеяния $2 \rightarrow 2(3)$ для случая трехмерных заряженных частиц была предложена в работе [8] применительно к реакциям, связанным с накоплением антипротонов [9–11]. Предлагаемая нами работа может рассматриваться как первый необходимый шаг для реализации этой схемы в наиболее простой ситуации одномерных частиц и финитных парных потенциалов притяжения. С другой стороны предлагаемая модель является полностью завершённой и имеет независимую ценность, например, при описании рассеяния нуклонов в параллельных пучках.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим систему трех квантовых частиц, динамика которой описывается оператором Шредингера

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \sum_{i=1}^3 v_i(x_i). \quad (1)$$

Мы полагаем, что парные потенциалы v_i , $i = 1, 2, 3$, являются финитными, четными, неположительными и поддерживающими одно связанное состояние. Мы полагаемся здесь на критерий Калоджеро [12] (и его обобщение для потенциалов, заданных на оси), определяющий число связанных состояний в системе двух тел. Мы полагаем также, что пара (x, y)

* E-mail: a.budylin@spbu.ru

** E-mail: s.levin@spbu.ru

– есть пара координат Якоби, отвечающая системе трех тел. Здесь $x \in \mathbb{R}$, $y \in \mathbb{R}$. Будем полагать, что массы частиц и парные потенциалы одинаковы.

Мы будем изучать задачу рассеяния $2 \rightarrow 2(3)$ трех частиц на оси, то есть координата каждой частицы характеризуется вещественным числом. Точнее, мы будем изучать рассеяние связанной пары на третьей частице, пользуясь формализмом дифракционного подхода, подробно описанным в работах [1, 2, 4]. В рамках этого формализма конфигурационное пространство задачи есть плоскость Γ , каждая из трех пар координат Якоби образует ориентированную систему координат на Γ , эти системы координат (как и сами пары координат Якоби, отвечающие двум произвольным различным парным подсистемам) связаны преобразованием поворота. Полный носитель потенциала (объединение трех парных носителей потенциала) есть совокупность трех пересекающихся в одной точке лучей-"экранов" l_j с окрестностями. В данном случае финитных парных потенциалов носитель полного потенциала есть объединение трех ориентированных полос на плоско-

сти, причем ширина каждой полосы определяется носителем соответствующего парного потенциала. Каждый из "экранов" с индексом j определяет область в конфигурационном пространстве, в которой частицы в паре j совпадают, то есть выполняется равенство $x_j = 0$. Таким образом, вдоль "экрана" с индексом j меняется координата Якоби y_j , а ортогонально экрану меняется координата Якоби x_j . Знак координаты x_j определяется четностью перестановки частиц в паре j , а знак координаты y_j определяется четностью перестановки частицы j и центра масс пары частиц k и l . Мы полагаем здесь, что тройка индексов (j, k, l) образована перестановкой чисел $(1, 2, 3)$.

Мы будем также полагать, что асимптотика решения уравнения Шредингера

$$(H - E)\Psi = 0,$$

удовлетворяющая условиям излучения на бесконечности в конфигурационном пространстве, устроена следующим образом

$$\Psi \sim e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) + \sum_{j=1}^3 \sum_{\tau_j \in \{+, -\}} a_j^{\tau_j} e^{ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j) + A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{e^{i\sqrt{E}X}}{\sqrt{X}}. \tag{2}$$

Здесь

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} k \\ p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2, \quad X = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \hat{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}}{X}.$$

Мы используем обозначения $k \in \mathbb{R}$ и $p \in \mathbb{R}$ для моментов, сопряженных по Фурье координатам Якоби x и y .

Будем полагать, что в начальном состоянии частицы пары $j = 1$ находятся в связанном состоянии φ_1^- с энергией $\kappa_j < 0$. Функции $\varphi_j^{\tau_j}$ удовлетворяют условию нормировки

$$\int_{\mathbb{R}} |\varphi_j^{\tau_j}(x)|^2 dx = 1, \quad j = 1, 2, 3, \quad \tau_j \in \{+, -\}. \tag{3}$$

Отметим, что первое слагаемое в выражении (2) отвечает падающей волне. При этом выполняются соотношения

$$y_1 < 0, \quad p_1 > 0.$$

Второе слагаемое в выражении (2) отвечает суперпозиции расходящихся волн (процессы $2 \rightarrow 2$) с ам-

плитудами $a_j^{\tau_j}$. Здесь индекс $j = 1, 2, 3$ обозначает номер парной подсистемы, а индекс $\tau \in \{+, -\}$ определяет четность перестановки координаты частицы j и центра масс подсистемы с индексом j . Иными словами, индекс τ_j отвечает знаку координаты Якоби y_j и, таким образом, определяет "полуэкранный" $l_j^{\tau_j}$. Для расходящихся волн выполняются соотношения

$$y_j > 0, \quad p_j > 0 \quad \text{или} \quad y_j < 0, \quad p_j < 0.$$

Отметим, что каждая расходящаяся волна с амплитудой $a_j^{\tau_j}$ определена лишь на том полуэкране, который соответствует индексу τ_j . На полуэкранный с индексом $-\tau_j$ она продолжается нулем.

Наконец, третье слагаемое в выражении (2) отвечает процессу распада $2 \rightarrow 3$ и описывает расходящуюся волну с амплитудой $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$.

Мы собираемся построить теперь набор уравнений, связывающих амплитуды $a_j^{\tau_j}$ процессов рассеяния $2 \rightarrow 2$ и амплитуду $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ процесса $2 \rightarrow 3$. При этом решение уравнения Шредингера нам известно лишь в асимптотической области конфигурационного пространства при $X \gg 1$. Выведем срезающую функцию, которая срежет решение при ограниченных и малых значениях X . Умножая точное решение задачи рассеяния (или его некоторую часть) на такую срезающую функцию, мы получим новую функцию, которая останется точным решением уравнения Шредингера при больших X , а при ограниченных и малых значениях X хотя и не будет уже точным решением уравнения Шредингера, но породит известную отличную от нуля невязку в ограниченной области конфигурационного пространства.

Этот факт позволит нам реализовать следующую схему решения задачи рассеяния. На первом этапе мы воспользуемся формулой Грина на плоскости и найдем, пусть и в терминах некоторой срезающей функции, связь между амплитудами рассеяния процессов $2 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$. При этом мы выделим часть решения, отвечающую сингулярной части матрицы рассеяния. Иными словами, мы свяжем кластерные решения задачи рассеяния (отвечающие процессам $2 \rightarrow 2$) с расходящейся круговой волной (отвечающей процессам $2 \rightarrow 3$). На втором этапе решения задачи рассеяния мы построим неоднородную граничную задачу для той части решения, которая дополняет полный набор кластерных решений, до полного решения задачи рассеяния. Асимптотика этой неизвестной части решения ведет себя как расходящаяся круговая волна с гладкой амплитудой и удовлетворяет условиям излучения на бесконечности. В свою очередь, "срезанные" при ограниченных и малых значениях X кластерные волны породят неоднородность краевой задачи, которая во всех кластерных решениях кроме падающей волны оказывается связанной с амплитудой расходящейся волны.

Реализуем теперь описанную выше схему.

3. ПОСТРОЕНИЕ УРАВНЕНИЙ, СВЯЗЫВАЮЩИХ АМПЛИТУДЫ РАССЕЙНИЯ ПРОЦЕССОВ $2 \rightarrow 2$ И $2 \rightarrow 3$

Введем радиальную срезающую функцию $\zeta(X) \in C^2_{[0, \infty)}$ следующим образом

$$\zeta(X) = \begin{cases} 0, & X < R_1, \quad R_1 \gg 1, \\ \text{растет от } 0 \text{ до } 1, & R_1 < X < R_2, \\ 1, & X > R_2. \end{cases} \quad (4)$$

Введем также обозначение $\psi_j^{\tau_j}(\mathbf{X}) = e^{ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j)$ для рассеянной волны, отвечающей процессу $2 \rightarrow 2$, и обозначение $\tilde{\psi}_j^{\tau_j}(\mathbf{X}) \equiv \psi_j^{\tau_j}(\mathbf{X})\zeta(X)$ для рассеянной волны, умноженной на срезающую функцию.

Подействуем оператором $H - E$ на эрмитовски сопряженное точное решение Ψ^* и на функцию $\tilde{\psi}_j^{\tau_j}$:

$$\begin{cases} (H - E)\Psi^* = 0, \\ (H - E)\tilde{\psi}_j^{\tau_j} = -Q_j^{\tau_j}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь обозначение $Q_j^{\tau_j}$ использовано для невязки функции $\tilde{\psi}_j^{\tau_j}$ в уравнении Шредингера. Домножим первое из уравнений системы (5) на функцию $\tilde{\psi}_j^{\tau_j}$, второе уравнение системы домножим на функцию Ψ^* , вычтем второе уравнение из первого и проинтегрируем результат в круге B_R радиуса $R > R_2$. Воспользовавшись формулой Грина, мы придем к следующему соотношению

$$\int_{\partial B_R} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}_j^{\tau_j}}{\partial n} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial n} \tilde{\psi}_j^{\tau_j} \right) dl = \int_{B_R} Q_j^{\tau_j} \Psi^*. \quad (6)$$

Отметим, что набор индексов $\{j, \tau_j\}$ описывает один из шести полуэкранов, на каждом из которых реализуется уравнение (6). При этом выделенным является полуэкран, отвечающий падающей волне. Рассмотрим два эти случая отдельно.

Случай $\{j, \tau_j\} \neq \{1, -\}$.

Соотношение (6) с учетом явного вида асимптотики (2) и условия нормировки (3) принимает вид

$$\begin{aligned} & \int_{d_j^{\tau_j}} A^*(\theta, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}R}}{\sqrt{R}} ip_j e^{iRp_j \cos(\theta - \theta_j^{\tau_j})} \varphi_j^{\tau_j}(R \sin(\theta - \theta_j^{\tau_j})) R d\theta + \\ & + \int_{d_j^{\tau_j}} A^*(\theta, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}R}}{\sqrt{R}} i\sqrt{E} e^{iRp_j \cos(\theta - \theta_j^{\tau_j})} \varphi_j^{\tau_j}(R \sin(\theta - \theta_j^{\tau_j})) R d\theta + 2ip_j a_j^{\tau_j*} = \\ & = \int_{B_R} Q_j^{\tau_j}(\mathbf{X}) \left(a_j^{\tau_j*} e^{-ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j) + A^*(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}X}}{\sqrt{X}} \right) d\mathbf{X}. \quad (7) \end{aligned}$$

Обозначение $d_j^{\tau_j}$ введено для узкой дуги окружности радиуса R в окрестности пересечения окружности и полуэкрана $l_j^{\tau_j}$. На краях дуги $d_j^{\tau_j}$ функция $\varphi_j^{\tau_j}$ обращается в нуль.

Отметим, что невязка $Q_j^{\tau_j}$ отлична от нуля в окрестности полуэкрана $l_j^{\tau_j}$, в которой срезающая функция $\zeta(X)$ меняется от $\zeta = 0$ до $\zeta = 1$, а именно, $R_1 < X < R_2$. Ширина этой окрестности определяется шириной носителя парного потенциала v_j . Таким образом $Q_j^{\tau_j} \sim O\left(\frac{1}{R_2 - R_1}\right)$, а площадь области интегрирования в интеграле в правой части уравнения (7) также имеет порядок $R_2 - R_1$. Значение интегралов в левой части уравнения (7) определяется методом стационарной фазы.

Окончательно,

$$i\sqrt{\frac{2\pi}{|p_j|}}A^*(\theta_j^{\tau_j}, \mathbf{P})(p_j + \sqrt{E})e^{iR(p_j - \sqrt{E})}\varphi_j^{\tau_j}(0) + 2ip_j a_j^{\tau_j*} = a_j^{\tau_j*} \int_{B_R} Q_j^{\tau_j}(\mathbf{X})e^{-ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j) d\mathbf{X}. \quad (8)$$

Угловая переменная θ , определяющая точку на границе круга B_R , меняется на промежутке $[0, 2\pi)$. Стационарные точки $\theta_j^{\tau_j}$, дающие основной вклад в интегралы по границе круга B_R , совпадают с шестью значениями, определяющими пересечения полуэкранов $l_j^{\tau_j}$ с окружностью ∂B_R . Мы учли также, что, в свете сказанного выше, второе слагаемое под интегралом в правой части уравнения (7) имеет следующий порядок малости по сравнению с главным вкладом.

Связь между амплитудами $a_j^{\tau_j}$ процессов рассеяния $2 \rightarrow 2$ и амплитудой $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ процесса рассеяния $2 \rightarrow 3$ согласно уравнению (8) принимает вид

$$a_j^{\tau_j*} = A^*(\theta_j^{\tau_j}, \mathbf{P}) \frac{i\sqrt{\frac{2\pi}{|p_j|}}(p_j + \sqrt{E})e^{iR(p_j - \sqrt{E})}\varphi_j^{\tau_j}(0)}{\int_{B_R} Q_j^{\tau_j}(\mathbf{X})e^{-ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j) d\mathbf{X} - 2ip_j}. \quad (9)$$

Случай $\{j, \tau_j\} = \{1, -\}$.

Повторяя описанные в предыдущем разделе выкладки, нетрудно видеть, что уравнение связи (9) будет модифицировано. А именно, соотношение (6) с учетом явного вида асимптотики (2) и условия нормировки (3) приводит в этом случае к следующему уравнению

$$\int_{d_1^-} A^*(\theta, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}R}}{\sqrt{R}} ip_1 e^{iRp_1 \cos(\theta - \theta_1^-)} \times \times \varphi_1^-(R \sin(\theta - \theta_1^-)) R d\theta +$$

$$+ \int_{d_1^-} A^*(\theta, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}R}}{\sqrt{R}} i\sqrt{E} e^{iRp_1 \cos(\theta - \theta_1^-)} \times \times \varphi_1^-(R \sin(\theta - \theta_1^-)) R d\theta + 2ip_1 a_1^{-*} =$$

$$= \int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X}) \left(a_1^{-*} e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) + e^{ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) + A^*(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{e^{-i\sqrt{E}X}}{\sqrt{X}} \right) d\mathbf{X}.$$

Теперь в интегральном члене в правой части уравнения возникло дополнительное слагаемое, отвечающее падающей волне. Повторяя вычисления, проведенные в случае $\{j, \tau_j\} \neq \{1, -\}$ и учитывая этот дополнительный член, получаем окончательное выражение

$$a_1^{-*} = A^*(\theta_1^-, \mathbf{P}) \frac{i\sqrt{\frac{2\pi}{|p_1|}}(p_1 + \sqrt{E})e^{iR(p_1 - \sqrt{E})}\varphi_1^-(0)}{\int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X})e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) d\mathbf{X} - 2ip_1} -$$

$$\frac{\int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X})e^{ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) d\mathbf{X}}{\int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X})e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) d\mathbf{X} - 2ip_1} \quad (11)$$

Отметим, что вклад второго слагаемого оказывается пренебрежимо малым вследствие оценки

$$\left| \int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X})e^{ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) d\mathbf{X} \right| \leq \leq \frac{C}{R_2 - R_1} \left| \int_{R_1}^{R_2} e^{2ip_1 y} dy \right| = O\left(\frac{1}{R_2 - R_1}\right).$$

Таким образом, с точностью до величин следующего порядка малости справедливо уравнение связи

$$a_1^{-*} = A^*(\theta_1^-, \mathbf{P}) \frac{i\sqrt{\frac{2\pi}{|p_1|}}(p_1 + \sqrt{E})e^{iR(p_1 - \sqrt{E})}\varphi_1^-(0)}{\int_{B_R} Q_1^-(\mathbf{X})e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) d\mathbf{X} - 2ip_1}. \quad (12)$$

Полученные уравнения связи (9) и (12) оказываются достаточными при построения граничной задачи для полного решения задачи рассеяния.

4. ПОСТРОЕНИЕ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПОЛНОГО РЕШЕНИЯ

Построим теперь граничную задачу для полного решения Ψ задачи рассеяния $2 \rightarrow 2(3)$, опираясь на

полученную выше систему связей (9) между амплитудами рассеяния $a_j^{\tau_j}$ процессов рассеяния $2 \rightarrow 2$ и амплитудой $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ процесса рассеяния $2 \rightarrow 3$.

Запишем полное решение задачи рассеяния Ψ в следующем виде

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = \chi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) + \Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P}), \quad (13)$$

где первое слагаемое в выражении (13) содержит падающую волну и набор рассеянных волн, отвечающих процессам рассеяния $2 \rightarrow 2$, срезанные функцией $\zeta(X)$ (4) на внешность круга большого радиуса с центром в начале координат

$$\chi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) \equiv \left[e^{-ip_1 y_1} \varphi_1^-(x_1) + \sum_{j=1}^3 \sum_{\tau_j \in \{+, -\}} a_j^{\tau_j} e^{ip_j y_j} \varphi_j^{\tau_j}(x_j) \right] \zeta(X).$$

Неизвестная функция $\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ дополняет первое слагаемое $\chi(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ до полного решения. Аналогичный подход был использован, например, в работе ([5]). Мы будем следовать аналогичным идеям. Согласно выражению (2) асимптотика функции $\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ при $X \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) \sim A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P}) \frac{e^{i\sqrt{E}X}}{\sqrt{X}}, \quad (14)$$

где $A(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{P})$ – гладкая функция на окружности.

Поскольку функция Ψ является точным решением уравнения Шредингера, для функции $\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ получим уравнение

$$(H - E)\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = -S(\mathbf{X}, \mathbf{P}), \quad (15)$$

$$S(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = (H - E)\chi(\mathbf{X}, \mathbf{P}).$$

Отметим, что правая часть уравнения (15) $S(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ определена с точностью до шести коэффициентов $a_j^{\tau_j}$. В свою очередь, эти коэффициенты определены согласно (9) и (14) через определенные значения функции $\Phi(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ на окружности радиуса R . Отметим также, что уравнение (15) на функцию Φ является неоднородным, поскольку падающая волна не зависит от коэффициентов $a_j^{\tau_j}$ и, таким образом, не зависит от Φ .

Будем теперь рассматривать неоднородное уравнение (15) в круге большого радиуса R на плоскости Γ с граничным условием вида

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial n} - i\sqrt{E}\Phi \right) |_{X=R} = O(R^{-3/2}). \quad (16)$$

Решение поставленной граничной задачи в сумме с функцией χ дает, согласно (13), полное решение исходной задачи рассеяния.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенная модель может рассматриваться как реализация метода, предложенного в работе [8] для описания механизма накопления антипротонов [13, 14] в более простой ситуации одномерных частиц и короткодействующих парных потенциалов. Являясь необходимым шагом для реализации полной ситуации, описанной в [8], предложенная модель имеет и собственную ценность. В рамках предложенной модели можно рассматривать, например, задачу рассеяния в параллельных пучках [15–17]. В ситуации, когда угол рассеяния продуктов распада оказывается малым, рассеяние двухчастичного кластера на третьей частице в старшем порядке определяется именно изложенной выше схемой.

Отметим также, что предложенная схема решения задачи рассеяния трех частиц на оси открывает возможность аналитического (и численного) изучения задачи одномерного рассеяния $3 \rightarrow 2(3)$ с парными потенциалами притяжения, развивая результаты работы [6].

Благодарности. Авторы выражают благодарность Г.В.Розенблюму за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (гранта РНФ 22-11-00046).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Буслаев, С. П. Меркурьев, С. П. Саликов, в сб. *Проблемы матем. физики*, т.9, изд-во ЛГУ, Ленинград, (1979), с. 14.
2. В. С. Буслаев, С. П. Меркурьев, С. П. Саликов, *Зап. Научн. Сем. ЛОМИ* **84**, 16 (1979).
3. M. Gaudin and B. Derrida, *J. de Phys.* **36**, 1183 (1975).
4. V. S. Buslaev and S. B. Levin, in: *Selected Topics in Mathematical Physics*, Amer.Math.Soc.Transl. **225**, 55 (2008).
5. V. S. Buslaev, S. B. Levin, P. Neittaanmäki, and T. Ojala, *J.Phys.A: Math.Theor.* **43**, 285205 (2010).
6. В. С. Буслаев, Я. Ю. Коптелов, С. Б. Левин, Д. А. Стрыгина, *ЯФ* **76**, 23 (2013).

7. С. Б. Левин, Зап. науч. сем. ПОМИ **451**, 79 (2016).
8. А. М. Будылин, Я. Ю. Коптелов, С. Б. Левин, ЖЭТФ **160**, 3722 (2021).
9. W. A. Bertsche, E. Butler, M. Charlton, and N. Madsen, J. Phys. B, **48**, 232001 (2015).
10. M. Ahmadi, B. X. R. Alves, C. J. Baker, W. Bertsche, E. Butler, A. Capra, C. Carruth, C. L. Cesar, M. Charlton, S. Cohen et al., Nat. Commun. **8**, 681 (2017).
11. N. Kuroda, S. Ulmer, D. J. Murtagh, S. Van Gorp, Y. Nagata, M. Diermaier, S. Federmann, M. Leali, C. Malbrunot, V. Mascagna et al., Nat. Commun. **5**, 3089 (2014).
12. F. Calogero, Comm. Math. Phys. **1**, 80 (1965).
13. D. Krasnicky, G. Testera, and N. Zurlo, J. Phys. B **52**, 115202 (2019)
14. D. Krasnicky, R. Caravita, C. Canali, and G. Testera, Phys. Rev. A **94**, 022714 (2016).
15. Г. И. Будкер, УФН **89**, 533 (1966).
16. Б. Я. Зельдович, В. В. Шкунов, КЭ **9**, 393 (1982).
17. N. Cohen and L. Schächter, Phys. Rev. Accelerators and Beams, **23**, 111303 (2020).

О МАССОВОЙ ФУНКЦИИ НА ВНУТРЕННЕМ ГОРИЗОНТЕ РЕГУЛЯРНОЙ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ

М.З. Иофа

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

Поступила в редакцию 23 июня 2022 г.,
после переработки 28 июня 2022 г.
Принята к публикации 28 июня 2022 г.

Пересмотрены и заново проведены расчеты внутренней массовой функции регулярной черной дыры Хейворда с потоками. Представлены подробные расчеты внутренней массовой функции в двух формах подхода Ори (входящий поток непрерывен, исходящий поток моделируется тонкой нулевой оболочкой) и проведено их сравнение с расчетами для черной дыры Рейснера–Нордстрема. Обсуждается формальная причина различия результатов. Вычислена плотность энергии скалярных возмущений, распространяющихся от горизонта событий в черную дыру Хейворда, измеренная свободно падающим наблюдателем вблизи внутреннего горизонта.

DOI: 10.31857/S0044451022110062
EDN: KYQOMT

1. ВВЕДЕНИЕ

Решения для черных дыр в общей теории относительности — Шварцшильда, Рейснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена — имеют центральную сингулярность при $r = 0$, что считается нежелательным в моделях астрофизических черных дыр. Регулярные черные дыры были предложены как конфигурации, в которых центральная сингулярность заменяется несингулярным ядром [1–7]. Регулярные черные дыры являются статическими, сферически-симметричными и удовлетворяют слабому энергетическому условию. Они удобны для лучшего понимания процессов образования и испарения черных дыр.

В настоящей работе мы обсуждаем черную дыру Хейворда [3], которая является очень простой реализацией несингулярной черной дыры и может рассматриваться как регуляризация решения Шварцшильда. За пределами горизонта событий обе геометрии имеют одинаковый асимптотический вид при $r \rightarrow \infty$. Важное различие между черными дырами Шварцшильда и Хейворда состоит в том, что черная дыра Хейворда может совсем не иметь горизонта, иметь один двойной горизонт или два гори-

зонта. В последнем случае черной дыры Хейворда с двумя горизонтами ее причинная структура аналогична структуре решений Рейснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена. В этих черных дырах внутренний горизонт — это горизонт Коши, нулевая гиперповерхность, за пределами которой предсказательная сила теории теряется.

В процессе коллапса звезды и образования черной дыры возникает исходящий поток излучения, который, после частичного отражения от потенциала вблизи внешнего горизонта, приводит к появлению потока излучения, идущего в черную дыру [8]. Этот поток частично отражается потенциалом вблизи внутреннего горизонта и порождает исходящий поток. Внутренний горизонт представляет собой поверхность бесконечного голубого смещения, и в работах [9–16], а также во многих последующих работах было показано, что свободно падающий наблюдатель вблизи горизонта Коши черных дыр Рейснера–Нордстрема и Керра–Ньюмена увидит неограниченную плотность энергии скалярного, электромагнитного и гравитационного полей. Это интерпретировалось как нестабильность горизонта Коши относительно внешних возмущений.

Эти свойства позволяют ожидать, что присутствие вблизи внутреннего горизонта только входящего потока с голубым смещением (хвост излучения Прайса [8]) приведет к увеличению внутрен-

ней массовой функции. Однако в статье [17] на примере черной дыры Рейснера–Нордстрема (РН) было показано, что одного входящего потока с голубым смещением недостаточно для неограниченного увеличения внутренней массовой функции (т. е. для массовой инфляции). А именно, было показано, что массовая инфляция возникает только как совокупный эффект входящего и исходящего потоков. Массовая инфляция приводит к увеличению кривизны на внутреннем горизонте, и вместо горизонта Коши появляется сингулярность кривизны, экранирующая этот горизонт. В работе [17] входящие и исходящие потоки моделируются входящими и исходящими заряженными решениями Вайдья [18], которые, в свою очередь, моделировались тонкими нулевыми оболочками светоподобных частиц, проходящими друг через друга без взаимодействия. Пространство-время разделено пересекающимися потоками на четыре области, метрика в каждой из которых характеризуется своей массой. Массовая инфляция исходящего потока возникает, когда входящая оболочка находится вблизи горизонта Коши. Решение для внутренней массовой функции было получено с использованием соотношения Дрэй–т Хоофта–Рэдмонда (ДТР) [19, 20] между массами в метриках четырех областей. Сингулярность на горизонте Коши аналитически обсуждалась в работах [21–24] и в ряде других работ, цитируемых в них.

В статье [25] задача массовой инфляции для черной дыры РН с потоками изучалась путем моделирования исходящего излучения нулевой тонкой оболочкой, при этом входящий поток излучения Прайса считался непрерывным (подход Ори). В этой модели из уравнений Эйнштейна с учетом непрерывности проходящего через оболочку потока было получено соотношение, связывающее между собой массы метрик пространства-времени внутри и вне оболочки, которое предсказывало массовую инфляцию вблизи внутреннего горизонта [21, 25, 26].

Поскольку причинная структура черной дыры Хейворда аналогична структуре черной дыры РН, естественно задать вопрос, происходит ли в черной дыре Хейворда с потоками массовая инфляция. Этот вопрос обсуждался в рамках подхода Ори с использованием обобщенной конструкции ДТР [27] в работе [6] для “петлевой черной дыры” и в работах [28–30] для черной дыры Хейворда. Несколько удивительным результатом было то, что, в отличие от черной дыры РН, в случае регулярных черных дыр (петлевых или Хейворда) подход Ори не приводит к массовой инфляции. Однако использование (обоб-

щенного) соотношения ДТР в этих моделях приводит к массовой инфляции.

В настоящей работе мы даем обзор предыдущих расчетов внутренней массовой функции и представляем подробные расчеты этой функции в двух вариантах подхода Ори. Мы сравниваем наши результаты с расчетами для черной дыры РН. А именно, мы показываем, что, как и в случае черной дыры РН, в черной дыре Хейворда с входящим потоком плотность энергии вблизи внутреннего горизонта, измеренная свободно падающим наблюдателем, неограниченно возрастает, указывая на то, что как черные дыры Хейворда, так и черные дыры РН нестабильны относительно внешних возмущений.

2. ВНУТРЕННЯЯ МАССОВАЯ ФУНКЦИЯ В МОДЕЛИ ХЕЙВОРДА

Метрика черной дыры Хейворда является решением уравнений Эйнштейна и имеет вид [3]

$$ds^2 = -f(r)dv^2 + 2dvdr + r^2d\Omega^2, \quad (1)$$

где

$$f(r) = 1 - \frac{M(r)}{r} = 1 - \frac{2mr^2}{2ml^2 + r^3}. \quad (2)$$

Параметризация метрики подробно описана в работе [3], включая вид соответствующего тензора энергии-импульса.¹⁾ Метрика может совсем не иметь горизонта, иметь один двойной или два горизонта. Мы обсуждаем случай с двумя горизонтами. Если масса m является функцией запаздывающего или опережающего времени v , $m = m(v)$, метрика принимает вид

$$ds^2 = -f(r, v)dv^2 - 2dvdr + r^2d\Omega^2, \quad (3)$$

и появляется дополнительная компонента тензора энергии-импульса T_v^r .

В случае наличия входящего и исходящего потоков энергии исходящий поток, следуя подходу Ори [25], моделируется тонкой нулевой оболочкой Σ . Эта оболочка делит внутреннюю часть черной дыры на внешнюю V_+ и внутреннюю V_- области. В обеих частях V_{\pm} метрика имеет вид (3) с разными v_{\pm} и m_{\pm} . Переменную r можно считать непрерывной при переходе через оболочку [27, 31].

¹⁾ Отметим, что в используемой нами системе единиц гравитационная постоянная включена в параметр m , который в таком случае имеет размерность длины.

Для метрики (2), (3) уравнения Эйнштейна принимают вид [27, 31]

$$\frac{\partial M_{\pm}}{\partial r} = -4\pi r^2 T_v^v, \quad \frac{\partial M_{\pm}}{\partial v_{\pm}} = 4\pi r^2 T_v^r. \quad (4)$$

Непрерывность метрики при переходе через оболочку приводит к уравнению

$$(f_+ dv_+ = f_- dv_-)|_{\Sigma} = 2dr. \quad (5)$$

Ниже мы будем обозначать

$$v_+ \equiv v, \quad f_+(v_+) = f(v).$$

Непрерывность потока через оболочку

$$[T_{\mu\nu} n^{\mu} n^{\nu}] = 0, \quad [A] = A_+ - A_-,$$

где n^{μ} обозначает нормаль к оболочке, записывается как

$$\frac{T_{v_+v_+}}{f_+^2} = \frac{T_{v_-v_-}}{f_-^2} \Big|_{\Sigma}. \quad (6)$$

Переменная v_- определяется из уравнения (5) как функция v :

$$\frac{dv_-(v)}{dv} = \frac{f(v)}{\tilde{f}_-(v)} \Big|_{\Sigma}, \quad (7)$$

где

$$\tilde{f}_-(v) = f_-(v_-(v)).$$

Точно так же

$$\tilde{m}_-(v) = m_-(v_-(v)).$$

Мы также имеем

$$\frac{\partial \tilde{M}_-(v)}{\partial v} = \frac{\partial M_-(v_-)}{\partial v_-} \frac{f(v)}{\tilde{f}_-(v)} \Big|_{\Sigma}. \quad (8)$$

Из уравнений (6) и (8) получаем

$$\frac{1}{f(v)} \frac{\partial M_+}{\partial v} \Big|_{\Sigma} = \frac{1}{\tilde{f}_-(v)} \frac{\partial \tilde{M}_-}{\partial v} \Big|_{\Sigma}. \quad (9)$$

Уравнение (9) будет использоваться для нахождения массовой функции $\tilde{m}_-(v)$.

2.1. Массовая функция из условия непрерывности потока через оболочку

В случае черной дыры с входящим потоком Прайса [8] массовая функция в области V_+ есть $m_+ = m_0 - \delta m_{pr}$, где m_0 — масса без учета потока Прайса, а $\delta m_{pr}(v) = \beta/v^p$, $p \geq 12$. Будем полагать, что $m_0 \gg l$.

Без потока Прайса горизонты черной дыры определяются из уравнения $f(r, m_0) = 0$, или, эквивалентно, из уравнения

$$r^3 - 2m_0(r^2 - l^2) = 0. \quad (10)$$

Внешний горизонт расположен при

$$r_+ \simeq 2m_0 - l^2/2m_0 + \dots,$$

внутренний горизонт находится при

$$\begin{aligned} r_- &\simeq l \left(1 + \frac{l}{4m_0} + \frac{5}{2} \left(\frac{l}{4m_0} \right)^2 + \dots \right) \equiv \\ &\equiv l(1 + \eta + 5\eta^2/2 + \dots). \end{aligned} \quad (11)$$

В случае с потоками расположение горизонтов следующее:

$$r_+(v) \simeq r_+ - \delta r_+(v), \quad r_-(v) \simeq r_- + \delta r_-(v). \quad (12)$$

В первом порядке по δm_{pr} величина δr_- определяется из уравнения

$$f_{,r}(r_-, m_0) \delta r_- - f_{,m}(r_-, m_0) \delta m_{pr} = 0,$$

что дает

$$\delta r_- = \delta m_{pr} f_{,m}(r_-, m_0) / f_{,r}(r_-, m_0). \quad (13)$$

Оболочка, моделирующая исходящий поток, расположена на радиусе

$$r_{shell} = r_s,$$

а вблизи внутреннего горизонта мы можем написать

$$r_s = r_- + y(v), \quad r_- > y(v).$$

Расположение оболочки определяется уравнением нулевой геодезической (5)

$$\begin{aligned} 2\dot{r}_s(v) &= f(r_s, m_+(v)) = \\ &= f(r_- + y(v), m_0 - \delta m_{pr}(v)). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь точка обозначает производную по переменной v . В первом порядке по y и δm_{pr} получаем

$$2\dot{y} = f_{,r}(r_-, m_0)y - f_{,m}(r_-, m_0)\delta m_{pr}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} f_{,r}(m_0, r_-) &= 2m_0 r_- \frac{r_-^3 - 4m_0 l^2}{(r_-^3 + 2m_0 l^2)^2} \simeq \\ &\simeq -\frac{2}{l}(1 - 4\eta), \end{aligned} \quad (16)$$

$$f_{,m}(m_0, r_-) = -\frac{2r_-^5}{(r_-^3 + 2m_0 l^2)^2} \simeq -\frac{l}{2m_0^2}(1 + \eta). \quad (17)$$

Решая уравнение (15), получаем

$$y(v) = e^{-v|f_{,r}|/2} \left(C - \int^v dv e^{v|f_{,r}|/2} \delta m_{pr} \frac{f_{,m}}{2} \right). \quad (18)$$

В пределе $v \rightarrow \infty$ величина $y(v)$ примерно равна

$$y(v) \simeq \frac{l^2}{4m_0^2} \delta m_{pr} (1 + 5\eta) - \delta \dot{m}_{pr} \frac{l^3}{4m_0^2} (1 + 9\eta). \quad (19)$$

Если положение оболочки определяется относительно зависящего от v горизонта $r_-(v)$, $r_s = r_-(v) + z(v)$, то $z(v)$ определяется из уравнения геодезической

$$2(\dot{z} + \delta \dot{r}_-) = f_{,r}(r_-, m_0)(\delta r_- + z) - f_{,m}(r_-, m_0) \delta m_{pr}, \quad (20)$$

где

$$\delta r = \delta m_{pr} (l^2/4m_0^2)(1 + 5\eta).$$

Асимптотическое решение уравнения (20) имеет вид

$$z(v) = e^{-v|f_{,r}|/2} \left(C - \int^v dv e^{v|f_{,r}|/2} \delta m_{pr} \frac{l^2}{4m_0^2} (1 + 5\eta) \right) \simeq -\delta \dot{m}_{pr} \frac{l^3}{4m_0^2} (1 + 9\eta). \quad (21)$$

Члены, пропорциональные δm_{pr} , сокращаются. Положение оболочки в обоих расчетах есть

$$r_s(v) \simeq r_- + \frac{l^2}{4m_0^2} \delta m_{pr} (1 + 5\eta) - \frac{l^3}{4m_0^2} \delta \dot{m}_{pr} (1 + 9\eta). \quad (22)$$

Используя уравнение (9), найдем внутреннюю массовую функцию $\tilde{m}_-(v)$. Сначала мы вычислим

$$R_+ \equiv \frac{1}{f(v)} \frac{\partial M_+}{\partial v} = \frac{r_s^6 \dot{m}_+}{(r_s^3 + 2l^2 m_+)(r_s^3 - 2m_+(r_s^2 - l^2))} = \frac{r_s^6 \dot{m}_+}{2\dot{r}_s(2m_+ l^2 + r_s^3)}. \quad (23)$$

Здесь мы использовали уравнение геодезической для оболочки, записанное в виде

$$r_s^3 - 2m_+(r_s^2 - l^2) = 2\dot{r}_s(2m_+ l^2 + r_s^3).$$

Используя уравнение (22) и сохраняя в (23) ведущие члены по δm_{pr} , имеем

$$R_+ \simeq -\frac{r_s^6}{2l^6(1 + 9\eta)}. \quad (24)$$

Уравнение для внутренней массовой функции \tilde{m}_- имеет вид

$$R_- \equiv \frac{1}{\tilde{f}_-(v)} \frac{\partial \tilde{M}_-}{\partial v} = \frac{r_s^6 \dot{\tilde{m}}_-}{-4\tilde{m}_-^2 l^2 (r_s^2 - l^2) + 2\tilde{m}_- r_s^3 (2l^2 - r_s^2) + r_s^6} = -\frac{r_s^6}{2l^6(1 + 9\eta)}. \quad (25)$$

Используя соотношения

$$r_s^2 - l^2 \simeq l^2[(1 + \eta + 5\eta^2/2 + \dots)^2 - 1] \simeq \frac{l^3}{2m_0}(1 + 3\eta),$$

$$2l^2 - r_s^2 \simeq l^2(1 - 2\eta), \quad (26)$$

перепишем уравнение (25) как

$$\dot{\tilde{m}}_- = \frac{1}{1 + 9\eta} \left[\frac{\tilde{m}_-^2}{2m_0 l} (1 + 3\eta) - \frac{\tilde{m}_-}{l} (1 + \eta) - \frac{1}{2} (1 + 6\eta) \right], \quad (27)$$

а затем преобразуем его к виду

$$\dot{\tilde{m}}_- = \frac{1 - 6\eta}{m_0 l} \times \left[\left(\tilde{m}_- - \frac{m_0}{2} (1 - 2\eta) \right)^2 - \frac{m_0^2}{4} (1 - 2\eta)^2 - \frac{m_0 l}{2} (1 + 3\eta) \right] \simeq \frac{1 - 6\eta}{m_0 l} \left[\left(\tilde{m}_- - \frac{m_0}{2} (1 - 2\eta) \right)^2 - \left(\frac{m_0}{2} (1 + 2\eta) \right)^2 \right]. \quad (28)$$

Интегрируя уравнение (28), найдем

$$\frac{1}{m_0(1 + 2\eta)} \times \ln \left| \frac{(\tilde{m}_- - m_0(1 - 2\eta)/2) - m_0(1 + 2\eta)/2}{(\tilde{m}_- - m_0(1 - 2\eta)/2) + m_0(1 + 2\eta)/2} \right| = Cv/2l. \quad (29)$$

В пределе $v \rightarrow \infty$ получим

$$\tilde{m}_- = -2m_0\eta = -\frac{l}{2}. \quad (30)$$

Отрицательное значение для m_- обсуждалось в работе [6] для петлевой черной дыры и в работе [29] для черной дыры Хейворда, и, в частности, было отмечено, что внутренняя массовая функция $m_-(v)$ не является непосредственно измеряемой величиной, так что результат может быть артефактом параметризации.

2.2. Массовая функция в дважды нулевых координатах

Вычислим внутреннюю массовую функцию, следуя первоначальному подходу Ори [25]. Как и выше, оболочка разделяет внутреннюю часть черной дыры на две области V_{\pm} с разными v_{\pm} и m_{\pm} ; координата r непрерывна при переходе через оболочку. В дважды нулевых координатах метрика имеет вид

$$ds^2 = -2e^{\sigma} dU dV + r^2 d\Omega.$$

Координата U полагается равной нулю на оболочке. Поскольку в оболочке нет давления, можно ввести аффинный параметр λ с обеих ее сторон [27, 31]. Координата V равна λ вдоль оболочки. Координата положения оболочки $r_s = r_- + y(v)$ (см. (22)) теперь записывается как $r_s = R(\lambda) = r(V = \lambda, U = 0)$. Предполагается, что оболочка достигает внутреннего горизонта при $v \rightarrow \infty$ или, эквивалентно, при $\lambda = 0$. Далее мы пишем $v_+ = v$.

Уравнение геодезической для оболочки имеет вид

$$R'/v'_{\pm} = \frac{1}{2} f_{\pm}(m_{\pm}(v), R), \quad (31)$$

где штрих обозначает производную по λ . Определим

$$z_{\pm} = R/v'_{\pm}. \quad (32)$$

Дифференцируя уравнение (32),

$$z'_{\pm} = R'/v'_{\pm} - Rv''_{\pm}/v'^2_{\pm},$$

и используя уравнение геодезической для $v(\lambda)$

$$v''_{\pm} + \frac{1}{2} f_{\pm,r} v'^2_{\pm} = 0, \quad (33)$$

получим уравнение

$$2z'_{\pm} = f_{\pm} + Rf_{\pm,r}. \quad (34)$$

Со стороны (+) оболочки уравнение (34) принимает вид

$$z'_+ = \frac{1}{2} \left(1 - 12 \frac{m_+^2 R^2 l^2}{(R^3 + 2m_+ l^2)^2} \right), \quad (35)$$

или

$$z'_+ \simeq -1 - 2(l/4m_0 + \delta m_{pr}/m_0 + \delta y/l). \quad (36)$$

Здесь мы положили $R(\lambda) = r_- + y(R, v)$ и $m_+ = m_0 - \delta m_{pr}$. Интегрируя уравнение (35), получаем $z_+ \simeq Z_+ - \lambda$. Из уравнения (32) следует, что

$$v_+ = \int^{\lambda} d\lambda \frac{R}{z_+} \simeq r_- \ln \frac{1}{\lambda}. \quad (37)$$

В уравнении (37) Z_+ положено равным нулю, чтобы иметь $v_+ \rightarrow \infty$ при $\lambda \rightarrow 0$.

Дифференцируя (31) по λ , имеем

$$v''_{\pm} = 2(R'' f_{\pm} - R' f'_{\pm})/f^2_{\pm}.$$

Подставляя v'' в уравнение (33), получаем уравнение для f (см. также [29])

$$f(R) \frac{R''}{R'} = f'(R) - f_{,r}(R) R'. \quad (38)$$

В случае $f = f_-$,

$$f_-(\tilde{m}_-(v), R) = 1 - \frac{2\tilde{m}_-(v)R^2}{R^3 + 2\tilde{m}_-(v)l^2},$$

преобразуя уравнение (38), мы получаем

$$\frac{R''}{2R'} f_-(\tilde{m}_-(v), R) = -\frac{\tilde{m}'_- R^5}{(R^3 + 2\tilde{m}_- l^2)^2}. \quad (39)$$

Подставляя

$$R(v(\lambda)) = r_s \simeq r_- + \delta m(v) l^2 / 4m_0^2,$$

имеем

$$\begin{aligned} \frac{R''}{R'} &= \frac{p(p+1)v^{-p-2}v'^2 - pv^{-p-1}v''}{-pv^{-p-1}v'} = \\ &= -(p+1)\frac{v'}{v} + \frac{v''}{v'} \simeq -\frac{1}{\lambda}. \end{aligned}$$

Уравнение (39) принимает вид

$$\tilde{m}'_- = -\frac{1}{2\lambda R^5} [4\tilde{m}_-^2 l^2 (R^2 - l^2) - 2\tilde{m}_- R^3 (2l^2 - R^2) - R^6]. \quad (40)$$

Замечая, что

$$\tilde{m}'_- = \frac{d\tilde{m}_-(v)}{dv} \left(-\frac{r_-}{\lambda} \right),$$

находим

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{m}}_- &= \frac{2l^2(r_-^2 - l^2)}{r_-^6} \times \\ &\times \left[\tilde{m}_-^2 - 2\tilde{m}_- \frac{r_-^3(2l^2 - r_-^2)}{4l^2(r_-^2 - l^2)} - \frac{r_-^6}{4l^2(r_-^2 - l^2)} \right]. \quad (41) \end{aligned}$$

В уравнении (41) мы узнаем структуру уравнения (25). С помощью (26) уравнение (41) принимает ту же форму, что и (28).

3. ЧЕРНАЯ ДЫРА ХЕЙВОРДА В СРАВНЕНИИ С ЧЕРНОЙ ДЫРОЙ РН

Сравним черную дыру Хейворда и черную дыру РН с потоком Прайса. Для дыры РН функция $f(v)$ в уравнении (1) есть

$$f(v) = 1 - \frac{2m(v)}{r} + \frac{e^2}{r^2}. \quad (42)$$

Мы предполагаем, что $m^2(v) \gg e^2$. Масса черной дыры m_+ равна $m_0 - \delta m_{pr}$, $m_0 \gg \delta m_{pr}$. Без потока Прайса положения горизонтов определяются из уравнения $f(r, m_0) = 0$. Внешний и внутренний горизонты расположены в $\tilde{r}_+ = m_0 + \sqrt{m_0^2 - e^2}$ и $\tilde{r}_- = m_0 - \sqrt{m_0^2 - e^2}$. В случае с потоком, положения горизонтов даются соотношениями

$$\begin{aligned} r_+ &= \tilde{r}_+ \left(1 - \frac{\delta m_{pr}}{\sqrt{m_0^2 - e^2}} \right), \\ r_- &= \tilde{r}_- \left(1 + \frac{\delta m_{pr}}{\sqrt{m_0^2 - e^2}} \right). \end{aligned} \quad (43)$$

Оболочка, моделирующая исходящий поток, находится вблизи внутреннего горизонта в точке $r_s(v) = r_-(v) + y(v)$. Ниже мы используем обозначения предыдущего раздела.

Положение нулевой оболочки определяется уравнением геодезической $2\dot{r}_s = f(r_s, m_+)$. Замечая, что $f(\tilde{r}_-, m_0) = 0$, и разлагая функцию $f(r_s, m(v))$ до первого порядка по y и δm_{pr} , получаем

$$\begin{aligned} &2 \left(\dot{y} + \frac{\delta \dot{m}_{pr}}{\kappa \tilde{r}_-} \right) = \\ &= f_{,r}(\tilde{r}_-, m_0) \left(y + \frac{\delta m_{pr}}{\kappa \tilde{r}_-} \right) - f_{,m}(\tilde{r}_-, m_0) \delta m_{pr}, \end{aligned} \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} r_s &= \tilde{r}_- + y + \frac{\delta m_{pr}}{\kappa \tilde{r}_-}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{m_0^2 - e^2}}{\tilde{r}_-^2}, \\ f_{,r}(\tilde{r}_-, m_0) &= -2\kappa, \quad f_{,m}(\tilde{r}_-, m_0) = -\frac{2}{\tilde{r}_-}. \end{aligned} \quad (45)$$

Подставляя выражения (45) в (44), мы перепишем уравнение (44) в виде

$$\dot{y} + \kappa y \simeq -\frac{\delta \dot{m}_{pr}}{\kappa \tilde{r}_-}. \quad (46)$$

Отметим, что, так же как и в уравнении (22), члены, пропорциональные δm_{pr} , сократились. Решение уравнения (46) есть

$$y(v) = e^{-\kappa v} \left(C - \int^v dv e^{+\kappa v} \frac{\delta \dot{m}_{pr}}{\kappa \tilde{r}_-} \right). \quad (47)$$

В пределе $v \rightarrow \infty$ решение уравнения (47) упрощается до

$$y(v) \simeq -\frac{\delta \dot{m}_{pr}}{\tilde{r}_- \kappa^2}.$$

Нулевая оболочка расположена в точке

$$r_s = \tilde{r}_- + \frac{\delta m_{pr}}{\tilde{r}_- \kappa} - \frac{\delta \dot{m}_{pr}}{\tilde{r}_- \kappa^2}. \quad (48)$$

Найдем внутреннюю массовую функцию. С помощью соотношений (4)–(6) условие непрерывности потока через оболочку записывается как

$$\frac{\dot{\tilde{m}}_-(v_-(v))}{\tilde{f}_-(\tilde{m}_-, v)} = \frac{\dot{m}_+(v)}{f(v)}. \quad (49)$$

Используя уравнение геодезической для нахождения положения оболочки, $f(v) = 2\dot{r}_s$, и записывая $f_-(\tilde{m}_-, v) = f(v) + 2(m_+ - \tilde{m}_-)/r_s$, получаем уравнение (49) в виде

$$\frac{\dot{\tilde{m}}_-(v)}{2\dot{r}_s + 2(m_+ - \tilde{m}_-)/r_s} = -\frac{\delta \dot{m}_{pr}}{2\dot{r}_s}, \quad (50)$$

Из уравнения (48) имеем

$$\frac{\delta \dot{m}_{pr}}{2\dot{r}_s} = \frac{\kappa \tilde{r}_-}{2} \left(1 + \frac{p+1}{v\kappa} \right). \quad (51)$$

Пренебрегая в левой части уравнения (50) малым членом \dot{r}_s , получаем

$$\dot{\tilde{m}}_- \simeq (\tilde{m}_- - m_0)\kappa \left(1 + \frac{p+1}{v\kappa} \right). \quad (52)$$

Здесь мы сталкиваемся с принципиальным отличием от черной дыры Хейворда: уравнение (52) имеет первый порядок по \tilde{m}_- , а (28) содержит \tilde{m}_- квадратично. Решая уравнение (51), получаем

$$\begin{aligned} \tilde{m}_-(v) &= e^{\kappa v + (p+1) \ln v} \times \\ &\times \left(C - \kappa m_0 \int^v dv \left(1 + \frac{p+1}{v\kappa} \right) e^{-\kappa v - (p+1) \ln v} \right) \simeq \\ &\simeq C e^{\kappa v} v^{(p+1)} - m_0. \end{aligned} \quad (53)$$

Чтобы закончить сравнение расчетов внутренней массы в черных дырах РН и Хейворда, мы вычисляем внутреннюю массу черной дыры РН в подходе Ори, как в разделе 2.2.

Уравнение (34) для стороны (+),

$$2z'_+ = f_+ + Rf_{+,r},$$

дает

$$2z'_+ = 1 - \frac{e^2}{r_s^2} \simeq 1 - \frac{e^2}{\tilde{r}_-^2} = -2\kappa \tilde{r}_-, \quad (54)$$

(определения \tilde{r}_- и κ см. в (43) и (45)) и мы получаем

$$v_+ \equiv v = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{1}{\lambda}. \quad (55)$$

Уравнение (38) для случая черной дыры РН имеет вид

$$-\frac{2\tilde{m}'_-(v(\lambda))}{R} = \frac{R''}{R'} f(R, \tilde{m}_-(v)) \Big|_{R=r_s}. \quad (56)$$

Подставляя в уравнение (56) соотношения

$$-\frac{2\tilde{m}'_-}{r_s} \simeq \frac{2\dot{\tilde{m}}_-}{\tilde{r}_- \kappa \lambda}, \quad \frac{R''}{R'} = \frac{r''_s}{r'_s} = -\frac{1}{\lambda} \left(1 + \frac{p+1}{\ln \lambda} \right)$$

и

$$f(r_s, \tilde{m}_-) = \left(2\dot{r}_s + \frac{2(m_+ - \tilde{m}_-)}{r_s} \right),$$

мы получаем уравнение

$$\dot{\tilde{m}}_- \simeq (\tilde{m}_- - m_0) \kappa \left(1 + \frac{p+1}{v\kappa} \right), \quad (57)$$

которое совпадает с уравнением (52).

4. НЕСТАБИЛЬНОСТЬ ВНУТРЕННЕГО ГОРИЗОНТА ОТНОСИТЕЛЬНО ВНЕШНИХ ВОЗМУЩЕНИЙ

В этом разделе мы рассмотрим распространение скалярного поля в окрестности горизонта Коши и покажем, что имеющие степенную зависимость хвосты входящего в черную дыру потока, как их видит свободно падающий наблюдатель, расходятся на внутреннем горизонте.

Проблема внешних возмущений для черной дыры Хейворда обсуждается подобно тому, как это делается в случае черной дыры РН [12–15, 32], потому что причинные структуры обеих метрик схожи.

Для постановки задачи рассмотрим метрику Хейворда

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{dr^2}{f(r)} + r^2 d\Omega^2,$$

где

$$f(r) = f_{RN} g(r) = -\frac{(r_+ - r)(r - r_-)}{r^2} \frac{r^2(r - \tilde{r})}{r^3 + 2ml^2}. \quad (58)$$

Здесь $\tilde{r} = -r_-(-m)$ — отрицательный корень уравнения

$$r^3 - 2m(r^2 - l^2) = 0 = [(-r)^3 - (-2m)(r^2 - l^2)].$$

$g(r)$ — ограниченная функция без нулей и полюсов при $r > 0$.

В области (r_+, r_-) можно ввести черепашью координату $r_* = -\int dr/f(r)$

$$\begin{aligned} r_* = \int dr \frac{r^3 + 2ml^2}{(r_+ - r)(r - r_-)(r - \tilde{r})} = \\ -r - A_1(r_+^3 + 2ml^2) \ln(r_+ - r) - \\ -A_2(r_-^3 + 2ml^2) \ln(r - r_-) - \\ -A_3(\tilde{r}^3 + 2ml^2) \ln(r - \tilde{r}) + \text{const}, \end{aligned} \quad (59)$$

где

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{(r_+ - r_-)(r_+ - \tilde{r})}, \\ A_2 &= \frac{1}{(r_+ - r_-)(\tilde{r} - r_-)}, \\ A_3 &= \frac{1}{(r_+ - \tilde{r})(r_- - \tilde{r})}. \end{aligned} \quad (60)$$

Полагая, как в разд. 2 что $m \gg l$, так что

$$r_+ \simeq 2m, \quad r_- \simeq l, \quad \tilde{r} \simeq -l,$$

и

$$A_1 \simeq 1/(2m)^2, \quad A_2 \simeq -1/4ml, \quad A_3 \simeq 1/4ml,$$

получим

$$r_* \simeq -r - 2m \ln(r_+ - r) + \frac{l}{2} \ln(r - r_-) - \frac{l}{2} \ln(r - \tilde{r}). \quad (61)$$

В пределе $r \rightarrow r_-$ имеем

$$r_* \simeq \frac{l}{2} \ln \frac{r - r_-}{l}. \quad (62)$$

Определив нулевые координаты

$$v = -r_* + t, \quad u = -r_* - t,$$

найдем, что левая и правые ветви горизонта Коши суть гиперповерхности $(r_-, u = \infty)$ и $(r_-, v = \infty)$. Распространение скалярного поля $\Phi(x)$ описывается волновым уравнением $\Phi_{;\mu;\nu} f^{\mu\nu} = 0$, где $f_{\mu\nu}$ — компоненты метрики (58). Чтобы решить уравнение, разложим поле $\Phi(x)$ по сферическим гармоникам:

$$\Phi(x) = \int e^{-ikt} Y_{lm}(\theta, \varphi) H_{lm}(k) \frac{\varphi_{klm}(r)}{r} dk. \quad (63)$$

Функции $\varphi(r_*(r))$ (далее индексы klm опускаются) удовлетворяют уравнению

$$\frac{d^2 \varphi(r_*)}{dr_*^2} + [k^2 - V_l(r_*(r))] \varphi(r_*) = 0, \quad (64)$$

где потенциал V_l есть

$$V_l(r_*(r)) = -f(r) \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} \right].$$

Функция $H(k)$ в (63) определяется начальными данными $h(v)$, заданными на ветви $(r_+, u = -\infty)$ внешнего горизонта

$$H(k) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikv} h(v) dv. \quad (65)$$

Решения (64) $\varphi(r_*)$, имеющие асимптотический вид

$$e^{-ikt} \varphi(r_*) \sim e^{-ikv}$$

на горизонте r_+ , на горизонте r_- имеют вид

$$e^{-ikt} \varphi(r_*) \sim A(k)e^{-ikv} + B(k)e^{iku}, \quad r_* \rightarrow -\infty,$$

где $A_{lm}^2 - B_{lm}^2 = 1$.

Входящее поле $\Phi(r_*, t)$ распространяется внутри черной дыры и вблизи r_- рассеивается на потоки $X(v)$ и $Y(u)$:

$$\begin{aligned} \Phi(r_*, t) &\rightarrow X(v) + Y(u) = \\ &= \int dk H(k) (A(k) - 1) e^{-ikv} + \\ &+ \int dk H(k) B(k) e^{iku}. \end{aligned} \quad (66)$$

В пределе $v, u \rightarrow \infty$ основной вклад в $X(v)$ и $Y(u)$ дает интегрирование в окрестности $k = 0$ [12, 13]. Для степенного хвоста Прайса $h(v) = \delta m_{pr} = \beta \theta(v - v_0) v^{-p}$ получаем

$$\begin{aligned} X(v) &= \beta v^{-p} (A(0) - 1), \quad v \rightarrow \infty, \\ Y(u) &= \beta u^{-p} B(0), \quad u \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (67)$$

Поля $X(v)$ и $Y(u)$ конечны на горизонте Коши.

Найдем, какую плотность энергии измеряет свободно падающий наблюдатель вблизи внутреннего горизонта. Компоненты скорости радиально падающего наблюдателя суть [14, 32]

$$U^t = \frac{E}{f(r)}, \quad U^r = -\sqrt{E^2 - f(r)}, \quad (68)$$

и

$$U^{r_*} = \sqrt{E^2 - f(r)}/f(r).$$

Поток, видимый свободно падающим наблюдателем, есть

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= U^i \Phi_i = U^t \Phi_{,t} + U^{r_*} \Phi_{,r_*} = \\ &= \frac{E}{f(r)} (X_{,v} - Y_{,u}) + \frac{\sqrt{E^2 - f(r)}}{f(r)} (-X_{,v} - Y_{,u}) = \end{aligned}$$

$$= \frac{X_{,v}}{f(r)} (E - \sqrt{E^2 - f(r)}) - \frac{Y_{,u}}{f(r)} (E + \sqrt{E^2 - f(r)}). \quad (69)$$

В пределе $r \rightarrow r_-$ или $r_* \rightarrow -\infty$ функция $f(r)$ обращается в нуль:

$$f(r) \sim 2 \frac{r - r_-}{l} \sim \frac{e^{2r_*/l}}{2}.$$

Если $E > 0$, то поток равен

$$\mathcal{F} \simeq -\frac{f(r)}{2E} X_{,v} - \frac{2E}{f(r)} Y_{,u}. \quad (70)$$

На ветви $(r_-, u \rightarrow \infty)$ первый член конечен, а второй растет. Если $E < 0$, получаем

$$\mathcal{F} \simeq \frac{2|E|}{f(r)} X_{,v} + \frac{f(r)}{2|E|} Y_{,u}. \quad (71)$$

На ветви $(r_-, v \rightarrow \infty)$ первый член возрастает, а второй конечен. Потоки, измеренные свободно падающим наблюдателем

$$E > 0: \mathcal{F}|_{(r_-, u \rightarrow \infty)} = -2E\beta p u^{-p-1} B(0) e^{2u/l}, \quad (72)$$

$$E < 0: \mathcal{F}|_{(r_-, v \rightarrow \infty)} = 2E\beta p v^{-p-1} (A(0) - 1) e^{2v/l}. \quad (73)$$

Видно, что наблюдаемые потоки экспоненциально расходятся на внутреннем горизонте.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе мы изучили внутреннюю массовую функцию в модели Хейворда регулярной черной дыры с потоками и сравнили ее с соответствующей функцией черной дыры РН. Мы предположили, что масса черной дыры без потоков, m_0 , намного больше основного параметра ядра l . Предполагая справедливость классического описания, мы считаем параметр ядра l больше планковской длины l_p .

Мы рассчитали внутреннюю массу двумя способами, первый из которых основан на учете непрерывности потока через оболочку, а второй использует исходный подход Ори [25] (точнее, оба метода находятся в рамках подхода Ори, потому что в обоих методах входящий поток считался непрерывным потоком Прайса, а исходящий поток моделировался нулевой оболочкой без давления). Оба метода дают конечное отрицательное значение для внутренней массовой функции. Внутренняя масса не является непосредственно измеримой величиной, и в работе [6, 29] было высказано предположение, что этот результат является артефактом параметризации. Однако хорошая параметризация неизвестна.

Формально, различное поведение внутренних массовых функций в черных дырах РН и Хейворда восходит к следующему. Схематически в случае дыры РН уравнение для внутренней массы имеет вид

$$\frac{dm}{dv} - cm = -\delta m_{pr},$$

где $c > 0$, что приводит к экспоненциальному росту по v . Для черной дыры Хейворда мы имеем

$$\frac{dm}{dv} = (m - c)^2 - a^2, \quad c, a > 0,$$

что дает

$$\left| \frac{(m - c) - a}{(m - c) + a} \right| = Ce^{2av}.$$

В пределе $v \rightarrow \infty$ решение для $m(v)$ есть $m = c - a$, что для конкретных значений c и a приводит к $m < 0$.

Другой подход, используемый в работах [6, 17] для нахождения внутренней массовой функции, основан на соотношении ДТР [19, 20]. При таком подходе потоки внутри черной дыры моделируются тонкими оболочками. Формула ДТР дает связь между массами метрик входящих и исходящих сферических оболочек в областях между оболочками до и после столкновения. В работе [17] в случае черной дыры РН соотношение ДТР было получено из системы уравнений Эйнштейна. Для петлевых черных дыр и дыр Хейворда необходимо использовать обобщенную формулу ДТР [6, 27], которая не требует использования уравнений Эйнштейна. Оказывается, что во всех случаях черных дыр РН, Хейворда и петлевых черных дыр обобщенное соотношение ДТР показывает расходимость массовой функции пространства-времени вблизи горизонта Коши после того, как произошло пересечение оболочек. Было отмечено, что соотношение ДТР, являясь непертурбативным, объясняет нелокальные и нелинейные эффекты [27]. Однако подход ДТР нельзя напрямую сравнивать с подходом Ори, поскольку отсутствует четкая связь между формулой ДТР и подходами типа подхода Ори.

В работе [33] было показано, что в системе с пересекающимися внутри черной дыры потоками, порожденными аккрецией, появляется массовая инфляция. Потоки распространяются на фоне сферически-симметричного пространства-времени, и массовая инфляция возникает, когда 4-скорости потоков увеличиваются при приближении к внутреннему горизонту. Поскольку 4-скорость наблюдаемого потока связана с 4-скоростью наблюдающего потока через лоренцев буст, встречная скорость

потоков экспоненцируется, как и плотность энергии центра масс потоков, что приводит к увеличению внутренней массы. Однако в работе [33] расчеты проводились с помощью специально построенной метрики, и конкретная переформулировка результатов этой работы для моделей с метрикой вида (1) представляет проблему.

Из-за похожей причинной структуры метрик черных дыр Хейворда и РН в обоих случаях распространение внешних возмущений также похоже. Если возмущение представляет собой поток Прайса, то в обоих случаях свободно падающий наблюдатель, приближающийся к внутреннему горизонту, измеряет возрастающий поток энергии. Это свойство интерпретируется как нестабильность внутреннего горизонта. Однако этот эффект напрямую не связан с внутренней массовой инфляцией.

Благодарности. Я благодарен М. Смолякову и И. Волобуеву за обсуждения и полезные замечания. Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, проект “Физика частиц и космология”.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.M. Bardeen, Proc. 5th Int. conf. on general relativity and gravitation GR5, Tbilisi, USSR, 174 (1968).
2. I. Dymnikova, Class. Quant. Grav. **19**, 725 (2002).
3. S.A. Hayward, Phys. Rev. Lett. **96**, 031103 (2006).
4. A. Bonanno and M. Reuter, Phys. Rev. D **62**, 043008 (2000).
5. S. Ansoldi, ArXiv 0802.0330.
6. E.G. Brown, R.B. Mann and L. Modesto, Phys. Rev. D **84**, 104041 (2011).
7. E. Ayon-Beato, A. Garcia, Phys. Lett. B **493**, 149 (2000).
8. R.H. Price, Phys. Rev. D **5**, 2419 (1972).
9. M. Simpson and R. Penrose, Int. J. Theor. Phys. **7**, 183 (1973).
10. J.M. McNamara, Proc. R. Soc. A **358**, 499 (1978).
11. J.M. McNamara, Proc. R. Soc. A **364**, 121 (1978).
12. Y. Gursel, I.D. Novikov, V.D. Sandberg and A.A. Starobinski, Phys. Rev. D **19**, 413 (1979).
13. Y. Gursel, I.D. Novikov, V.D. Sandberg and A.A. Starobinski, Phys. Rev. D **19**, 1260 (1979).

14. S. Chandrasekhar, *The Mathematical Theory of Black Holes*, Oxford University Press, New York (1983).
15. A. Ori, Phys. Rev. D **55**, 4860 (1997).
16. A. Ori, Phys. Rev. D **57**, 2621 (1998).
17. E. Poisson and W. Israel, Phys. Rev. D **41**, 1796 (1990).
18. P.C. Vaidia, Proc. Ind. Acad. Sci. A **33**, 264 (1951).
19. T. Dray and G. 't Hooft, Commun. Math. Phys. **99**, 613 (1985).
20. I.H. Redmount, Prog. Theor. Phys. **73**, 1401 (1985).
21. A. Bonanno, S. Droz, W. Israel and S.M. Morsink, ArXiv gr-qc/9411050.
22. L.M. Burko, Phys. Rev. Lett. **79**, 4958 (1997).
23. L.M. Burko and A. Ori, Phys. Rev. D **57**, R7084 (1998).
24. P.R. Brady, Prog. Theor. Phys. Suppl. **136**, 29 (1999).
25. A. Ori, Phys. Rev. Lett. **67**, 789 (1991).
26. W.G. Anderson, P.R. Brady, W. Israel and S.M. Morsink, Phys. Rev. Lett. **70**, 1041 (1993).
27. C. Barrabes and W. Israel, Phys. Rev. D **43**, 1129 (1991).
28. R. Carballo-Rubio, F. Di Filippo, S. Liberati, C. Pacilio and M. Visser, JHEP **07**, 23 (2018).
29. R. Carballo-Rubio, F. Di Filippo, S. Liberati, C. Pacilio and M. Visser, ArXiv 2101.05006.
30. A. Bonanno, A.-P. Khosravi and F. Saueressig, Phys. Rev. D **103**, 124027 (2021).
31. E. Poisson, ArXiv gr-qc/0207101.
32. R.A. Matzner, N. Zamorano and V.D. Sandberg, Phys. Rev. D **19**, 2821 (1979).
33. A.J. Hamilton and P.P. Avelino, Phys. Rept. **495**, 1 (2010).

GRAVITATIONAL FIELD EFFECTS PRODUCED BY TOPOLOGICALLY NON-TRIVIAL GEOMETRY AND ROTATING FRAMES SUBJECT TO A COULOMB-TYPE SCALAR POTENTIAL

F. Ahmed ^{a*}

^a *Department of Physics, University of Science and Technology Meghalaya, Ri-Bhoi, Meghalaya-793101, India*

Received July 17, 2022

revised version August 26, 2022,

Accepted for publication August 26, 2022

DOI: 10.31857/S0044451022110074

EDN: KYWSPL

1. INTRODUCTION

Rotation and rotating frames have always been a source of confusion while dealing with the problem of a uniformly rotating disk and its spatial geometry in the context of special theory of relativity (STR) [1]. An interesting feature in treating a rotational phenomena is the Galilean rotational transformation (GRT) between inertial (laboratory) frames and non-inertial rotating frames.

This coordinate transformation $\{x^\mu\} \rightarrow \{x'^\mu\}$ is defined by $(t \rightarrow t', r \rightarrow r', \phi \rightarrow \phi' + \Omega t', z \rightarrow z')$ [2–4], where Ω is the uniform angular speed of the rotating frame measured by an observer in the inertial frame. They had showed that the axial coordinate is restricted by $0 \leq r < \frac{c}{\Omega}$ and others are usual ranges. Rotating frame of reference for various physical systems have been investigated in literature, for instance, on free scalar fields [5], on the Dirac particle [6], on a neutral particle [7], with quantum states under an electromagnetic field [8],

on the Dirac oscillator [9–11], on the Dirac particle subject to a hard-wall confining potential [12], on massive scalar fields [13], on spin-1 particles [14], on quantum fermionic fields inside a cylinder [15], on scalar bosons subject to Coulomb-type potential [16], on scattering problem of a non-relativistic particle [17], on spin-zero scalar particles in a space-time with space-

like and spiral dislocations [18], on spin-zero scalar massive charged particles subject to Coulomb-type scalar and vector potentials [19], on spin-1/2 particles with a field and mixed potential [20], on the Casimir energy in a space-time with one extra compactified dimension [21], on spin-zero scalar particles in a space-time with magnetic screw dislocation [22], on the Dirac particles in an accelerated reference frame [23], on the Dirac fields in a space-time with spiral dislocation [24], on spin-zero scalar particles in a space-time with distortion of a vertical line to a vertical spiral [25], on the Klein-Gordon oscillator in a topologically non-trivial space-time [26] and in a cosmic string space-time with space-like dislocation [27], on spin-zero scalar particles in a Lorentz symmetry violation environment [28], on spin-zero scalar particles induced by the topology associated with a time-like dislocation space-time [29], on spin-zero scalar massive charged particles subject to Coulomb-type potential [30], on scalar particles [31,32], and the Klein–Gordon oscillator with scalar potential [33] in the context of Kaluza–Klein theory.

We are mainly interest on a space-time that is produced by a non-trivial topology defined by the geometry $\mathbf{S}^1 \times \mathbf{R}^3$, where \mathbf{R}^3 represents usual directions and \mathbf{S}^1 is a compact dimension (see fig. 1). The metric in polar coordinates (t', r', ϕ', θ') for this topologically non-trivial geometry is given by $ds^2 = -dt'^2 + dr'^2 + r'^2 d\phi'^2 + R^2 d\theta'^2$ [26].

For \mathbf{S}^1 rotating frame of reference, we perform the coordinate transformation from inertial frame (t, r, ϕ, θ) to the rotating frame $(t' = t, r' = r, \phi' = \phi, \theta' = \theta + \Omega t)$, one will have

* E-mail: faizuddinahmed15@gmail.com

$$ds^2 = -\left(1 - R^2 \Omega^2\right) dt^2 + dr^2 + r^2 d\phi^2 + R^2 d\theta^2 + 2\Omega R^2 dt d\theta. \tag{1}$$

The ranges of the coordinate $0 < \theta < 2\pi$ and others are in the usual ranges. Here R is radius of the compact dimension S^1 , and the determinant of the corresponding metric tensor $g_{\mu\nu}$ is $\det g = -r^2 R^2$. An interesting feature one can see in contrast to the rotating Minkowski space-time is that the radius of the compact dimension S^1 satisfies the condition $R < \frac{1}{\Omega}$ [26] such that the metric component g_{tt} is always negative otherwise this rotating system is physically unacceptable for $R > \frac{1}{\Omega}$.

2. GRAVITATIONAL FIELD EFFECTS UNDER ROTATING FRAME ON SCALAR BOSONS SUBJECT TO COULOMB-TYPE POTENTIAL

In this section, we study the relativistic quantum motions of scalar bosons subject to a Coulomb-type scalar potential in a topologically non-trivial rotating space-time. There are two ways that one can introduce a potential into the KG-equation. First one being an electromagnetic four-vector potential A_μ that can be introduced through a minimal substitution in momentum four-vector via $p_\mu \rightarrow (p_\mu - e A_\mu)$ or in the partial derivative via $\partial_\mu \rightarrow (\partial_\mu - i e A_\mu)$ [39], where e is the electric charges. This procedure has been widely used by several authors in literature [16, 19, 27, 30–33, 40–44]. The second procedure is to introduce a scalar potential $S(t, r)$ by modifying the mass term in the KG-equation via transformation $M^2 \rightarrow (M + S(t, r))^2$. This procedure has also been used by several authors to study the effects of potential in quantum systems [16, 19, 27, 30–33, 39–42].

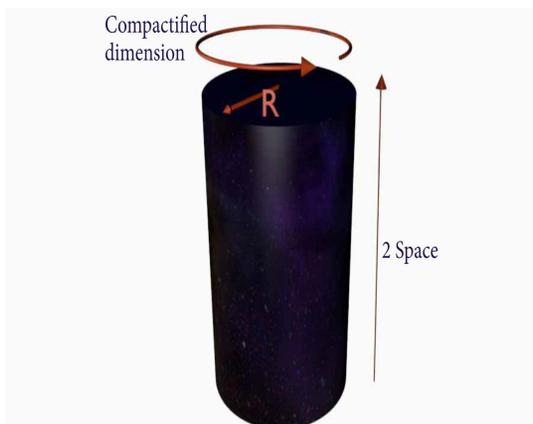


Fig. 1. Representation of the topologically non-trivial geometry $S^1 \times R^3$ [26]

Thus, the quantum dynamics of scalar bosons subject to a potential $S(r)$ following the first approach is described by the wave equation [19, 21–23, 30–33, 39–44]

$$\left[-\frac{1}{\sqrt{-g}} D_\mu \left(\sqrt{-g} g^{\mu\nu} D_\nu \right) + \left(M + S(r) \right)^2 \right] \Psi = 0, \tag{2}$$

where M is the rest mass of the scalar bosons.

In this analysis, we have chosen the electromagnetic four-vector potential $A_\mu = (0, \vec{A})$ [22, 27, 33, 42, 44] with the following components

$$A_r = 0 = A_\theta, \quad A_\phi = \frac{\Phi_B}{2\pi}, \tag{3}$$

where $\Phi_B = \Phi \Phi_0$ is the Aharnov-Bohm flux which is a constant, $\Phi_0 = \frac{2\pi}{e}$ is the amount of quantum flux, and Φ is the magnetic flux which is a positive integer. The presence of a magnetic flux in quantum system shows an analogue of the Aharonov-Bohm effect [37, 38] which is a quantum mechanical phenomena that has been studied by many researchers in literature [27, 30–33, 41–44].

The Klein-Gordon equation (2) using (3) in the rotating space-time background (1) becomes

$$\left[-\left(\frac{\partial}{\partial t} - \Omega \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} - i \Phi \right)^2 + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \Psi = \left(M + S(r) \right)^2 \Psi. \tag{4}$$

Several authors have been studied quantum motions of scalar and spin-half particles using potential of different kinds, such as the Cornell-type potential [40, 41]. In this analysis, we are interested on another kind of potential proportional to the inverse of the axial distance. This type of potential is used for short-range interactions and called the Coulomb-type potential given by

$$S(r) \propto \frac{1}{r} \Rightarrow S(r) = \frac{\eta}{r}, \tag{5}$$

where $\eta > 0$ is a constant characterizes the potential parameter. This Coulomb-type potential has widely been studied in literature [41, 43, 45–57].

The total wave function $\Psi(t, r, \phi, z)$ can express in terms of a radial wave function $\psi(r)$ as follows:

$$\Psi(t, r, \phi, \theta) = e^{i(-Et + l\phi + q\theta)} \psi(r), \tag{6}$$

where E is energy of the scalar bosons, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ are the eigenvalues of the angular momentum operator $-i \hat{\partial}_\phi$, and q is a constant associated with the operator $-i \hat{\partial}_\theta$. Noted that for S^1 compact dimension defined by

a finite radius R satisfying the condition $R < \frac{1}{\Omega}$, the total wave function obeys the following condition

$$\Psi(\theta + 2\pi R) = \Psi(\theta). \tag{7}$$

Thereby, substituting the scalar potential (5) and the total wave function Eq. (6) into the Eq. (4), we have obtained the following radial wave equation

$$\psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) + \left[-\delta^2 - \frac{j^2}{r^2} - \frac{2\gamma}{r} \right] \psi(r) = 0, \tag{8}$$

where

$$\delta = \sqrt{M^2 + \frac{n^2}{R^2} - (E + \Omega n)^2}, \quad j = \sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2},$$

$$\gamma = M \eta. \tag{9}$$

Performing a change of variables via $\xi = 2\delta r$ into the Eq. (8), we have

$$\psi''(\xi) + \frac{1}{\xi} \psi'(\xi) + \left(-\frac{j^2}{\xi^2} - \frac{\gamma}{\delta} \frac{1}{\xi} - \frac{1}{4} \right) \psi(\xi) = 0. \tag{10}$$

Suppose, a possible solution for the Eq. (10) in terms of a function $F(\xi)$ as:

$$\psi(\xi) = \xi^j e^{-\frac{\xi}{2}} F(\xi). \tag{11}$$

Substituting this solution (11) into the Eq. (10), we have obtained the following second-order differential equation:

$$\xi F''(\xi) + (1 + 2j - \xi) F'(\xi) + \left(-j - \frac{\gamma}{\delta} - \frac{1}{2} \right) F(\xi) = 0. \tag{12}$$

Equation (12) is the well-known confluent hypergeometric equation form [58, 59]. As state in Refs. [16, 19, 22, 26, 43, 51, 56, 58, 59], the solution to the differential equation of the form (12) can be expressed in terms of a confluent hyper-geometric function $F(\xi) = {}_1F_1\left(j + \frac{\gamma}{\delta} + \frac{1}{2}, 2j + 1; \xi\right)$ which is well-behaved for $\xi \rightarrow \infty$. Then, in searching for the bound-state solutions of the wave equation, the function ${}_1F_1$ must be a finite degree polynomial in ξ of degree n , and the quantity $\left(j + \frac{\gamma}{\delta} + \frac{1}{2}\right) = -n$ [16, 19, 22, 26, 43, 51, 56, 58, 59], where $n = 0, 1, 2, \dots$

After simplifying this condition $\left(j + \frac{\gamma}{\delta} + \frac{1}{2}\right) = -n$, one will have the following expression of the energy eigenvalues:

$$E_{n,l,q} = -\Omega q \pm \left[M^2 + \frac{q^2}{R^2} - \frac{\eta^2}{\left(n + \sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2} + \frac{1}{2}\right)^2} \right]^{1/2}. \tag{13}$$

The radial wave function is given by

$$\psi_{n,l}(\xi) = \xi^{\sqrt{(l-\Phi)^2 + \eta^2}} e^{-\frac{\xi}{2}} \times {}_1F_1\left(j + \frac{\gamma}{\delta} + \frac{1}{2}, 2j + 1; \xi\right). \tag{14}$$

Equation (13) is the relativistic energy eigenvalue and Eq. (14) is the radial wave function of the scalar bosons in a topologically non-trivial rotating space-time subject to a Coulomb-type external potential. We can see that the eigenvalue solution is modified by the non-trivial topology of the geometry defined by the radius R , and the Coulomb-type potential. We also see that the energy levels are shifted by rotating frame of reference, and hence, these are not equally spaced on either side about $E_{n,l,q} = 0$ for constant values of l, q . This effect arises due to the coupling between the quantum number $q \neq 0$ and the uniform angular speed Ω of rotating frame of reference.

In Ref. [26], authors studied the Klein-Gordon oscillator in a non-trivial topological space-time geometry. They solved the wave equation analytically and obtained the following energy eigenvalue expression (see Eq. (28) there and we have replaced $n \rightarrow q$)

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{M^2 + \frac{q^2}{R^2} + 2M\omega(2N' + |l|)}, \tag{15}$$

where $N' = N + 1 = 1, 2, 3, \dots$

One can easily show that the presented energy eigenvalue (13) is completely different from the result (15) obtained in Ref. [26]. This is because, we have considered a non-inertial reference frame which rotates with constant angular speed Ω , the Coulomb-type scalar potential characterise by the parameter η as well as the magnetic flux Φ which shifts the energy levels and the wave function. Thus, our presented result in this section is completely new and different from the previous result given in Ref. [26].

3. GRAVITATIONAL FIELD EFFECTS UNDER ROTATING FRAME ON KG-OSCILLATOR SUBJECT TO COULOMB-TYPE SCALAR POTENTIAL

In this section, we will study the Klein-Gordon oscillator [60] subject to an external potential in a topologically non-trivial four-dimensional rotating space-time. In Ref. [26], authors studied the KG-oscillator in this topologically non-trivial rotating space-time without any external potential. In this work, we have inserted a Coulomb-type external potential and magnetic

flux as stated earlier and analyze their effects on the eigenvalue solution of the oscillator fields. The KG-oscillator analogous to the Dirac oscillator [61] has attracted attention among researchers in current times (see, Refs. [19, 22, 26, 27, 33, 57, 62]). The KG-oscillator is examined by the replacements of the radial momentum vector [19, 22, 26, 27, 33, 57, 62]

$$\vec{p} \rightarrow (\vec{p} - i M \omega r \vec{r}), \quad \vec{p}^\dagger \rightarrow (\vec{p}^\dagger + i M \omega r \vec{r}), \quad (16)$$

where ω is the frequency of the oscillator fields, and r being distance from the particle to the axis of symmetry.

Therefore, the Klein-Gordon oscillator equation is given by

$$\left[-\frac{1}{\sqrt{-g}} \left(D_\mu + M \omega X_\mu \right) \times \right. \\ \left. \times \left\{ \sqrt{-g} g^{\mu\nu} \left(D_\nu - M \omega X_\nu \right) \right\} + \right. \\ \left. + \left(M + S(r) \right)^2 \right] \Psi = 0, \quad (17)$$

where $X_\mu = (0, r, 0, 0) = r \delta_\mu^r$ is a four-vector.

Explicitly writing the KG-oscillator equation (17) in the rotating space-time background (1) and using the electromagnetic potential Eq. (3) and the external potential Eq. (5), we have

$$\left[-\left(\frac{\partial}{\partial t} - \Omega \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - M^2 \omega^2 r^2 - 2 M \omega \right. \\ \left. + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} - i \Phi \right)^2 + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \Psi = \left(M + \frac{\eta}{r} \right)^2 \Psi. \quad (18)$$

Substituting the wave function (6) into the Eq. (18), we have obtained the following radial wave equation:

$$\psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) + \left[\Lambda - M^2 \omega^2 r^2 - \frac{j^2}{r^2} - \frac{2\gamma}{r} \right] \psi(r) = 0, \quad (19)$$

where j, γ are defined in Eq. (9) and

$$\Lambda = (E + \Omega q)^2 - M^2 - 2 M \omega - \left(\frac{q}{R} \right)^2. \quad (20)$$

Let us now perform a change of variables via $x = \sqrt{M \omega} r$. Then, Eq. (19) can be rewritten as

$$\psi''(x) + \frac{1}{x} \psi'(x) + \left[\frac{\Lambda}{M \omega} - x^2 - \frac{\varsigma}{x} - \frac{j^2}{x^2} \right] \psi(x) = 0, \quad (21)$$

where $\varsigma = \frac{2\gamma}{\sqrt{M \omega}}$.

As stated earlier the wave function $\psi(x)$ is well-behaved and regular everywhere. Suppose, a possible solution to the above radial wave equation Eq. (21) is given by

$$\psi(x) = x^j e^{-\frac{x^2}{2}} H(x), \quad (22)$$

where $H(x)$ is an unknown function.

Thereby, substituting the radial wave function Eq. (22) into the Eq. (21), we have

$$H''(x) + \left[\frac{1 + 2j}{x} - 2x \right] H'(x) + \left[-\frac{\varsigma}{x} + \Xi \right] H(x) = 0, \quad (23)$$

where $\Xi = \frac{\Lambda}{M \omega} - 2(1 + j)$.

Equation (23) is the biconfluent Heun differential equation form [22, 32, 33, 40, 42] and $H(x)$ is the Heun function. Substituting a power series expansion

$$H(x) = \sum_{i=0}^{\infty} d_i x^i$$

[59] into the Eq. (23), we have obtained few coefficients

$$d_1 = \left(\frac{\varsigma}{1 + 2j} \right) d_0, \quad d_2 = \frac{1}{4(1 + j)} \left[\varsigma d_1 - \Xi d_0 \right]$$

with the following recurrence relation

$$d_{m+2} = \frac{1}{(m + 2)(m + 2 + 2j)} \left[\varsigma d_{m+1} - (\Xi - 2m) d_m \right]. \quad (24)$$

One can see this power series expansion $H(x)$ becomes a polynomial of finite degree m by imposing the following two conditions [22, 32, 33, 40, 42]

$$\Xi = 2m \quad (m = 1, 2, \dots), \quad d_{m+1} = 0. \quad (25)$$

By analyzing the first condition, we have obtained following energy eigenvalue $E_{m,l,q}$ expression:

$$E_{m,l,q} = -\Omega q \pm \\ \pm \left[M^2 + 2 M \omega_{m,l} \times \right. \\ \left. \times \left(m + \sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2} + 2 \right) + \frac{q^2}{R^2} \right]^{1/2}. \quad (26)$$

The corresponding radial wave function is given by

$$\psi_{m,l}(x) = x^{\sqrt{(l-\Phi)^2 + \eta^2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H(x), \quad (27)$$

where $H(x)$ is now a finite degree polynomial of degree m .

Finding solutions of the quantum system still not complete because one must analyze the second condition $d_{m+1} = 0$ one by one to get the complete information of a quantum state. As example, for the radial

mode $m = 1$, we have $\Xi = 2$ and $d_2 = 0$ which gives us a constraint on the oscillation frequency $\omega \rightarrow \omega_{1,l}$ given by

$$\omega_{1,l} = \left(\frac{M \eta^2}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + \frac{1}{2}}} \right). \tag{28}$$

Therefore, the ground state energy level associated with the radial mode $m = 1$ is given by

$$E_{1,l,q} = -\Omega q \pm \sqrt{1 + 2\eta^2 \left(\frac{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + 3}}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + \frac{1}{2}}} \right) + \left(\frac{q}{MR} \right)^2}. \tag{29}$$

And the ground state radial wave function is given by

$$\psi_{1,l}(x) = x^{\sqrt{(l-\Phi)^2+\eta^2}} e^{-\frac{x^2}{2}} \times \left(1 + \frac{x}{\sqrt{\sqrt{(l-\Phi)^2+\eta^2} + \frac{1}{2}}} \right) d_0. \tag{30}$$

Similarly, for the radial mode $m = 2$, we have $\Xi = 4$ and $d_3 = 0$ which gives us another constraint on the oscillation frequency $\omega \rightarrow \omega_{2,l}$ given by

$$\omega_{2,l} = \frac{1}{2} \left(\frac{M \eta^2}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + 1}} \right), \tag{31}$$

Therefore, the first excited state energy level of the bound-states solution defined by the radial mode $m = 2$ is given by

$$E_{2,l,q} = -\Omega q \pm \sqrt{1 + \eta^2 \left(\frac{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + 3}}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + 1}} \right) + \left(\frac{q}{MR} \right)^2}. \tag{32}$$

And the corresponding radial wave function is given by

$$\psi_{2,l}(x) = x^{\sqrt{(l-\Phi)^2+\eta^2}} e^{-\frac{x^2}{2}} (d_0 + d_1 x + d_2 x^2), \tag{33}$$

where

$$d_1 = 2 \left(\frac{\sqrt{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + \frac{3}{4}}}}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + \frac{1}{2}}} \right) d_0, \tag{34}$$

$$d_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{(l - \Phi)^2 + \eta^2 + \frac{1}{2}}} \right) d_0.$$

We can see that the energy eigenvalues and the wave function are modified by the non-trivial topology of the

space-time geometry, and the Coulomb-type potential. One can show that the presented energy eigenvalue gets modified in comparison to those result obtained in [26] due to the presence of the Coulomb-type external potential and the magnetic quantum flux. This Coulomb-type external potential is responsible for the bound-state solutions, and thus, the ground state is defined by the radial quantum number $n = 1$ instead of $n = 0$.

4. CONCLUSIONS

In this analysis, we have determined solutions of the wave equation under the effects of the gravitational field produced a topologically non-trivial geometry subject to a Coulomb-type external potential in a rotating frame of reference. We have seen that the non-trivial topology of the geometry defined by the radius R of the compact dimension, and the Coulomb-type external potential modified the eigenvalue solutions. Furthermore, the presence of the magnetic flux causes a change in the angular quantum number $l \rightarrow l_0 = \left(l - \frac{e\Phi_B}{2\pi} \right)$ which shows that the energy eigenvalue depends on the geometric quantum phase. This dependence of the eigenvalue on the geometric quantum phase gives us the gravitational analogue to the Aharonov-Bohm effect [37, 38]. Several authors have been investigated this quantum mechanical effect in literature (*e. g.*, [27, 30, 31, 33]). Also, we have seen a coupling between the angular quantum number q and the uniform angular speed Ω of the rotating frame of reference. This coupling causes asymmetry in the relativistic energy levels, and hence, are not equally spaced on either side about $E_{n/m,l,q} = 0$ for constant values of l, q .

We has seen that the presence of Coulomb-type potential allowed the formation of bound-state solutions and causes difference in results with those obtained in Ref. [26]. Another point we have noticed is that the rotating frames restricted the radius of compact circle \mathbf{S}^1 in the range $R < \frac{1}{\Omega}$, and an analogous to the Sagnac-type effect [6, 10, 27, 33] is observed due to the coupling between the quantum number q and uniform angular speed Ω of rotating frames. This coupling causes asymmetry in the energy levels and therefore, they are not equally spaced on either side about $E_{n,l,q} = 0$ for constant values of l, q .

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

REFERENCES

1. A. Einstein, *Relativity: The special and general theory* (Translated by Robert W. Lawson), Pi Press, New York (2005).
2. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The classical Theory of Fields* (Course of Theoretical Physics) **Vol. 2**, Pergamon Press (1975).
3. C. Möller, *The theory of Relativity*, Oxford University Press, Oxford (1972).
4. W. Rindler, *Relativity: Special, General, and Cosmological*, Oxford University Press (2006).
5. J. R. Letaw and J. D. Pfautsch, *Phys. Rev. D* **22**, 1345 (1980).
6. F. W. Hehl and W.-T. Ni, *Phys. Rev. D* **42**, 2045 (1990).
7. K. Bakke and C. Furtado, *Phys. Rev. D* **80**, 024033 (2009).
8. K. Konno and R. Takahashi, *Phys. Rev. D* **85**, 061502(R) (2012).
9. K. Bakke, *Eur. Phys. J. Plus* **127**, 82 (2012).
10. K. Bakke, *Gen. Relativ. Gravit.* **45**, 1847 (2013).
11. P. Strange and L. H. Ryder, *Phys. Lett. A* **380**, 3465 (2016).
12. K. Bakke, *Mod. Phys. Lett. B* **27**, 1350018 (2013).
13. H. F. Mota and K. Bakke, *Phys. Rev. D* **89**, 027702 (2014).
14. M. Hosseinpour and H. Hassanabadi, *Eur. Phys. J. Plus* **130**, 236 (2015).
15. V. E. Ambrus and E. Winstanley, *Phys. Rev. D* **93**, 104014 (2016).
16. L. B. Castro, *Eur. Phys. J. C* **76**, 61 (2016).
17. H. F. Mota and K. Bakke, *Gen. Relativ. Gravit.* **49**, 104 (2017).
18. R. L. L. Vitória and K. Bakke, *Eur. Phys. J. C* **78**, 175 (2018).
19. L. C. N. Santos and C. C. Barros Jr., *Eur. Phys. J. C* **78**, 13 (2018).
20. B.-Q. Wang, Z.-W. Long, C.-Y. Long and S.-R. Wu, *Int. J. Mod. Phys. A* **33**, 1850158 (2018).
21. L. C. N. Santos and C. C. Barros Jr., *Int. J. Mod. Phys. A* **33**, 1850122 (2018).
22. R. L. L. Vitória, *Eur. Phys. J. C* **79**, 844 (2019).
23. L. C. N. Santos and C. C. Barros, *Int. J. Geom. Meths. Mod. Phys.* **16**, 1950140 (2019).
24. A. V. D. M. Maia and K. Bakke, *Eur. Phys. J. C* **79**, 551 (2019).
25. K. Bakke, *Eur. Phys. J. Plus* **134**, 546 (2019).
26. L. C. N. Santos, C. E. Mota and C. C. Barros, *Adv. High Energy phys.* **2019**, 2729352 (2019).
27. F. Ahmed, *Chin. J. Phys.* **66**, 587 (2020).
28. K. Bakke and H. Belich, *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2050023 (2020).
29. K. Bakke, V. B. Bezerra and R. L. L. Vitória, *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2050129 (2020).
30. F. Ahmed, *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2050101 (2020).
31. E. V. B. Leite, H. Belich and R. L. L. Vitória, *Mod. Phys. Lett. A* **35**, 2050283 (2020).
32. F. Ahmed, *Int. J. Mod. Phys. A* **36**, 2150204 (2021).
33. F. Ahmed, *Pramana-J. Phys.* **95**, 159 (2021).
34. M. G. Sagnac, *C. R. Acad. Sci. (Paris)* **157**, 708 (1913).
35. M. G. Sagnac, *C. R. Acad. Sci. (Paris)* **157**, 1410 (1913).
36. E. J. Post, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 475 (1967).
37. Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
38. M. Peshkin and A. Tonomura, *The Aharonov-Bohm Effect* (Lecture Notes in Physics) **340**, Springer-Verlag, Berlin (1989).
39. W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*, Springer-Verlag, Berlin, Germany (2000).
40. E. R. F. Medeiros and E. R. B. de Mello, *Eur. Phys. J. C* **72**, 2051 (2012).
41. E. V. B. Leite, H. Belich and R. L. L. Vitória, *Adv. High Energy Phys.* **2019**, 6740360 (2019).
42. R. L. L. Vitória and K. Bakke, *Eur. Phys. J. Plus* **133**, 490 (2018).
43. L. C. N. Santos and C. C. Barros Jr., *Eur. Phys. J. C* **77**, 186 (2017).
44. A. L. C. de Oliveira and E. R. Bezerra de Mello, *Class. Quantum Gravity* **23**, 5249 (2006).
45. K. Bakke, *Ann. Phys. (N. Y.)* **341**, 86 (2014).
46. K. Bakke and C. Furtado, *Ann. Phys. (N. Y.)* **355**, 48 (2015).

47. A. B. Oliveira and K. Bakke, *Ann. Phys. (N. Y.)* **365**, 66 (2016).
48. A. B. Oliveira and K. Bakke, *Proc. R. Soc. A* **472**, 20150858 (2016).
49. P. M. T. Barboza and K. Bakke, *Ann. Phys. (N. Y.)* **361**, 259 (2015).
50. P. M. T. Barboza and K. Bakke, *Eur. Phys. J. Plus* **131**, 32 (2016).
51. E. V. B. Leite, H. Belich and K. Bakke, *Adv. High Energy Phys.* **2015**, 925846 (2015).
52. F. Ahmed, *Gen. Relativ. Gravit.* **51**, 69 (2019).
53. F. Ahmed, *Gen. Relativ. Gravit.* **51**, 129 (2019).
54. R. L. L. Vitória, C. Furtado and K. Bakke, *Ann. Phys. (N. Y.)* **370**, 128 (2016).
55. R. L. L. Vitória and K. Bakke, *Gen. Relativ. Gravit.* **48**, 161 (2016).
56. R. L. L. Vitória and H. Belich, *Adv. High Energy Phys.* **2019**, 1248393 (2019).
57. R. L. L. Vitória and H. Belich, *Eur. Phys. J. C* **78**, 999 (2018).
58. M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Hand book of Mathematical Functions*, Dover Publications Inc., New York (1965).
59. G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier Academic Pres, London (2005).
60. S. Bruce and P. Minning, *II Nuovo Cimento A* **106**, 711 (1993).
61. M. Moshinsky and A. Szczepaniak, *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, L817 (1989).
62. F. Ahmed, *Sci. Rep.* **12**, 8794 (2022).

DIMENSIONLESS PHYSICS: CONTINUATION

G. E. Volovik ^{a,b*}

^a *Low Temperature Laboratory, Aalto University,
FI-00076 Aalto, Finland*

^b *Landau Institute for Theoretical Physics,
142432, Chernogolovka, Moscow region, Russia*

Received August 21, 2022,
revised version August 21, 2022
Accepted for publication September 09, 2022

DOI: 10.31857/S0044451022110086
EDN: KZDZIL

Several approaches to quantum gravity (including the model of superplastic vacuum; Diakonov tetrads emerging as the bilinear combinations of the fermion fields [1–4]; *BF*-theories of gravity; and effective acoustic metric [5, 6]) suggest that in general relativity the metric must have dimension 2, i.e. $[g_{\mu\nu}] = 1/[L]^2$, irrespective of the dimension of spacetime. This leads to the "dimensionless physics" discussed in the review paper [7]. We continue to exploit this issue.

Elasticity tetrads. The 3 + 1-dimensional vacuum crystal is the plastic (malleable) medium [8], described in terms of the elasticity tetrads [9–12]:

$$E_{\mu}^a = \frac{\partial X^a}{\partial x^{\mu}}, \tag{1}$$

where equations $X^a(x) = 2\pi n_a$ are equations of the (deformed) crystal planes. The functions X^a play the role of the geometric $U(1)$ phases and are dimensionless. The elasticity tetrads play the role of the gauge fields (translation gauge fields) and have the same dimension 1 as the dimension of gauge fields:

$$[E_{\mu}^a] = \frac{1}{[L]}. \tag{2}$$

The dimension n of quantity A means $[A] = [L]^{-n}$, where $[L]$ is dimension of length. The matrix E_{μ}^a is not necessarily quadratic. The extension of tetrads to the rectangular vielbein is considered in Ref. [13].

Elasticity tetrads in Eq.(1) give rise to the metric, which is the bilinear combination of tetrads:

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} E_{\mu}^a E_{\nu}^b. \tag{3}$$

The metric $g_{\mu\nu}$ has dimension $n = 2$, while the contravariant metric $g^{\mu\nu}$ has dimension $n = -2$:

$$[g_{\mu\nu}] = \frac{1}{[L]^2}, [g^{\mu\nu}] = [L]^2. \tag{4}$$

The tetrad determinant has dimension $n = 4$ in the 4-dimensional spacetime and dimension $n = N$ in the N -dimensional spacetime, where the dimensions of the metric elements are the same as in Eq.(4):

$$[e] = [\sqrt{-g}] = \frac{1}{[L]^N}. \tag{5}$$

Eq.(5) makes the spacetime integration dimensionless:

$$\left[\int d^N x \sqrt{-g} \right] = [1] = 0, \tag{6}$$

which leads to the dimensionless Lagrangian \mathcal{L} :

$$[S] = \left[\int d^N x \sqrt{-g} \mathcal{L} \right] = \left[\int d^N x \sqrt{-g} \right] \cdot [\mathcal{L}] = [1] \cdot [1] = [1]. \tag{7}$$

Classical dynamics of particle is described by action:

$$S = M \int ds, \tag{8}$$

where with Eq.(3) the interval is dimensionless:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}, [s^2] = \frac{1}{[L]^2} \cdot [L]^2 = [1] = 0. \tag{9}$$

The variation of action gives the Hamilton–Jacobi equation in terms of the contravariant metric:

$$g^{\mu\nu} \partial_{\mu} S \partial_{\nu} S + M^2 = 0. \tag{10}$$

Since the action and the interval are dimensionless, the mass M in Eq.(8) is also dimensionless, $[M] = [1] = 0$, for any dimension N of spacetime.

* E-mail: grigori.volovik@aalto.fi

In the spacetime crystal, the interval between the events is counted in terms of the lattice points, and this is the geometric reason why the interval is dimensionless. One may say that dynamics comes from geometry. In the Diakonov theory, the interval determines the dynamics of the particle, rather than the geometric distance, i.e. the geometry follows from dynamics.

Scalar fields. The quadratic terms in the action for the scalar field Φ in the N -dimensional spacetime are:

$$S = \int d^N x \sqrt{-g} (g^{\mu\nu} \nabla_\mu \Phi^* \nabla_\nu \Phi + M^2 |\Phi|^2). \quad (11)$$

From Eqs. (4) and (6) it follows that the scalar field is dimensionless, $[\Phi] = [1] = 0$, for arbitrary spacetime dimension N . This universal zero dimension differs from the N -dependent dimension $n = (N - 2)/2$ of scalar fields in the conventional approach.

Wave function. Expanding the Klein-Gordon equation over $1/M$ one obtains the non-relativistic Schrödinger action for the wave function ψ :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{M}} \exp(iMt/\sqrt{-g^{00}}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (12)$$

$$S_{\text{Schr}} = \int d^3 x dt \sqrt{-g} \mathcal{L}, \quad (13)$$

$$2\mathcal{L} = i\sqrt{-g^{00}} (\psi \partial_t \psi^* - \psi^* \partial_t \psi) + \frac{g^{ik}}{M} \nabla_i \psi^* \nabla_k \psi. \quad (14)$$

The normalization condition for the wave function is:

$$\int d^3 r \sqrt{\gamma} |\psi|^2 = 1, \quad (15)$$

where $\sqrt{\gamma} = \sqrt{-g} \sqrt{-g^{00}}$ is the determinant of the space part of the metric. This corresponds to the particle number conservation in the nonrelativistic quantum mechanics, see e.g. Eq.(13) in Ref. [14].

Since the dimension of this determinant is $[\sqrt{\gamma}] = \frac{1}{[L]^3}$, the wave function is dimensionless. This is distinct from the conventional Schrödinger equation without gravity, where the dimension of ψ is $[\psi] = [L]^{-(N-1)/2}$ for the N dimensional spacetime. Inclusion of gravity provides the natural zero dimension for the probability amplitude in quantum mechanics, $[\psi] = 0$, for any spacetime dimension.

The same result can be obtained from overlap of the quantum states, which is naturally dimensionless:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (16)$$

Then for the wave function

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle, \quad |\psi\rangle = \int d^{N-1} r \sqrt{\gamma} \psi(\mathbf{r}) | \mathbf{r} \rangle, \quad (17)$$

one obtains Eq.(15) for normalization:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int d^{N-1} r \sqrt{\gamma} |\psi|^2. \quad (18)$$

From Eq.(18) it follows that the wave function is dimensionless, which is the consequence of the presence of the metric field. This demonstrates the connection between quantum mechanics and general relativity.

The action (13) and Lagrangian (14) do not contain \hbar . The role of \hbar in the conventional relation between the energy levels and frequency, $E_m - E_n = \hbar \omega_{mn}$, is now played by $\sqrt{g^{00}}$ in the red shift equation $M_m - M_n = \sqrt{g^{00}} \omega_{mn}$ [15]. The dimensional metric leads to the difference between the dimensional frequency, $[\omega_{mn}] = 1/[L]$, and the dimensionless mass:

$$[M] = [\sqrt{g^{00}}][\omega] = [L] \cdot \frac{1}{[L]} = [1] = 0. \quad (19)$$

Weyl and Dirac fermions. The dimensional tetrads $[E_\mu^a] = 1/[L]$ are obtained directly from the zero dimension of wave functions, which gives rise to the dimensionless Weyl and Dirac fields, $[\Psi] = 0$, in the action:

$$S = \int d^4 x e e_a^\mu \bar{\Psi} \gamma^a \nabla_\mu \Psi, \quad (20)$$

where e is the tetrad determinant. Since the action is dimensionless, then assuming that the quantum field operators Ψ are dimensionless, one obtains $[e e_a^\mu] = 1/[L]^3$, which gives the dimensional tetrads:

$$[e_a^\mu] = [L], \quad [E_\mu^a] = \frac{1}{[L]}, \quad [e] = \frac{1}{[L]^4}. \quad (21)$$

This is in agreement with the Diakonov theory [1–4], where tetrads emerge as the bilinear combinations:

$$E_\mu^a \propto \langle \bar{\Psi} \gamma^a \nabla_\mu \Psi \rangle, \quad [E_\mu^a] = \frac{1}{[L]}, \quad (22)$$

and metric $g_{\mu\nu}$ is the quadrilinear combination of the fermionic fields, $\langle \bar{\Psi} \Psi \bar{\Psi} \Psi \rangle$. This approach also allows the rectangular vielbein [13], where spin a and coordinate μ spaces have different dimensions.

The Hamiltonian for massless Dirac fermions has dimension 1, i.e. the same as the dimension of frequency:

$$H = \int_{x_0=\text{const}} d^3 r e e_a^i \bar{\Psi} \gamma^a \nabla_i \Psi, \quad [H] = [\omega] = \frac{1}{[L]}. \quad (23)$$

The dimension of the Hamiltonian does not coincide with the dimension of mass M , which is dimensionless.

Gauge fields. The action for the $U(1)$ gauge field in the N -dimensional spacetime is:

$$S \sim \int d^N x \sqrt{-g} g^{\mu\nu} g^{\alpha\beta} F_{\mu\alpha} F_{\nu\beta}. \quad (24)$$

In case of the conventional dimensionless tetrads, the action in Eq.(24) is dimensionless only for $N = 4$.

With dimensionful tetrads the action (24) is dimensionless for arbitrary N , since

$$[g^{\mu\nu}] = [L]^2, [F_{\mu\nu}] = \frac{1}{[L]^2}, [\sqrt{-g}] = \frac{1}{[L]^N}. \quad (25)$$

Acoustic metric also has dimension 2. The effective acoustic metric [5, 6] describes propagation of sound in a non-homogeneous flowing fluid and also phonons in moving superfluids and other Goldstone modes, such as magnons and collective modes of magnon Bose condensate [16]. The action for Goldstone mode (the phase ϕ of the Bose condensate) is similar to the action (11):

$$S = \int d^4x \sqrt{-\tilde{g}} \tilde{g}^{\mu\nu} \nabla_\mu \phi \nabla_\nu \phi. \quad (26)$$

From the action (26) it follows that the effective contravariant metric $\tilde{g}^{\mu\nu}$ has the conventional dimension -2 , i.e. $[\tilde{g}^{\mu\nu}] = [l]^2$. This is also seen from the effective interval in terms of hydrodynamic variables [6, 17]:

$$d\tilde{s}^2 = \tilde{g}_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = \frac{n}{ms} [-s^2 dt^2 + (dx^i - v^i dt)(dx^i - v^i dt)]. \quad (27)$$

Here n is the density of atoms in the liquid; m is the mass of the atom; s is the speed of sound; and v^i is the velocity of the liquid, which coincides with the shift vector N^i in the Arnowitt-Deser-Misner formalism. Using the conventional dimensions of hydrodynamic variables one obtains the dimension 2 for the covariant metric:

$$[\tilde{g}_{\mu\nu}] = [n] \cdot \frac{1}{[m]} = \frac{1}{[l]^3} \cdot [l] = \frac{1}{[l]^2}, \quad (28)$$

and the dimensionless interval. The dimension of avoustic metric follows from the dynamics of the superfluid: geometry comes from dynamics.

General relativity. Let us consider the GR action on example of q -theory – the class of theories which avoid the cosmological constant problem. The huge contributions of zero point energy to the cosmological constant is cancelled in the equilibrium state of the vacuum due to thermodynamics [18–20]. For the particular q -theory on “brane” the action is [21, 22]:

$$S = - \int d^4x \sqrt{-g} \left[\epsilon(q) + \frac{R}{16\pi G_N(q)} + \Lambda_0 + \mathcal{L}^M[\psi, q] \right] + \mu \int d^4x n, \quad q = \frac{n}{\sqrt{-g}}. \quad (29)$$

Here n is the 4D analog of the particle density in the quantum vacuum (density of the "spacetime atoms"), which has the same dimension 4 as tetrad determinant

$$[n] = [\sqrt{-g}] = \frac{1}{[L]^4}, \quad (30)$$

q is the vacuum variable, and μ plays the role of the chemical potential in the vacuum thermodynamics. In the expanding Friedmann-Robertson-Walker universe:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -d\tau^2 + a^2(\tau) d\mathbf{r}^2, \quad H(\tau) = \frac{da/d\tau}{a(\tau)}, \quad (31)$$

where τ is the conformal time; $a(\tau)$ is the scale factor; and $H(\tau)$ is time-dependent Hubble parameter. The scale factor $a(\tau)$ has dimensions 1, $[a(\tau)] = \frac{1}{[L]}$, while the following quantities are dimensionless:

$$[q] = [\mu] = [\epsilon] = [R] = [G_N] = [\Lambda_0] = [H] = [\tau] = [\psi] = [M] = [1] = 0. \quad (32)$$

Some of the dimensionless quantities can be fundamental, or correspond to some integer valued topological invariants. For example, the "chemical potential" μ may correspond to the topological invariant, $\mu = \pm 1$, which changes sign at the Big-Bang quantum phase transition [20]. Since masses of particles are dimensionless, and there is no fundamental mass scale, one can choose any convenient mass as a unit mass.

Note also that the dimensionless interval in Eq.(9) does not mean the existence of the fundamental length, such as Planck length. First, because the gravitational coupling $1/G_N$ is not necessarily fundamental. Second, in the model of the superplastic vacuum there is no equilibrium value of the distance between the neighbouring lattice points. As distinct from the solid state crystals, arbitrary deformations of the vacuum crystal are possible. In Diakonov model [1] the metric is emergent, and on the fundamental level the distance between the spacetime points is not determined.

Unruh and Hawking. In terms of the dimensionful metric, the acceleration is dimensionless [7]:

$$a^2 = g_{\mu\nu} \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} \frac{d^2 x^\nu}{ds^2}, \quad (33)$$

$$[a^2] = [g_{\mu\nu}][x^\mu][x^\nu] = \frac{1}{[l]^2} \cdot [l]^2 = [1] = 0. \quad (34)$$

This leads to the dimensionless Unruh temperature:

$$T_U = \frac{a}{2\pi}, \quad [T_U] = [1] = 0. \quad (35)$$

The Gibbons-Hawking temperature of the cosmological horizon is also dimensionless, as follows from Eq.(32):

$$T_H = \frac{H}{2\pi}, \quad [T_H] = [H] = [1] = 0. \quad (36)$$

Eqs. (35) and (36) look fundamental: they do not contain parameters. However, for the temperature of the Hawking radiation from the black hole horizon,

$T_{\text{BH}} = 1/8\pi G_N M$, situation is different. Although the Hawking temperature is dimensionless ($[T_{\text{BH}}] = [1]$, since $[G_N] = [M] = [1]$), it does not look fundamental, since it depends on the dimensionless parameter G_N . The same concerns the Bekenstein-Hawking entropy:

$$S_{\text{BH}} = \frac{A}{4G_N}. \tag{37}$$

It is dimensionless due to dimensionless horizon area:

$$dA = \sqrt{dS^{ik}dS_{ik}}, [A] = [1] = 0, \tag{38}$$

$$A = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{g_{\phi\phi}g_{\theta\theta}}, [g_{\phi\phi}] = [g_{\theta\theta}] = [A] = 0. \tag{39}$$

The Bekenstein-Hawking entropy (37) determines the black hole thermodynamics, but similar to the Hawking temperature it does not look as fundamental, since it contains the gravitational coupling $1/G_N$. Also it is not clear why the microscopic degrees of freedom responsible for the black hole entropy should be characterized by the Planck length [23]. In the superplastic vacuum [8] the Planck length scale is absent, since there is no equilibrium value of the distance between the lattice points: this vacuum can be arbitrarily deformed.

On the other hand, since the area is dimensionless, one may suggest that the entropy of the black hole horizon can be expressed in terms of the area only:

$$S_{\text{BH}} = \eta A, [\eta] = [S_{\text{BH}}] = [A] = [1] = 0. \tag{40}$$

Here η is some fundamental dimensionless parameter, like the topological invariant. In this case one may take the point of view that Einstein's gravity equations can be derived solely from thermodynamics [24]. The constant of proportionality η between the entropy and the area determines gravitational coupling $1/G_N = 4\eta$. In this thermodynamic approach, $1/G_N$ becomes fundamental due to the fundamentality of the parameter η .

However, in the thermodynamic approach to gravity there is the "species problem" [25]: the gravitational coupling G_N may depend on the number of fermionic and bosonic quantum fields [26–28]. This destroys many conjectures, which are based on positivity of the gravitational coupling [29], and prevents $1/G_N$ to be the fundamental parameter. But this "no-go theorem" can be avoided, if $1/G_N$ is the quantum number related to symmetry and/or topology. Then the parameter $1/G_N$ does not depend on interaction between gravity and quantum field, though it may experience jumps during the topological quantum phase transitions. This takes place in topological materials when one varies the parameters of interaction [30, 31] and may take place when the Big Bang is crossed [20].

Einstein-Cartan, Barbero-Immirzi, Nieh-Yan and topology. Topological invariants relevant for the quantum vacuum are known in the crystalline matter [10, 11, 32] and can be extended to the superplastic vacuum. The topology in the crystalline quantum vacua is enriched due to the dimensional elasticity tetrads in Eq.(1), which come from the geometric $U(1)$ phases. This topological approach may take place in the Einstein-Cartan-Sciama-Kibble theory, which is expressed in terms of tetrads, and thus is more fundamental than the conventional Einstein gravity based on metric. Such type of gravity emerging in superplastic crystals has been discussed in Ref. [33]. The action in the Einstein-Cartan gravity can be expressed in terms of the differential forms, which contain the elasticity tetrads as the translational gauge fields:

$$S_{\text{EC}} \sim \epsilon_{abcd} \int d^4x E^a \wedge E^b \wedge R^{cd}. \tag{41}$$

This action is dimensionless because the one-form tetrad has dimension 1, $[E_\mu^a] = \frac{1}{[L]}$, while the curvature two-form R^{ab} has dimension 2:

$$[R_{\mu\nu}^{ab}] = \frac{1}{[L]^2}. \tag{42}$$

With the dimensional elasticity tetrads the topology of the 3 + 1 crystalline phases [10, 11, 32] may provide the fundamental topological prefactor in Eq.(41), with $1/G_N$ as integer or fractional topological number.

The same can be valid for the dimensionless parameter in the Barbero-Immirzi action:

$$S_{\text{BI}} \sim \int d^4x E^a \wedge E^b \wedge R_{ab}. \tag{43}$$

Eq.(43) looks similar to the Nieh-Yan term in the action, see e.g. Ref. [34]. Due to dimensional tetrads the prefactors in the Nieh-Yan and in the Barbero-Immirzi actions are dimensionless, and thus can be fundamental [7]. It is not excluded that these parameters are the topological invariants similar to that in topological insulators, semimetals and superconductors [10].

The dimensional metric and tetrads appear also in such topological field theories as the BF -theory¹. For example, the composite metric (Schönberg-Urbantke metric [35–40]) is formed by triplet of the 2-form fields:

$$\sqrt{-g}g_{\mu\nu} = \frac{1}{12} \epsilon_{abc} e^{\alpha\beta\gamma\delta} B_{\mu\alpha}^a B_{\beta\gamma}^b B_{\delta\nu}^c. \tag{44}$$

The 2-forms in the BF action $\int B \wedge F$ have dimension 2, $[B] = [F] = 1/[L]^2$. Then the composite metric in Eq.(44) has also dimension 2, $[g_{\mu\nu}] = 1/[L]^2$. In the same way the two-form field B can be represented as

the bilinear combination of the tetrads [37]: $B = E \wedge E$. These one-form tetrads have dimension 1, $[E_\mu^a] = 1/[L]$.

Arnowitt-Deser-Misner (ADM) formalism [41] is used for the Hamiltonian formulation of general relativity. Let us consider this formalism and its application using the dimensional metric. One has the following metric elements and their dimensions:

$$g_{ik} = \gamma_{ik}, [\gamma_{ik}] = \frac{1}{[L]^2}, \quad (45)$$

$$g_{0i} = N_i = \gamma_{ik} N^k, [N_i] = \frac{1}{[L]^2}, [N^i] = 0, \quad (46)$$

$$g_{00} = \gamma_{ik} N^i N^k - N^2 = N^i N_i - N^2, [N] = \frac{1}{[L]}, \quad (47)$$

$$g^{00} = -\frac{1}{N^2}, [g^{00}] = [L]^2, \quad (48)$$

$$g^{0i} = \frac{N^i}{N^2}, [g^{0i}] = [L]^2, \quad (49)$$

$$g^{ik} = \gamma^{ik} - \frac{N^i N^j}{N^2}, [\gamma^{ik}] = [L]^2, \quad (50)$$

$$\sqrt{-g} = N\sqrt{\gamma}, [\sqrt{\gamma}] = \frac{1}{[L]^3}, \quad (51)$$

$$\gamma^{ik}\gamma_{kl} = \delta_l^i. \quad (52)$$

Here N and N^i are lapse and shift functions correspondingly, and γ_{ik} are space components of metric.

The ADM formalism allows to consider dynamics in curved space in terms of the Poisson brackets. Let us consider this on example of Poisson brackets for the classical 3 + 1 electrodynamics in curved space:

$$\{A_i(\mathbf{r}), D^k(\mathbf{r}')\} = \delta_i^k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (53)$$

which in terms of the gauge invariant fields is:

$$\{B^i(\mathbf{r}), D^k(\mathbf{r}')\} = e^{ikl} \nabla_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (54)$$

Here \mathbf{B} is magnetic field, and the vector \mathbf{D} is the electric induction of the quantum vacuum (electric displacement field). The electric induction \mathbf{D} is expressed in terms of the electric field $E_i = F_{0i}$:

$$D^k = \frac{1}{\alpha} \frac{\sqrt{\gamma}}{N} \gamma^{ik} E_i. \quad (55)$$

Here α is the dimensionless fine structure constant, which determines the dielectric constant – the electric permittivity of the relativistic quantum vacuum, ϵ_{vac} , and the magnetic permeability of the vacuum, μ_{vac} :

$$\epsilon_{\text{vac}} = \frac{1}{\mu_{\text{vac}}} = \frac{1}{\alpha}. \quad (56)$$

In spite of the dimensional metric, electric induction \mathbf{D} has the same dimension 2 as electric field \mathbf{E} :

$$[D^i] = [E_i] = \frac{1}{[L]^2}. \quad (57)$$

This follows from Eqs.(45), (48) and (51) for dimensions of the ADM metric elements in 3 + 1 spacetime.

The corresponding quadratic Hamiltonian for the electromagnetic field is:

$$H = \int \frac{d^3r}{2} \frac{N}{\sqrt{\gamma}} \gamma_{ik} \left(\alpha D^i D^k + \frac{1}{\alpha} B^i B^k \right). \quad (58)$$

The Hamiltonian has dimension 1, i.e. $[H] = 1/[L]$. Both the Hamiltonian in Eq.(58) and the Poisson bracket in Eq. (54) do not contain the gauge potentials. The gauge potentials also do not enter the Poisson brackets for charged particle, $\{p_i, p_j\} = qF_{ij}$ and $\{p_i(\mathbf{r}), D^k(\mathbf{r}')\} = -q\delta_i^k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, where q is the dimensionless electric charge of the particle in terms of the electric charge of the electron.

The quantization of electromagnetic field is obtained by the substitution of the Poisson brackets (54) by commutation relations between \mathbf{D} and \mathbf{B} . The Poisson brackets in Eqs. (53) and (54) look as fundamental. They do not depend on the metric and do not contain physical parameters of the quantum vacuum. However, the function \mathbf{D} in Eq.(55) breaks this fundamentality. It is the phenomenological variable, which describes the response of the vacuum to electric field. This response contains the electromagnetic coupling $1/\alpha$, which is not fundamental because of the corresponding "species problem": it depends on the fluctuating bosonic and fermionic fields in the quantum vacuum, and is space-dependent. While the gravitational coupling $1/G_N$ can be fundamental due to topology, there are no topological invariants which could support the fundamentality of the electromagnetic coupling $1/\alpha$. This is in favour of the scenario in which the quantum electrodynamics is the effective low-energy theory, where for example the gauge fields emerge as the bilinear combinations of the fermionic fields, or/and the gauge fields emerge in the vicinity of the topologically stable Weyl points in the fermionic spectrum [17,42–44]. This, however, does not exclude the other possible pre-quantum and pre-spacetime theories, see Ref. [45] and references therein.

Conclusion. Several approaches to quantum gravity (including the model of superplastic vacuum; Diakonov tetrads emerging as the bilinear combinations of the fermionis fields; BF -theories of gravity; and effective acoustic metric) suggest that in general relativity the metric has dimension 2, i.e. $[g_{\mu\nu}] = 1/[L]^2$, irrespective of the dimension of spacetime. One consequence of such dimension of the metric is that the wave function in quantum mechanics is dimensionless, $[\psi(x)] = [1] = 0$. This also leads to the dimensionless quantum fields.

On the other hand, if one starts with the conjecture that in quantum mechanics the wave function is natu-

rally dimensionless, one obtains dimension 2 for metric. This suggests the close connection between quantum mechanics and general relativity.

Acknowledgements. This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement No. 694248).

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

REFERENCES

1. D. Diakonov, arXiv:1109.0091.
2. A.A. Vladimirov and D. Diakonov, Phys. Rev. D **86**, 104019 (2012).
3. A.A. Vladimirov and D. Diakonov, Physics of Particles and Nuclei **45**, 800 (2014).
4. Y.N. Obukhov and F.W. Hehl, Phys. Lett. B **713**, 321 (2012).
5. W.G. Unruh, Phys. Rev. Lett. **46**, 1351 (1981).
6. M. Visser, Class. Quantum Grav. **15**, 1767 (1998).
7. G.E. Volovik, JETP **132**, 727 (2021).
8. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, JETP Lett. **109**, 364 (2019).
9. I.E. Dzyaloshinskii and G.E. Volovick, Ann. Phys. **125**, 67 (1980).
10. J. Nissinen and G.E. Volovik, Phys. Rev. Research **1**, 023007 (2019).
11. J. Nissinen, arXiv:2009.14184.
12. L. Gioia, Chong Wang, and A.A. Burkov, Phys. Rev. Research **3**, 043067 (2021).
13. G.E. Volovik, arXiv:2205.15222.
14. V. Kabel, A.-C. de la Hamette, E. Castro-Ruiz and C. Brukner, arXiv:2207.00021.
15. G.E. Volovik, JETP Lett. **90**, 697 (2009).
16. J. Nissinen and G.E. Volovik, JETP Lett. **106**, 234 (2017).
17. G.E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
18. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, Phys. Rev. D **77**, 085015 (2008).
19. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, Phys. Rev. D **78**, 063528 (2008).
20. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, Phys. Rev. D **105**, 084066 (2022).
21. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, JETP Lett. **103**, 627 (2016).
22. F.R. Klinkhamer, arXiv:2207.03453.
23. E.P. Verlinde and M.R. Visser, arXiv:2206.03161
24. T. Jacobson, Phys. Rev. Lett. **75**, 1260 (1995).
25. T. Jacobson, arXiv:gr-qc/9404039.
26. A.D. Sakharov, Sov. Phys. Dokl. **12**, 1040 (1968).
27. V.P. Frolov, D.V. Fursaev and A.I. Zelnikov, Nuclear Physics B **486**, 339 (1997).
28. M. Visser, Mod. Phys. Lett. A **17**, 977 (2002).
29. G.E. Volovik, Mod. Phys. Lett. A **37**, 2250034 (2022).
30. G.E. Volovik, Springer Lecture Notes in Physics **718**, 31 (2007).
31. G.E. Volovik, Physics-Uspekh **61**, 89 (2018).
32. J. Nissinen, T.T. Heikkilä and G.E. Volovik, Phys. Rev. B **103**, 245115 (2021).
33. M.A. Zubkov, arXiv:1909.08412.
34. G. Calcagni and S. Mercuri, Phys. Rev. D **79**, 084004 (2009).
35. M. Schönberg, Rivista Brasileira de Fisica **1**, 91 (1971).
36. H. Urbantke, J. Math. Phys. **25**, 2321 (1984).
37. R. Capovilla, J. Dell, T. Jacobson and L. Mason, Class. Quantum Grav. **8**, 41 (1991).
38. Yu.N. Obukhov, S.I. Tertychniy, Class. Quantum Grav. **13**, 1623 (1996).
39. F.W. Hehl and Yu.N. Obukhov, *Foundations of classical electrodynamics*, Birkhauser, Boston, 2003.
40. L. Friedel and S. Speziale, SIGMA **8**, 032 (2012).
41. R. Arnowitt, S. Deser and C.W. Misner, Gen. Rel. Grav. **40**, 1997–2027 (2008).
42. G.E. Volovik, JETP Lett. **43**, 551 (1986).
43. G.E. Volovik, JETP Lett. **43**, 693 (1986).
44. P. Horava, Phys. Rev. Lett. **95**, 016405 (2005).
45. T.P. Singh, Eur. Phys. J. Plus **137**, 664 (2022).

ФОРМИРОВАНИЕ ДЕНДРИТОВ Pt/Cu НА СТУПЕНЯХ ПОВЕРХНОСТИ Cu(111)

С. А. Докукин^{a,b}, С. В. Колесников^{a*}, А. М. Салецкий^a

^a Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет
119234, Москва, Россия

^b Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук
119017, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 мая 2022 г.,
после переработки 20 июня 2022 г.
Принята к публикации 29 июня 2022 г.

Формирование кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111) исследовано теоретически с помощью самообучающегося кинетического метода Монте-Карло. Показано, что, варьируя условия роста кластеров Pt/Cu, можно добиться формирования различных наноструктур: вытянутых и разветвленных дендритов, а также пальцеобразных выступов различной формы. Установлено, что форма кластеров определяется в основном тремя параметрами: температурой системы, относительной концентрацией платины и типом ступени, на которой происходит рост кластера. Для роста дендритов необходимо выполнение двух условий: температура системы должна быть около 200 К или ниже, и в системе должны присутствовать атомы Pt. При этом, в зависимости от типа ступени растут либо дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, либо сильно разветвленные дендриты. При комнатной температуре на ступенях растут пальцеобразные выступы, причем их длина также зависит от типа ступени. Различие формы кластеров на различных ступенях является следствием анизотропии диффузии атомов вблизи углов кластеров и может быть объяснено исходя из анализа энергетических барьеров для прыжков атомов по поверхности Cu(111).

DOI: 10.31857/S0044451022110098
EDN: KZGCMN

1. ВВЕДЕНИЕ

Рост кластеров в виде плоских дендритов часто наблюдается в металлических гомо- и гетероэпитаксиальных системах. Например, в системе Au/Ir(111) [1] плоские дендриты формируются при комнатной температуре, в системе Co/Cu(111) [2] — при температуре 135 К, в системах Ag/Pt(111) и Ag/Ag(111) [3] — при температурах около 100 К. Интерес к плоским дендритам связан не только с их красотой, но и с их необычными физическими и химическими свойствами, такими как высокая каталитическая активность [4, 5], а также с перспективами создания электрохимических устройств хранения энергии [6]. Важно отметить, что рост плоских дендритов является результатом атомной самоорга-

низации, и его можно контролировать с помощью изменения внешних условий, таких как температура и скорость напыления атомов.

Форма плоских дендритов связана с симметрией поверхности подложки. На поверхностях (111) ГЦК-кристаллов или на поверхностях (0001) ГПУ-кристаллов возможны два типа ступеней (А и В). Если энергии атомов на ступенях А и В различаются, это приводит к появлению анизотропии диффузионных барьеров для обхода углов растущего кластера. В результате наблюдается формирование плоских дендритов, обладающих осью симметрии третьего порядка. Рост таких дендритов был экспериментально обнаружен в эпитаксиальных системах Au/Pt(111) [7], Co/Cu(111) [2], Co/Pd(111) [8], Pt/Ru(0001) [9], Pd/Cu(111) [10].

Если анизотропией диффузионных барьеров для обхода углов кластера можно пренебречь по сравнению с энергией теплового движения, то плоские дендриты будут обладать осью симметрии ше-

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

стого порядка. Формирование таких дендритов было обнаружено при температуре, близкой к комнатной, в ряде эпитаксиальных систем, таких как Au/Ru(0001) [11], Ag/Pt(111) [12] и Fe/Ag(111) [13].

Если энергия теплового движения сравнима с анизотропией диффузионных барьеров для обхода углов кластера, то плоские дендриты принимают некоторую промежуточную форму, не обладающую какой бы то ни было ярко выраженной симметрией. Такие несимметричные плоские дендриты формируются, например, в эпитаксиальной системе Ag/Ni(111) при температуре ниже 800 К [14] и в системе Ag/Re(0001) при комнатной температуре [15].

Теоретические методы исследования формирования плоских дендритов можно разделить на три группы: 1) методы, основанные на приближении сплошной среды [16, 17]; 2) различные вариации модели диффузионно-лимитированного роста [18–20]; 3) кинетический метод Монте-Карло (КММК) [1, 21]. Фрактальная размерность плоских дендритов существенно зависит от величины эффективного барьера диффузии атомов вдоль границ дендрита. Результаты КММК-моделирования [1, 21] показывают, что чем меньше величина этого барьера, тем ближе форма дендрита к компактному кластеру.

Наличие на поверхности атомных ступеней может привести к существенному изменению морфологии растущих структур. Например, при напылении Pt на ровную поверхность Cu(111) при комнатной температуре наблюдается рост дендритов [22], а на ступенчатой поверхности при тех же условиях формируются пальцеобразные выступы [23]. Механизмы роста и структура пальцеобразных выступов были объяснены с помощью моделирования методом КММК [24]. При этом предполагалось, что на поверхность меди напыляются только атомы Pt. Аналогичный подход был использован и для объяснения роста дендритов на ровной поверхности Cu(111) [21]. Было показано, что возможно получение разнообразных наноструктур при одновременном напылении атомов Pt и Cu. Однако вопрос о том, формирование каких структур возможно при одновременном напылении атомов Pt и Cu на ступенчатую поверхность Cu(111), остается до сих пор не изученным. Исследованию этого вопроса и посвящена данная работа.

2. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для моделирования роста дендритов на ступенях поверхности Cu(111) используется та же методика, что и для исследования роста дендритов на ровной поверхности [21] и пальцеобразных выступов на ступенчатой поверхности Cu(111) [24].

Потенциальная энергия взаимодействия атомов Cu и Pt вычисляется в приближении сильной связи [25, 26]:

$$E = \sum_i (E_R^i + E_B^i), \quad (1)$$

$$E_B^i = - \sqrt{\sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[-2q_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right]} f_c(r_{ij}), \quad (2)$$

$$E_R^i = \sum_j \left[A_{\alpha\beta}^1 \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) + A_{\alpha\beta}^0 \right] \times \exp \left[-p_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] f_c(r_{ij}), \quad (3)$$

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j , α и β — типы атомов, $r_0^{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}^0$, $A_{\alpha\beta}^1$, $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$ — параметры межатомного взаимодействия, зависящие от свойств металлов, входящих в систему, $f_c(r_{ij})$ — функция обрезания потенциалов. Вид функции обрезания и параметры межатомного взаимодействия взяты из работы [27]. Потенциалы (1)–(3) хорошо зарекомендовали себя при исследовании формирования различных нанообъектов: кластеров [21], пальцеобразных выступов [24], поверхностных сплавов [27], связанных наноструктур в первом слое поверхности [28, 29], наноконтактов [30, 31].

Для реалистичного моделирования роста дендритов использован самообучающийся кинетический метод Монте-Карло (СОКММК) [32]. По сравнению с обычными КММК-моделями СОКММК-метод обладает следующими преимуществами: 1) энергетические барьеры ΔE_i различных событий вычисляются по требованию¹⁾; 2) величины ΔE_i сохраняются в базе данных; 3) они могут быть использованы повторно в аналогичных физических ситуациях. Для вычисления барьеров ΔE_i мы используем метод упругой ленты (nudged elastic band, NEB) [33]. Для ускорения вычислений применяется метод средней частоты [34] и эффективный алгоритм поиска потенциальных ям [35]. Аналогичный

¹⁾ В англоязычной литературе используется термин “on the fly.”

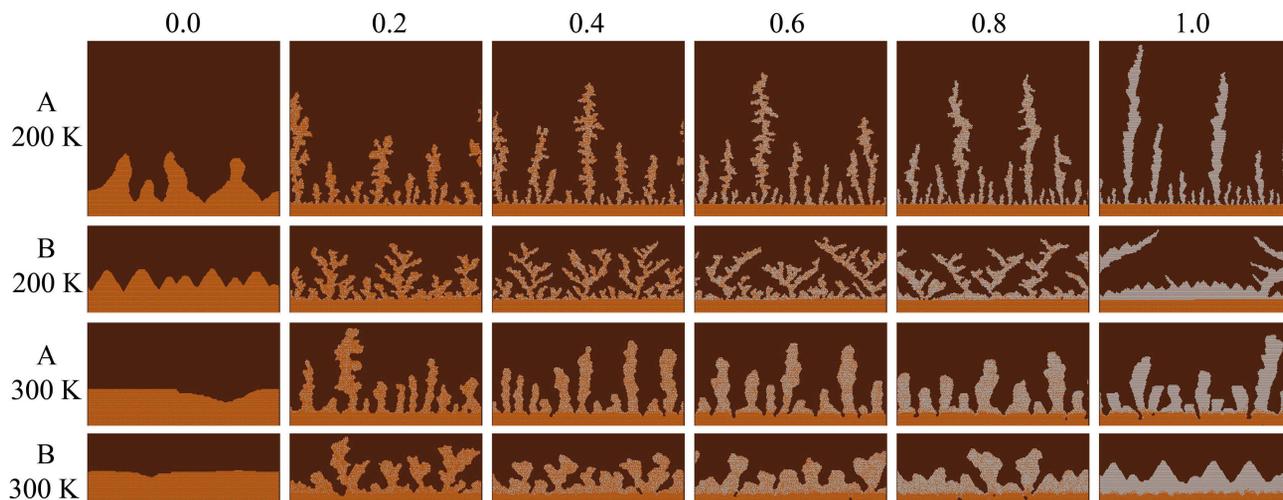


Рис. 1. Изображения части вычислительной ячейки (вид сверху) после напыления 10000 атомов. Оранжевыми и серыми точками показаны атомы Cu и Pt, соответственно. Относительная концентрация платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ показана на рисунке сверху, а слева указаны температура системы и тип ступени (A или B)

подход использовался ранее для исследования самоорганизации связанных наноструктур из атомов Co и Fe в первом слое поверхности Cu(001) [28, 29].

Как и в работах [21, 24], мы рассматриваем однослойную модель. Сравнение с экспериментом [22, 23] показывает, что данное приближение оправдано при небольшом количестве напыляемых атомов. При этом рассматриваются только прыжки одиночных атомов в соседние узлы кристаллической решетки, поскольку учет более сложных событий в системе Pt/Cu(111) не приводит к появлению качественно новых результатов [36].

Частоты прыжков атомов вычисляются по формуле

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right), \quad (4)$$

где T — температура системы, k — постоянная Больцмана, частотный предэкспоненциальный множитель ν_0 выбран равным 1 ТГц [37, 38]. Напыление атомов моделируется путем добавления новых атомов в свободные узлы кристаллической решетки. Частота появления новых атомов равна $\nu_+ = FN$, где F — скорость напыления атомов, $N = 10^5$ — число узлов кристаллической решетки в вычислительной ячейке (200×500 узлов). Мы рассматриваем формирование дендритов при различных соотношениях между концентрациями платины n_{Pt} и меди n_{Cu} . Поэтому удобно ввести безразмерный параметр: относительную концентрацию атомов пла-

тины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$, изменяющуюся в пределах от 0 до 1. При этом скорость напыления атомов равна $F = F_{Pt} + F_{Cu}$, где $F_{Pt}/F_{Cu} = n_{Pt}/n_{Cu}$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как было показано в работе [21], форма и структура дендритов определяются в основном температурой T системы и отношением концентраций n_{Pt}/n_{Cu} , а зависимость от скорости напыления F оказывается достаточно слабой. Например, длина периметра дендрита оказывается пропорциональной $\ln F$. Поэтому в данной работе мы не будем останавливаться на исследовании зависимости характеристик дендритов от F . Все представленные ниже результаты получены при скорости напыления атомов $F = 0.01$ монослоев/с, что соответствует частоте появления новых атомов в вычислительной ячейке $\nu_+ = 1000 \text{ с}^{-1}$.

На рис. 1 показаны результаты моделирования, полученные через 10 с после начала напыления атомов на ступенчатую поверхность Cu(111). Хорошо видно, что форма формирующихся кластеров зависит от трех параметров: температуры T , относительной концентраций платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ и типа ступени, на которой растут кластеры. В качестве количественной характеристики формы кластеров рассмотрим относительную (суммарную по вычислительной ячейке) длину L/L_0 краев кластеров, где

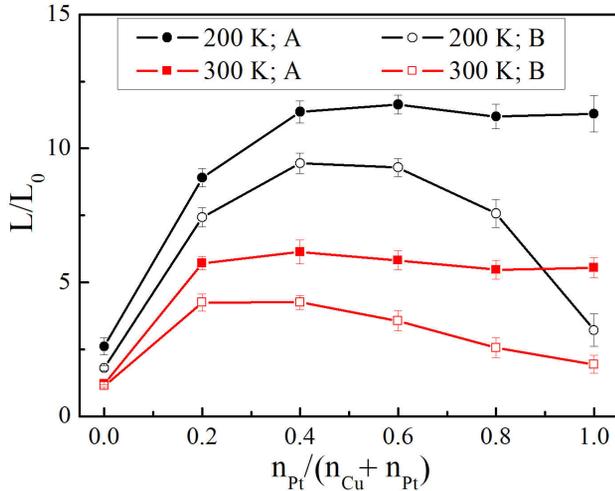


Рис. 2. Зависимость относительной длины L/L_0 краев кластеров от относительной концентрации платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$

$L_0 = 200$ атомов – длина ровной ступени в вычислительной ячейке.

Из рис. 1 видно, что для роста дендритов температуру системы необходимо понизить примерно до 200 К. Однако даже при этих условиях дендриты не формируются при напылении чистой меди. Формирование дендритов происходит только при условии добавления в систему атомов Pt. Обращает на себя внимание существенное различие формы дендритов, растущих на ступенях разного типа. На ступени А растут дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, причем их длина слабо зависит от концентрации Pt при $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt}) > 0.4$ (см. рис. 2). При тех же условиях на ступени В растут сильно разветвленные дендриты. Длина их границы максимальна при $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt}) = 0.4$ и убывает при большей концентрации Pt.

При комнатной температуре дендриты не формируются. Вместо этого на ступенях растут пальцеобразные выступы, которые наследуют форму описанных выше дендритов, т.е. на ступени А выступы оказываются более длинными и тонкими, чем на ступени В. Интересно отметить, что в случае напыления чистой платины выступы на ступени В приобретают ярко выраженную треугольную форму. На рис. 2 видно, что при всех рассмотренных концентрациях платины и температурах относительная длина краев кластеров на ступени А оказывается больше, чем относительная длина краев кластеров на ступени В.

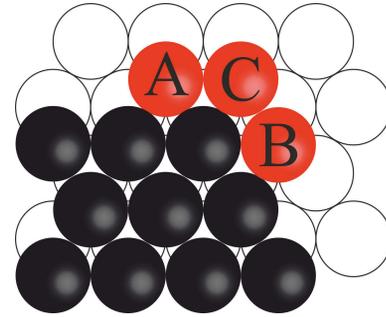


Рис. 3. Схематическое изображение (вид сверху) угла кластера на поверхности (111). Черные шарики изображают атомы сорта 1, красные — атомы сорта 2, белые — атомы меди в нижнем слое. Атом сорта 2 может находиться на ступени А, на ступени В или в угловом положении С

Таблица 1. Энергетические барьеры (в эВ) для обхода атомами сорта 2 угла кластера, состоящего из атомов сорта 1. Положения атома А, В и С показаны на рис. 3.

Сорт 1	Сорт 2	A → C	C → A	B → C	C → B
Cu	Cu	0.29	0.02	0.40	0.13
Pt	Pt	0.34	0.02	0.64	0.26
Cu	Pt	0.48	0.02	0.62	0.14
Pt	Cu	0.38	0.05	0.42	0.07

Форма кластеров определяются диффузией атомов вблизи углов кластера. Обсудим этот вопрос на примере кластеров из чистой меди и чистой платины. Угол кластера схематически изображен на рис. 3. Вблизи угла кластера может находиться атом Cu или Pt. Этот дополнительный атом может находиться либо на ступени А (положение А), либо на ступени В (положение В), либо в угловом положении С. Энергетические барьеры для прыжков атома между этими положениями приведены в таблице 1.

Рассмотрим прыжки атома Cu вблизи угла медного кластера. Потенциальная энергия атома Cu на ступени А и на ступени В одинакова, однако диффузионные барьеры на путях $A \rightarrow C \rightarrow B$ и $B \rightarrow C \rightarrow A$ различны. На пути $A \rightarrow C \rightarrow B$ атом преодолевает сначала барьер $\Delta E_{A \rightarrow C} = 0.29$ эВ, а затем барьер $\Delta E_{C \rightarrow B} = 0.13$ эВ. На обратном пути — сначала барьер $\Delta E_{B \rightarrow C} = 0.40$ эВ, а затем барьер $\Delta E_{C \rightarrow A} = 0.02$ эВ. Таким образом, эффективный барьер для обхода угла в любом направлении одинаков: $\Delta E_{eff} = 0.42$ эВ²⁾. Следовательно, эффективная частота угловой диффузии атомов Cu равна

²⁾ $\Delta E_{eff} = \Delta E_{A \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow B} = \Delta E_{B \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow A}$

$\nu_{eff} = \nu_0 \exp(-\Delta E_{eff}/kT) = 8.8 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ при 300 К и $\nu_{eff} = 26 \text{ с}^{-1}$ при 200 К. Подвижность атомов по периметру кластера определяется отношением эффективной частоты угловой диффузии ν_{eff} и частоты напыления атомов $\nu_+ = 10^3 \text{ с}^{-1}$. Видно, что выполняются неравенства

$$\nu_{eff}(T = 300 \text{ К}) \gg \nu_+ \gg \nu_{eff}(T = 200 \text{ К}). \quad (5)$$

Следовательно, при температуре 300 К атомы Cu свободно движутся вдоль границы кластеров меди, что приводит к формированию ровной ступени. Однако при температуре 200 К атомы Cu не успевают обходить углы кластеров до появления новых атомов, поэтому анизотропия диффузионных барьеров $\Delta E_{C \rightarrow A}$ и $\Delta E_{C \rightarrow B}$ начинает играть ключевую роль. Если атом Cu оказывается в угловом положении (С), то вероятность его перехода на ступень А в $\exp((\Delta E_{C \rightarrow B} - \Delta E_{C \rightarrow A})/kT) \approx 590$ раз больше, чем на ступень В. В результате кластер меди растет в направлениях, перпендикулярных ступени А. Таким образом, на ступени А кластеры растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени В — под углом 60° к ней, образуя треугольные выступы.

Рассмотрим теперь рост кластера из чистой платины. Энергетические барьеры для прыжков атома Pt вблизи угла кластера платины приведены в таблице 1. Для оценки эффективной частоты угловой диффузии можно использовать усредненное значение эффективного барьера $\Delta E_{eff} = 0.63 \text{ эВ}$ ³⁾. Тогда эффективная частота угловой диффузии равна $\nu_{eff} = 26 \text{ с}^{-1}$ при 300 К и $\nu_{eff} = 1.3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ при 200 К, т.е. выполняются неравенства

$$\nu_+ \gg \nu_{eff}(T = 300 \text{ К}) \gg \nu_{eff}(T = 200 \text{ К}), \quad (6)$$

и атомы Pt не успевают обходить углы кластера даже при комнатной температуре. Следовательно, если атом Pt оказывается в угловом положении (С), он при температуре 300 К (200 К) переходит на ступень А в $\exp((\Delta E_{C \rightarrow B} - \Delta E_{C \rightarrow A})/kT) = 1.1 \cdot 10^4$ ($1.1 \cdot 10^6$) раз чаще, чем на ступень В, несмотря на то, что оказаться на ступени В ему выгоднее с энергетической точки зрения. В результате кластеры из чистой платины на ступени А растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени В — под углом 60° к ней, образуя треугольные выступы при 300 К и разветвленные дендриты при 200 К.

Анализ энергетических барьеров в случае смешанных Pt–Cu-кластеров существенно усложняет-

ся в связи с большим числом возможных комбинаций атомов Cu и Pt вблизи угла кластера. Рассмотрим две простейшие ситуации: 1) диффузия атома Pt вблизи угла кластера меди и 2) диффузия атома Cu вблизи угла кластера платины. В первом случае ситуация аналогична рассмотренному выше случаю кластеров из чистой платины. Эффективный барьер для обхода угла кластера равен 0.63 эВ, и выполняются неравенства (6). А во втором случае эффективный барьер для обхода угла кластера равен 0.46 эВ, и выполняются неравенства (5). Т.е. ситуация аналогична случаю кластеров из чистой меди. Таким образом, из анализа энергетических барьеров, приведенных в таблице 1, следует общая тенденция: кластеры на ступени А растут преимущественно перпендикулярно ступени, а на ступени В — под углом 60° к ней.

Наконец, сделаем одно важное замечание. Обычно при исследовании дендритов на ровной поверхности их характеризуют фрактальной размерностью [1, 18–21]. Однако при росте на ступенях дендриты Pt–Cu быстро срастаются между собой, не образуя самоподобных структур. В результате вычисление фрактальной размерности таких дендритов теряет смысл. В отличие от фрактальной размерности относительная длина L/L_0 краев кластеров всегда имеет смысл, поэтому именно она была вычислена в нашей работе (см. рис. 2).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование роста кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111) показало, что их форма определяется в основном тремя параметрами: температурой системы, относительной концентрацией платины $n_{Pt}/(n_{Cu} + n_{Pt})$ и типом ступени, на которой происходит рост кластеров. Для роста дендритов необходимо выполнение двух условий: температура системы должна быть около 200 К или ниже, и в системе должны присутствовать атомы Pt. На ступенях разного типа формируются дендриты существенно различной формы. На ступени А растут дендриты, вытянутые в направлении перпендикулярно ступени, а на ступени В — сильно разветвленные дендриты. Сильное различие формы дендритов объясняется анизотропией диффузии атомов вблизи углов кластеров. Из анализа энергетических барьеров видно, что дендриты на ступени А растут преимущественно перпендикулярно ступени, поэтому они оказываются узкими и длинными. На ступени В дендриты растут под углом 60° к ней,

³⁾ $\Delta E_{eff} = (\Delta E_{A \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow B} + \Delta E_{B \rightarrow C} + \Delta E_{C \rightarrow A})/2$

в результате чего оказываются более разветвленными и могут срастаться между собой. При комнатной температуре на ступенях растут пальцеобразные выступы, причем на ступени А выступы оказываются более длинными и тонкими, чем на ступени В. При всех рассмотренных концентрациях Pt и температурах относительная длина краев кластеров на ступени А оказывается больше, чем относительная длина краев кластеров на ступени В.

В результате мы показали, что, варьируя условия роста кластеров Pt/Cu на ступенчатой поверхности Cu(111), можно добиться формирования различных наноструктур: вытянутых и разветвленных дендритов, а также пальцеобразных выступов различной формы. Поскольку физические и химические свойства кластеров связаны с их формой, мы надеемся, что полученные результаты будут полезны для дальнейшего экспериментального изучения кластеров Pt/Cu и их применения в промышленности.

Благодарности. При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ) [39, 40].

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-20034).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Ogura, K. Fukutani, M. Matsumoto, T. Okano, M. Okada, and T. Kawamura, *Phys. Rev. B* **73**, 125442 (2006).
2. N. N. Negulyaev, V. S. Stepanyuk, P. Bruno, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. B* **77**, 125437 (2008).
3. H. Brune, H. Roder, K. Bromann, K. Kern, J. Jacobsen, P. Stoltze, K. Jacobsen, and J. Norskov, *Surf. Sci.* **349**, L115 (1996).
4. H. Zhang, H. Wang, J. Cao, and Y. Ni, *J. Alloys Compd.* **698**, 654 (2017).
5. Md.H. Rashid, and T. K. Mandal, *J. Phys. Chem. C* **111**, 16750 (2007).
6. R. Ramkumar and M. M. Sundaram, *New J. Chem.* **40**, 7456 (2016).
7. E. Sibert, F. Ozanam, F. Maroun, R. J. Behm, and O. M. Magnussen, *Surf. Sci.* **572**, 115 (2004).
8. M. Wasniowska, W. Wulfhekel, M. Przybylski, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **78**, 035405 (2008).
9. U. Käsberger and P. Jakob, *Surf. Sci.* **540**, 76 (2003).
10. A. Bach Aaen, E. Lægsgaard, A. V. Ruban, and I. Stensgaard, *Surf. Sci.* **408**, 43 (1998).
11. R. Q. Hwang, J. Schröder, C. Günther, and R. J. Behm, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3279 (1991).
12. H. Röder, K. Bromann, H. Brune, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3217 (1995).
13. F. Buchner, *STM Investigation of Molecular Architectures of Porphyrinoids on a Ag(111) Surface: Supramolecular Ordering, Electronic Properties and Reactivity*, Springer, Berlin (2010).
14. A. Meyer, J. I. Flege, R. E. Rettew, S. D. Senanayake, T. Schmidt, F. M. Alamgir, and J. Falta, *Phys. Rev. B* **82**, 085424 (2010).
15. M. Parschau, D. Schlatterbeck, and K. Christmann, *Surf. Sci.* **376**, 133 (1997).
16. J. Lipton, M. E. Glicksman, and W. Kurz, *Mater. Sci. Eng.* **65**, 57 (1984).
17. M. X. Liu, K. Wang, D. Xia, and T. Jiang, *J. Alloys Compd.* **589**, 431 (2014).
18. T. A. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1400 (1981).
19. T. A. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. B* **27**, 5686 (1983).
20. А. Ю. Лоскутов, А. С. Михайлов, *Основы теории сложных систем*, Институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2007).
21. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Surf. Sci.* **689**, 121464 (2019).
22. E. Soy, Z. Liang, and M. Trenary, *J. Phys. Chem. C* **119**, 24796 (2015).
23. F. R. Lucci, T. J. Lawton, A. Pronschinske, and E. C. H. Sykes, *J. Phys. Chem. C* **118**, 3015 (2014).
24. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *J. Alloys Compd.* **763**, 719 (2018).
25. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
26. N. A. Levanov, V. S. Stepanyuk, W. Hergert, D. I. Bazhanov, P. H. Dederichs, A. Katsnelson, and C. Massobrio, *Phys. Rev. B* **61**, 2230 (2000).
27. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *Surf. Sci.* **692**, 121515 (2020).
28. С. В. Колесников, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 329 (2014).

29. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, *ЖЭТФ* **148**, 706 (2015).
30. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *ЖЭТФ* **158**, 858 (2020).
31. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *ЖЭТФ* **160**, 426 (2021).
32. С. В. Колесников, А. М. Салецкий, С. А. Докукин, А. Л. Клавсюк, *Матем. моделирование* **30**, 48 (2018).
33. G. Henkelman and H. Jónsson, *J. Chem. Phys.* **113**, 9978 (2000).
34. B. Puchala, M. L. Falk, and K. Garikipati, *J. Chem. Phys.* **132**, 134104 (2010).
35. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Comput. Mater. Sci.* **155**, 209 (2018).
36. С. А. Докукин, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, *Вестник Моск. ун-та. Серия 3. Физика и Астрономия* вып 4, 46 (2019).
37. U. Kürpick, *Phys. Rev. B* **64**, 075418 (2001).
38. U. Kürpick, *Phys. Rev. B* **66**, 165431 (2002).
39. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, *“Lomonosov”: Supercomputing at Moscow State University*, Chapman Hall/CRC Computational Science, Boca Raton, United States, 283307 (2013).
40. V. Voevodin, A. Antonov, D. Nikitenko, P. Shvets, S. Sobolev, I. Sidorov, K. Stefanov, V. Voevodin, and S. Zhumatiy, *Supercomput. Front. Innov.* **6**, 4 (2019).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОЛИТОНОВ С ГРАНИЦЕЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПЛАСТИНЫ

*В.В. Киселев**, *А.А. Расковалов*

*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения
Российской академии наук, 620041, Екатеринбург, Россия
Физико-технологический институт Уральского федерального университета
620002, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 18 апреля 2022 г.,
после переработки 06 июня 2022 г.
Принята к публикации 06 июня 2022 г.

В рамках фокусирующего нелинейного уравнения Шредингера найдены и проанализированы солитонные состояния полубесконечной ферромагнитной пленки при частичном закреплении спинов на её границе. Показано, что солитоны делятся на два класса. Первый из них представляют локализованные вблизи края пленки колебания намагниченности с дискретными частотами. Второй содержит движущиеся частице-подобные объекты, ядра которых сильно деформируются у границы пленки, а затем упруго отражаются от нее, восстанавливая форму солитонов, типичных для протяженного образца. Получена серия законов сохранения для волнового поля, обеспечивающая локализацию солитонных колебаний около границы образца и упругое отражение от нее движущихся солитонов. Показано, что изменение фазы внутренней прецессии солитона при отражении зависит от характера закрепления краевых спинов.

DOI: 10.31857/S0044451022110104
EDN: KZITUW

1. ВВЕДЕНИЕ

Пленки железо-иттриевых гранатов с толщиной от нескольких микрон до десятков микрон и длиной от нескольких до десятков сантиметров обладают свойствами ферромагнитной среды в интервале от 1 ГГц до 20 ГГц. Этот частотный интервал интенсивно исследуется благодаря возможности возбуждения распространяющихся вдоль пленки обменно-дипольных спиновых волн. Одним из главных результатов такого изучения явилось обнаружение солитонов огибающей спиновых волн в ферромагнитных пленках [1–3]. Если в теории линейных волн об эффектах обменного и диполь-дипольного взаимодействия принято говорить, когда соответствующие энергии сравнимы по порядку величины, то условия образования и структура даже слабонелинейных солитонов во многом определяются не соотношением энергий, а конкуренцией двух типов пространственной дисперсии – обменной и магнитостатической [4].

Кроме того, учет магнитостатики делает задачу не только неоднородной, но и нелокальной, и требует корректного учета краевых условий на поверхности образца.

Для анализа малоамплитудных возбуждений в магнитных пленках обычно используется локальное нелинейное уравнение Шредингера (НУШ):

$$i\partial_\tau\psi - \frac{\partial_k^2\omega(k)}{2}\partial_X^2\psi + g|\psi|^2\psi = 0. \quad (1)$$

Комплексное поле $\psi(X, \tau)$ описывает пространственно-временную модуляцию бегущей активационной волны

$$\psi(X, \tau)e^{i kx + i \omega(k) t} \equiv \psi e^{i \theta},$$

где k и $\omega(k)$ – волновое число и частота основной гармоники, x и t – пространственная координата и время, X, τ – соответствующие медленные переменные. Отклонения нормированной намагниченности $m_i(x, t)$ ($i = 1, 2, 3$) от равновесного положения $(0, 0, 1)$ выражаются через $\psi(X, \tau)$:

$$m_1 + im_2 = \psi e^{i\theta}, \quad m_3 \approx -|\psi|^2/2. \quad (2)$$

Упрощенный вывод НУШ предполагает дифференцируемость закона дисперсии линейных спиновых

* E-mail: kiseliev@imp.uran.ru

волн $\omega(k)$ по волновому числу k . Постоянная взаимодействия волн g традиционно вычисляется в пределе $k \rightarrow 0$ из разложения по амплитуде колебаний частоты однородного ферромагнитного резонанса [5]. Однако в области малых волновых чисел ($|kd| \ll 1$, d — толщина пленки) частота обменно-дипольных спиновых волн $\omega(k)$ является недифференцируемой функцией от k [6]. В работах [4, 7] показано, что при волновых числах k и частотах $\omega(k)$, удовлетворяющих условиям

$$L \gg \lambda \gg k^{-1} > d \gg a, \quad \lambda \ll c/\omega, \quad \partial_k^2 \omega(k) \neq 0, \quad (3)$$

допустима последовательная редукция уравнений нелинейной и нелокальной динамики ферромагнитной пластины при отсутствии закрепления спинов на её поверхности и корректном учете обменных и магнитостатических взаимодействий к упрощенной локальной модели (1). Здесь L — размер образца, λ — характерный размер магнитных неоднородностей, a — постоянная решетки, c — скорость света. Окрестности точек нулевой дисперсии, где $\partial_k^2 \omega(k) \approx 0$ (из-за конкуренции обменной и магнитостатической дисперсий), а также длинноволновые возбуждения с $|kd| < 1$, требуют отдельного рассмотрения [4]. При последовательном выводе НУШ константа взаимодействия волн учитывает неоднородности распределения намагниченности вдоль нормали к пластине и нетривиально зависит от волнового вектора основной гармоник и толщины пластины. В результате удастся описать особенности взаимодействия неоднородных по толщине пластины и распространяющихся вдоль пластины спиновых волн с близкими значениями не равных нулю волновых векторов. Использование этих результатов позволяет более тщательно перейти от модели (1) к наблюдаемым величинам.

В достаточно тонких пленках при свободных поверхностных спинах переменным магнитным полем возбуждается только нижняя ветвь спектра обменно-дипольных волн с почти однородным распределением намагниченности вдоль нормали к пластине [8]. Для нее существуют протяженные области волновых чисел (3), в которых $g > 0$, $\partial_k^2 \omega(k) < 0$. А значит справедлив критерий Лайтхилла [9]

$$g \partial_k^2 \omega < 0, \quad (4)$$

допускающий формирование экспоненциальных «светлых» солитонов из локализованных импульсов внешнего воздействия. В этом случае модель (1) масштабными преобразованиями приводится к стандартному виду фокусирующего НУШ:

$$i \partial_t \psi + \partial_x^2 \psi + 2|\psi|^2 \psi = 0. \quad (5)$$

В случае безграничной пластины ($-\infty < x < \infty$) уравнение (5) эквивалентно условию коммутативности двух дифференциальных операторов, зависящих от комплексного спектрального параметра [10, 11]. Такое представление (U - V -пара) позволяет найти отображение решений модели (5) в данные рассеяния вспомогательной спектральной задачи. В простейшем случае, когда $\psi(x, t)$ стремится к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$, эволюция данных рассеяния определяется линейными уравнениями и вычисляется явно по заданному в начальный момент времени распределению намагниченности $\psi(x, t = 0)$. Обратное спектральное преобразование позволяет по данным рассеяния найти полное решение начально-краевой задачи для НУШ (5). Строго говоря, эти результаты применимы лишь для протяженных образцов. Поэтому основные приложения НУШ (5) и его обобщения нашли в нелинейной оптике и гидродинамике: при конструировании линий оптоволоконной связи и моделировании волновых процессов в водных бассейнах (см. [12–15] и цитированную там литературу).

В случае конечных интервалов изменения x невозможно получить простое отображение начально-краевых условий, сформулированных для исходных полей, в данные рассеяния. Тем не менее, традиционный метод обратной задачи рассеяния на всей оси $-\infty < x < \infty$ позволяет решить ряд начально-краевых задач для волновых процессов на полуинтервале $0 \leq x < \infty$ [16–19]. В случае НУШ (5) для поля $\psi(x, t) = \chi(x, t)$ на полуоси $0 \leq x < \infty$ интегрируемыми оказываются практически важные краевые условия:

$$[\partial_x \chi - \beta \chi]|_{x=+0} = 0; \quad (6)$$

$$\chi \rightarrow 0, \quad \partial_x \chi \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad x \rightarrow +\infty. \quad (7)$$

Положительная или отрицательная постоянная поверхностной анизотропии β определяет характер закрепления спинов на краю пленки. С физической точки зрения параметр β учитывает одноионную анизотропию и/или внешнее магнитное поле на грани $x = 0$ образца. Эффективное магнитное поле и ось анизотропии направлены по нормали к развитой поверхности пленки.

В предельном случае $\beta \rightarrow 0$ первое соотношение (6) переходит в условие Неймана $\partial_x \chi|_{x=+0} = 0$ (свободные спины на краю пластины); в формальном пределе $|\beta| \rightarrow \infty$ оно сводится к условию Дирихле: $\chi|_{x=+0} = 0$ (полное закрепление спинов в точке $x = 0$).

В работах [16–19] предложена модификация метода обратной задачи рассеяния для решения НУШ

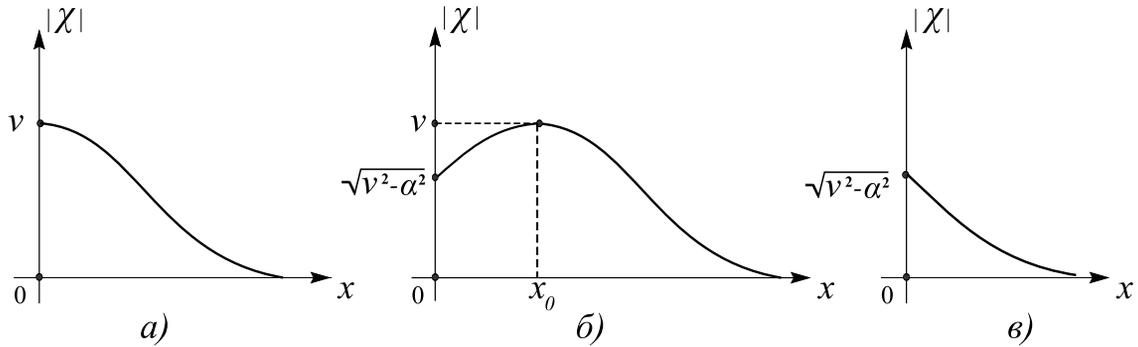


Рис. 1. Солитон, локализованный вблизи края образца, при $\alpha = 0$ (а), $\alpha < 0$, $2\nu x_0 = \ln[(\nu + |\alpha|)/(\nu - |\alpha|)]$ (б) и $\alpha > 0$ (в)

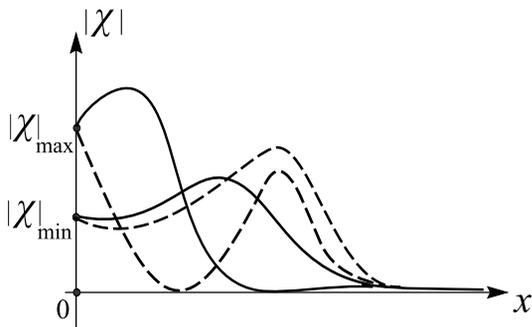


Рис. 2. Двухсолитонное возбуждение (60) при $\alpha = \varepsilon|\alpha|$, $\varepsilon = 1$ (сплошные линии) и $\varepsilon = -1$ (штриховые линии) в предельных положениях, соответствующих значениям $|\chi|(x = 0) = |\chi|_{min}$ и $|\chi|(x = 0) = |\chi|_{max}$

на полуоси при заданном начальном возмущении $\chi(x, t = 0)$ и краевых условиях (6), (7). Схема интегрирования является аналогом метода «изображений», используемого при решении линейных краевых задач электростатики с определенной пространственной симметрией. Однако в перечисленных работах анализ мультисолитонов отсутствует. Так, в [19] с самого начала обсуждаются лишь диспергирующие волны без солитонов. В данной работе мы исследуем начально-краевую задачу в полубесконечной ферромагнитной пленке при наличии спиновых волн и солитонов. Покажем, что солитоны вблизи границы пленки обладают качественно новыми свойствами, которые отсутствуют в безграничной среде. Исследуем изменения динамических свойств и строение солитонов при разной степени закрепления спинов на границе $x = 0$ образца. Получим новые законы сохранения для нелинейных коллективных возбуждений в полубесконечной пленке.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены формулы работ [16, 17], кото-

рые необходимы для теоретического описания нелинейной динамики полубесконечной ферромагнитной пленки. В разд. 3 дано решение начально-краевой задачи для НУШ на полуоси. Преимущество метода состоит не только в прямой связи с традиционной схемой интегрирования НУШ на интервале $-\infty < x < \infty$ [11], но и в том, что в отличие от других подходов [18, 19], он допускает обобщение и открывает принципиальную возможность подробного анализа квазиодномерных солитонов и диспергирующих волн в полубесконечных образцах с интегрируемыми краевыми условиями [20] в рамках базовых моделей Ландау–Лифшица для гейзенберговского ферромагнетика и ферромагнетиков с квадратичной по намагниченности анизотропией [4].

В разд. 4 получены явные формулы для солитонных возбуждений в полубесконечной пластине. Показано, что существуют два класса солитонов. Мультисолитоны первого из них локализованы вблизи края $x = 0$ пленки и представляют собой приграничные колебания намагниченности со специфическими частотными и амплитудными свойствами. Второй класс образуют движущиеся частицеподобные объекты, которые упруго отражаются от края пленки. На больших расстояниях от края пленки они трансформируются в типичные для безграничной среды прецессирующие магнитные солитоны, упруго сталкивающиеся друг с другом.

В разд. 5 для полубесконечной ферромагнитной пленки найдена серия локальных интегралов движения, каждый из которых представляет аддитивную сумму вкладов от солитонов и квазичастиц непрерывного спектра спиновых волн. Установлены дополнительные законы сохранения, которые обеспечивают локализацию солитонов вблизи границы образца или их отражение от нее.

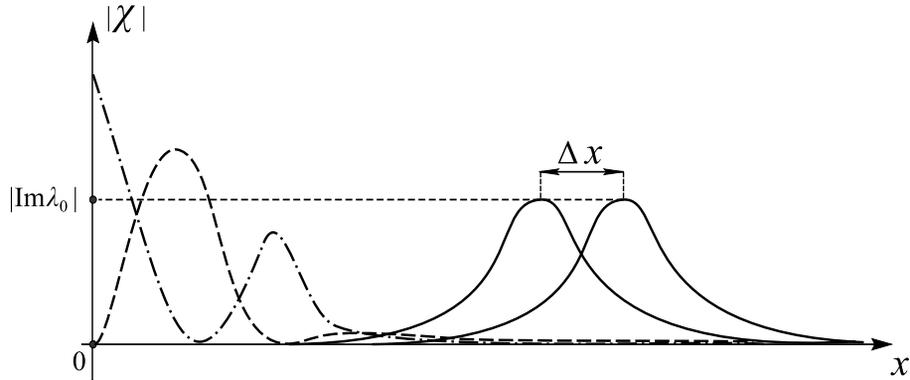


Рис. 3. Солитон (66) в моменты времени $t = \pm t_0$, $t_0 \gg 1$ (сплошные линии), $t = 0$ при $\alpha = \infty$ (штриховая линия) и $t = 0$ при $\alpha = 0$ (штрихпунктирная линия)

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Напомним, что при решении начально-краевой задачи для НУШ на всей оси $-\infty < x < \infty$ поле $\psi(x, t)$ предполагается нужное число раз дифференцируемым по переменным x, t . Тогда уравнение (5) эквивалентно условию коммутативности двух операторов [11]:

$$[\partial_x - U(\lambda), \partial_t - V(\lambda)] = 0, \tag{8}$$

где

$$U(\lambda) = -\frac{i\lambda}{2} \sigma_3 + i(\psi^* \sigma_+ + \psi \sigma_-),$$

$$V(\lambda) = i\sigma_3 \left(\frac{\lambda^2}{2} - |\psi|^2 \right) - [(\partial_x \psi - i\lambda \psi) \sigma_- - (\partial_x \psi^* + i\lambda \psi^*) \sigma_+],$$

σ_i ($i = 1, 2, 3$) — матрицы Паули, $\sigma_{\pm} = (\sigma_1 \pm i\sigma_2)/2$, λ — комплексный спектральный параметр. Представление (8) можно переписать в проинтегрированном виде, используя матрицу $T_0(x, y, \lambda)$ трансляции вдоль оси x из точки y в точку x . Здесь и далее, где это не вызывает недоразумений, не указываем зависимость от времени t . Матрица $T_0(x, y, \lambda)$ удовлетворяет уравнениям [11]

$$\begin{aligned} \partial_x T_0(x, y, \lambda) &= U(x, \lambda) T_0(x, y, \lambda), \\ \partial_y T_0(x, y, \lambda) &= -T_0(x, y, \lambda) U(y, \lambda), \\ \partial_t T_0(x, y, \lambda) &= V(x, \lambda) T_0(x, y, \lambda) - T_0(x, y, \lambda) V(y, \lambda) \end{aligned} \tag{9}$$

с условиями $T_0(x, x, \lambda) = I$, $\det T_0(x, y, \lambda) = 1$ и обладает свойством суперпозиции

$$T_0(x, z, \lambda) T_0(z, y, \lambda) = T_0(x, y, \lambda).$$

В частности, выполняется соотношение $T_0(x, y, \lambda) = T_0^{-1}(y, x, \lambda)$. Матричные функции $U(\lambda)$ и $V(\lambda)$ имеют специальный вид:

$$U^*(\lambda^*) = \sigma_2 U(\lambda) \sigma_2, \quad V^*(\lambda^*) = \sigma_2 V(\lambda) \sigma_2, \tag{10}$$

Поэтому из (9) следует свойство инволюции

$$T_0^*(x, y, \lambda^*) = \sigma_2 T_0(x, y, \lambda) \sigma_2. \tag{11}$$

Перейдем к рассмотрению НУШ (5) для поля $\psi(x, t) = \chi(x, t)$ на полуоси $0 \leq x < \infty$ при крайевых условиях (6), (7). Для включения такой задачи в классическую схему метода обратной задачи продолжим поле $\chi(x, t)$ на всю ось четным образом. Для этого зададим $\psi(x, t)$ в виде непрерывной кусочно-дифференцируемой функции

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \chi(x, t), & x \geq 0, \\ \chi(-x, t), & x < 0. \end{cases} \tag{12}$$

В точке $x = 0$ продолжение $\psi(x, t)$ будет непрерывным:

$$\psi(x = +0, t) = \psi(x = -0, t) = \chi(x = 0, t),$$

но его первая производная претерпевает скачок [16, 17]:

$$\partial_x \psi|_{x=+0} - \partial_x \psi|_{x=-0} = 2\partial_x \chi(x = +0, t).$$

Эти соотношения позволяют трактовать прежнее краевое условие (6) как дополнительные ограничения на поле $\psi(x, t)$ в точке $x = 0$:

$$\Delta \psi|_{x=0} = 0, \quad [\Delta \partial_x \psi - 2\psi]|_{x=0} = 0, \tag{13}$$

которые аналогичны таковым в процедуре интегрирования методом «изображений» линеаризованного НУШ на полуоси $0 \leq x < \infty$. Здесь $\Delta f|_{x=0} = f(x = +0) - f(x = -0)$.

Простой проверкой можно убедиться, что ограничение (13) эквивалентно связи [20]

$$V_+(\lambda)K(\lambda) - K(\lambda)V_-(\lambda) = 0, \quad (14)$$

где $V_{\pm}(\lambda) \equiv V(\lambda)|_{x=\pm 0}$, $K(\lambda) = \lambda I + i\beta\sigma_3$, I — единичная матрица. Для учета связи (14) модифицируем $T_0(x, y, \lambda)$ и введем новую матрицу трансляции $T(x, y, \lambda)$ [16]:

$$T(x, y, \lambda) = \begin{cases} T_0(x, y, \lambda), & xy > 0, \\ T_0(x, +0, \lambda)K(\lambda)T_0(-0, y, \lambda), & x > 0 > y, \\ T_0(x, -0, \lambda)K^{-1}(\lambda)T_0(+0, y, \lambda), & x < 0 < y, \end{cases} \quad (15)$$

включающую множители $K(\lambda)$ и $K^{-1}(\lambda)$. Из представления (15) заключаем, что новая матрица переноса не является унимодулярной:

$$\det T(x, y, \lambda) = [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x - \text{sign } y)/2}. \quad (16)$$

Для нее справедливы соотношения

$$\begin{aligned} T(x, x, \lambda) &= I \text{ при } x \neq 0, \\ T(x, y, \lambda) &= T^{-1}(y, x, \lambda) \text{ при } x \neq y \end{aligned} \quad (17)$$

и

$$T(+0, -0, \lambda) = T^{-1}(-0, +0, \lambda) = K(\lambda). \quad (18)$$

При $x \neq 0, y \neq 0$ с учетом (14), (15) получаем для $T(x, y, \lambda)$ дифференциальные уравнения

$$\begin{aligned} \partial_x T(x, y, \lambda) &= U(x, \lambda)T(x, y, \lambda), \\ \partial_y T(x, y, \lambda) &= -T(x, y, \lambda)U(y, \lambda), \\ \partial_t T(x, y, \lambda) &= V(x, \lambda)T(x, y, \lambda) - T(x, y, \lambda)V(y, \lambda) \end{aligned} \quad (19)$$

— те же, что и для безграничной пластины (9). Это позволяет включить краевую задачу (6), (7) для НУШ (1) на полуоси $0 \leq x < \infty$ в схему обратной задачи рассеяния на всей оси $-\infty < x < \infty$. В то же время, специфика продолжения поля $\psi(x, t)$ (12) приводит к модификации расчетов. Остановимся на этом подробнее.

3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ НУШ НА ПОЛУОСИ МЕТОДОМ «ИЗОБРАЖЕНИЙ»

Прямая задача рассеяния

Следуя стандартной схеме метода обратной задачи рассеяния на всей оси $-\infty < x < \infty$ [11], введем матричные функции

$$T_{\pm}(x, t, \lambda) = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \left[T(x, y, \lambda) \exp\left(-\frac{i\lambda y}{2} \sigma_3\right) \right] \quad (20)$$

— базисные решения Ёоста вспомогательной линейной системы [11, 16]

$$\partial_x T_{\pm} = U T_{\pm}. \quad (21)$$

Их асимптотическое поведение

$$T_{\pm}(x, t, \lambda) \rightarrow \exp\left(-\frac{i\lambda x \sigma_3}{2}\right) \text{ при } x \rightarrow \pm\infty$$

согласовано с условием (7).

Нетрудно проверить, что при $x \geq 0$ матрица $p(x, t)$ в разложении решения Ёоста $T_+(x, t, \lambda)$ по обратным степеням λ (при $\lambda \rightarrow \infty$)

$$T_+(x, \lambda) = \left(I + \frac{p(x, t)}{\lambda} + \dots \right) \exp\left(-\frac{i\lambda x \sigma_3}{2}\right),$$

удовлетворяет соотношению

$$[\sigma_3, p] = 2(\chi^* \sigma_+ + \chi \sigma_-).$$

Отсюда сразу находим явное решение НУШ (5) при $x \geq 0$ в терминах матричного элемента $[T_+(x, t, \lambda)]_{21}$:

$$\chi(x, t) = - \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left[[T_+(x, t, \lambda)]_{21} \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) \lambda \right]. \quad (22)$$

Свойство четности продолжения $\psi(x, t) = \psi(-x, t)$ (12) ведет к дополнительной симметрии матриц U и V :

$$\begin{aligned} U(x, \lambda) &= -\sigma_3 U(-x, -\lambda) \sigma_3, \\ V(x, \lambda) &= \sigma_3 V(-x, -\lambda) \sigma_3, \end{aligned}$$

с учетом которой из системы (19) следует пропорциональность матричных функций $T(x, y, \lambda)$ и $\sigma_3 T(-x, -y, -\lambda) \sigma_3$. Коэффициент пропорциональности фиксируется равенством (18)

$$T(x, y, \lambda) = \text{sign}(xy) \sigma_3 T(-x, -y, -\lambda) \times \sigma_3 [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign } x - \text{sign } y)/2}, \quad \lambda \in R. \quad (23)$$

Здесь мы воспользовались соотношением

$$K^{-1}(\lambda) = -\frac{K(-\lambda)}{\lambda^2 + \beta^2}.$$

Поскольку $K^*(\lambda^*) = \sigma_2 K(\lambda) \sigma_2$, формулы (11), (15) сохраняют прежнюю редукцию для новой матрицы трансляции:

$$T^*(x, y, \lambda^*) = \sigma_2 T(x, y, \lambda) \sigma_2. \quad (24)$$

Из (16), (23), (24) находим ключевые свойства функций Йоста при $\lambda \in R$:

$$\begin{aligned} \det T_{\pm}(x, \lambda) &= [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign} x \mp 1)/2}, \\ T_{\pm}(x, \lambda) &= \pm \text{sign } x \sigma_3 T_{\mp}(-x, -\lambda) \sigma_3 \times \\ &\quad \times [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign} x \mp 1)/2}, \\ T^*(x, \lambda) &= \sigma_2 T(x, \lambda) \sigma_2. \end{aligned} \tag{25}$$

На вещественной λ -оси фундаментальные решения определены одновременно, поэтому они связаны матрицей перехода $T(\lambda)$:

$$T_-(x, \lambda) = T_+(x, \lambda) T(\lambda), \tag{26}$$

алгебраическая структура которой определяется редукциями (25):

$$\begin{aligned} T(\lambda) &= \begin{pmatrix} a(\lambda) & -\bar{b}(\lambda) \\ b(\lambda) & \bar{a}(\lambda) \end{pmatrix}, \\ a(\lambda)\bar{a}(\lambda) + b(\lambda)\bar{b}(\lambda) &= \lambda^2 + \beta^2, \\ \bar{a}(\lambda) &= a^*(\lambda), \quad \bar{b}(\lambda) = b^*(\lambda), \\ a^*(-\lambda) &= -a(\lambda), \quad b(-\lambda) = -b(\lambda), \quad \lambda \in R. \end{aligned} \tag{27}$$

Введем обозначение $T_{\pm}^{(i)}$ для i -ого столбца матрицы $T_{\pm} = (T_{\pm}^{(1)}, T_{\pm}^{(2)})$. Столбцы $T_{-}^{(1)}(x, \lambda)$ и $T_{+}^{(2)}(x, \lambda)$ решений Йоста аналитически продолжаютя с вещественной оси в область $\text{Im} \lambda > 0$, а столбцы $T_{-}^{(2)}(x, \lambda)$ и $T_{+}^{(1)}(x, \lambda)$ будут аналитическими функциями в нижней полуплоскости $\text{Im} \lambda < 0$, кроме, может быть, простых полюсов матрицы $T_{+}(x, \lambda)$ при $x < 0$ в точках $\lambda = \pm i\beta$, унаследованных от матрицы $K^{-1}(\lambda)$.

Из соотношения (26) получаем представление для $a(\lambda)$ в форме

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= \frac{\det[T_{-}^{(1)}(x, \lambda), T_{+}^{(2)}(x, \lambda)]}{\det T_{+}(x, \lambda)} = \\ &= [\lambda^2 + \beta^2]^{(1 - \text{sign} x)/2} \det[T_{-}^{(1)}(x, \lambda), T_{+}^{(2)}(x, \lambda)]. \end{aligned} \tag{28}$$

Отсюда следует, что функция $a(\lambda)$ допускает аналитическое продолжение в верхнюю полуплоскость $\text{Im} \lambda > 0$, где в общем случае имеет нули, которые будем предполагать простыми. Кроме того, она может иметь нуль в точке $\lambda = i|\beta|$ (см. (15), (20), (28)). Можно показать, что элемент $\bar{a}(\lambda)$ матрицы перехода продолжается с вещественной оси в область $\text{Im} \lambda < 0$, где выражается через $a(\lambda^*)$: $\bar{a}(\lambda) = a^*(\lambda^*)$.

Редукция $a^*(-\lambda) = -a(\lambda)$ (27) переносится с вещественной оси в область $\text{Im} \lambda > 0$, где принимает вид

$$a^*(-\lambda^*) = -a(\lambda). \tag{29}$$

Согласно (29), нули функции $a(\lambda)$ либо входят парами:

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \{\lambda_k, -\lambda_k^*\}, \quad \text{Im } \lambda_k > 0, \\ &\quad k = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, 2N; \end{aligned} \tag{30}$$

либо являются чисто мнимыми:

$$\lambda_j = \{i\nu_s\}, \quad \nu_s > 0, \quad s = 1, 2, \dots, M. \tag{31}$$

Если $a(\lambda_i) = 0$, то из (28) заключаем, что столбцы $T_{-}^{(1)}(x, \lambda_j)$ и $T_{+}^{(2)}(x, \lambda_j)$ пропорциональны:

$$T_{-}^{(1)}(x, \lambda_j) = \gamma(\lambda_j) T_{+}^{(2)}(x, \lambda_j). \tag{32}$$

Продолжение комбинации двух последних равенств (25) в комплексную λ -плоскость дает соотношение

$$\begin{aligned} T_{\pm}(x, \lambda) &= \pm \text{sign } x \sigma_1 T_{\mp}^*(-x, -\lambda^*) \sigma_1 \times \\ &\quad \times [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign} x \mp 1)/2}, \end{aligned} \tag{33}$$

где значения λ выбираются в областях аналитичности соответствующих столбцов. В частности, из (33) находим

$$\begin{aligned} T_{-}^{(1)}(x, \lambda) &= -\text{sign } x \sigma_1 T_{+}^{(2)*}(-x, -\lambda^*) \times \\ &\quad \times [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign} x + 1)/2}, \\ T_{+}^{(2)}(x, \lambda) &= \text{sign } x \sigma_1 T_{-}^{(1)*}(-x, -\lambda^*) \times \\ &\quad \times [\lambda^2 + \beta^2]^{(\text{sign} x - 1)/2}, \end{aligned} \tag{34}$$

где $\text{Im} \lambda > 0$.

С помощью (32), (34) выводим связь нормировочных постоянных:

$$\gamma(\lambda_k) \gamma^*(-\lambda_k^*) = -(\lambda_k^2 + \beta^2), \quad k = 1, 2, \dots, N; \tag{35}$$

$$|\gamma(i\nu_s)|^2 = \nu_s^2 - \beta^2 > 0, \quad s = 1, 2, \dots, M. \tag{36}$$

Ограничение (36) справедливо только при $\nu_s > |\beta|$.

В пределе больших λ функции Йоста имеют асимптотики [16]:

$$\begin{aligned} T_{+}(x, \lambda) &= \exp\left(-\frac{i\lambda x}{2} \sigma_3\right) [I + o(1)], \quad x > 0; \\ T_{+}(x, \lambda) &= \lambda^{-1} \exp\left(-\frac{i\lambda x}{2} \sigma_3\right) [I + o(1)], \quad x < 0; \\ T_{-}(x, \lambda) &= \lambda \exp\left(-\frac{i\lambda x}{2} \sigma_3\right) [I + o(1)], \quad x > 0; \\ T_{-}(x, \lambda) &= \exp\left(-\frac{i\lambda x}{2} \sigma_3\right) [I + o(1)], \quad x < 0. \end{aligned} \tag{37}$$

Элемент $a(\lambda)$ матрицы перехода восстанавливается по своим нулям, полюсам, асимптотическому

поведению при больших λ и коэффициенту отражения $b(\lambda)$ [11, 16]:

$$a(\lambda) = (\lambda + i\alpha) \prod_{s=1}^M \left(\frac{\lambda - i\nu_s}{\lambda + i\nu_s} \right) \prod_{k=1}^N \frac{(\lambda - \lambda_k)(\lambda + \lambda_k^*)}{(\lambda + \lambda_k)(\lambda - \lambda_k^*)} \times \exp\left(\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \frac{\ln[1 - |b(\mu)|^2(\mu^2 + \beta^2)^{-1}]}{\mu - \lambda} \right),$$

$$\text{Im}\lambda > 0, \quad \alpha^2 = \beta^2. \quad (38)$$

В формуле (38) N и M определяют соответственно число комплексных (30) и чисто мнимых (31) нулей коэффициента $a(\lambda)$.

Для конкретизации в соотношении (38) связи между параметром α и постоянной анизотропии β построим подходящее представление для элементов матрицы перехода. Таковое следует из (26) с учетом (15) в пределе $x \rightarrow +0$:

$$T(\lambda) = T_+^{-1}(+0, \lambda) K(\lambda) T_-(-0, \lambda). \quad (39)$$

Используя (33), при $x \rightarrow +0$ выражаем $T_-(-0, \lambda)$ через $T_+(+0, \lambda)$:

$$T_-(-0, \lambda) = \sigma_1 T_+^*(+0, -\lambda^*) \sigma_1,$$

и переписываем (39) в виде

$$T(\lambda) = T_+^{-1}(+0, \lambda) (\lambda + i\beta\sigma_3) \sigma_1 T_+^*(+0, -\lambda^*) \sigma_1. \quad (40)$$

Принимая во внимание, что $\det T_+(+0, \lambda) = 1$, из (40) получаем полезные для дальнейшего анализа формулы для элементов матрицы перехода:

$$a(\lambda) = (\lambda + i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{22}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{22}^* - (\lambda - i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{12}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{12}^*,$$

$$\text{Im}\lambda > 0; \quad (41)$$

$$b(\lambda) = -(\lambda + i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{21}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{22}^* + (\lambda - i\beta)[T_+(+0, \lambda)]_{11}[T_+(+0, -\lambda^*)]_{12}^*,$$

$$\lambda \in R. \quad (42)$$

Напомним, что $a(\lambda)$ является аналитической функцией в верхней полуплоскости параметра λ . В (41) она выражена через элементы столбца $T_+^{(2)}(\lambda)$, которые аналитичны в той же области. Функция $b(\lambda)$, напротив, не обладает какими-либо определенными свойствами аналитичности и определена лишь при $\lambda \in R$. Поэтому в правой части (42) следует брать пределы компонент векторов $T_+^{(2)}(\lambda)$ и $T_+^{(1)}(\lambda)$ из областей их определения $\text{Im}\lambda > 0$ и $\text{Im}\lambda < 0$ на контур $-\infty < \lambda < \infty$.

Представление (41) в пределе $\lambda \rightarrow +i0$ с учетом последней из формул (25) дает значение

$$a(\lambda = 0) = i\beta \det T_+(+0, \lambda) = i\beta.$$

С другой стороны, из дисперсионного соотношения (38) ввиду четности функции $|b(\mu)|^2$ находим

$$a(\lambda = 0) = i\alpha (-1)^M.$$

Таким образом, связь параметров α и β определена равенством

$$\beta = \alpha (-1)^M, \quad (43)$$

зависящим от числа мнимых нулей коэффициента $a(\lambda)$.

С помощью вспомогательного линейного уравнения (21) мы построили отображение решений исходной начально-краевой задачи для НУШ на полуоси в полный набор данных рассеяния. Он содержит спектральные плотности $b(\lambda)$, где

$$-\infty < \lambda < +\infty,$$

дискретные нули λ_j коэффициента $a(\lambda)$ ($\text{Im}\lambda_j > 0$) и нормировочные постоянные $\gamma(\lambda_j)$ ($j = 1, 2, \dots, N + M$). В новых переменных задача интегрирования НУШ сводится к решению линейных задач. Из последнего уравнения (19) вытекает привычная зависимость данных рассеяния от времени:

$$a(t, \lambda) = a(0, \lambda), \quad b(t, \lambda) = b(0, \lambda) e^{-i\lambda^2 t},$$

$$\gamma(\lambda_j, t) = \gamma(0, \lambda_j) e^{-i\lambda_j^2 t}. \quad (44)$$

Значения постоянных интегрирования $b(0, \lambda)$, λ_j , $\gamma(0, \lambda_j)$ находим из уравнения (21) по заданному начальному распределению намагниченности $\chi(x, t = 0)$.

Обратная задача рассеяния

Спектральная функция $b(\lambda, t)$ параметризует спин-волновые цуги, которые расплываются с течением времени из-за преобладания эффектов дисперсии над эффектами сжатия пакетов из-за взаимодействия гармоник. Нули λ_j коэффициента $a(\lambda)$ параметризуют структурно-устойчивые частицеподобные объекты — солитоны. Долгоживущим магнитным солитонам в отсутствие диспергирующих волн соответствует коэффициент $a(\lambda)$ с нулями при условии $b(\lambda) = \bar{b}(\lambda) \equiv 0$.

Для теоретического описания эволюции начального распределения намагниченности в полубесконечной пластине с краевыми условиями (6), (7) следует перейти от данных рассеяния к наблюдаемой

величине $\chi(x, t)$. Специфика работ [16, 17] состоит в том, что обратные отображения на интервалах

$$0 < x < \infty \quad \text{и} \quad -\infty < x < 0$$

оказываются разными и могут рассматриваться независимо. Хотя построенные в конечном счете решения НУШ — реальное при $x > 0$ и «фиктивное» при $x < 0$ — связаны симметрией (12), соответствующие им функции Йоста таким свойством не обладают.

Для построения искомых решений $\psi(x, t) = \chi(x, t)$ задачи Коши для НУШ (5) с краевыми условиями (6), (7) на интервале $0 < x < \infty$ исходим из первого столбца матричной связи (26) функций Йоста на вещественной λ -оси. Соответствующее равенство запишем в виде, удобном для дальнейших вычислений:

$$\begin{aligned} & \frac{T_-^{(1)}(x, \lambda)}{a(\lambda)} \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ & = T_+^{(1)}(x, \lambda) \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \\ & + T_+^{(2)}(x, \lambda) r(\lambda) \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right), \quad \lambda \in R, \quad (45) \end{aligned}$$

где $r(\lambda) = b(\lambda)/a(\lambda)$. Зависимость от времени t пока опускаем.

Напомним, что векторная функция $T_-^{(1)}(x, \lambda) a^{-1}(\lambda) \exp(i\lambda x/2)$ является аналитической в области $\text{Im}\lambda > 0$ всюду, кроме полюсов, которые совпадают с нулями коэффициента $a(\lambda)$ (38). В общем случае их положения определяются формулами (30), (31). При $\alpha < 0$ у элемента $a(\lambda)$ в области $\text{Im}\lambda > 0$ появляется дополнительный особый нуль $\lambda = i|\alpha|$. Функция $T_+^{(1)}(x, \lambda) \exp(i\lambda x/2)$ будет аналитической в нижней полуплоскости параметра λ . Асимптотическое поведение этих функций при $x > 0$ и $\lambda \rightarrow \infty$ дают формулы (см. (37), (38)):

$$\begin{aligned} & \frac{T_-^{(1)}(x, \lambda)}{a(\lambda)} \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = O\left(\frac{1}{\lambda}\right), \\ & T_+^{(1)}(x, \lambda) \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = O\left(\frac{1}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (46)$$

Процедура построения линейных интегральных уравнений обратной задачи рассеяния для НУШ на полуоси (при $0 < x < \infty$) отличается от таковой на всей оси [10] лишь наличием дополнительных редукций и появлением у функции $a(\lambda)$ особого нуля $\lambda = i|\alpha|$ при $\alpha < 0$. Обсудим, к чему это приводит.

Рассмотрим кусочно-аналитическую функцию параметра λ :

$$F(x, \lambda) = \begin{cases} \frac{T_-^{(1)}(x, \lambda)}{a(\lambda)} \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right), & \text{Im}\lambda > 0, \\ T_+^{(1)}(x, \lambda) \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right), & \text{Im}\lambda < 0. \end{cases} \quad (47)$$

В силу оценок (46) ее значения в любой точке λ -плоскости с помощью теоремы Коши выражаются [10] через интеграл вдоль вещественной оси от скачка функции $F(x, \lambda)$ при переходе этой оси, а также через вычеты функции $T_-^{(1)}(x, \lambda) a^{-1}(\lambda) \exp(i\lambda x/2)$ в нулях знаменателя $a(\lambda)$. При $\alpha > 0$ остаются только вычеты в точках $\lambda = \lambda_j$ (30), (31), в которых, согласно (32), имеем

$$\begin{aligned} & \text{Res}_{\lambda=\lambda_j} \left[T_-^{(1)}(x, \lambda) a^{-1}(\lambda) \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) \right] = \\ & = \gamma(\lambda_j) T_+^{(2)}(x, \lambda_j) [a'(\lambda_j)]^{-1} \exp\left(\frac{i\lambda_j x}{2}\right). \end{aligned}$$

В отличие от [10] производные $a'(\lambda_j)$ и нормировочные постоянные $\gamma(\lambda_j)$ теперь связаны редукциями (29), (35), (36). При $\alpha < 0$ элемент $a(\lambda)$ в области своей аналитичности имеет особый нуль $\lambda = i|\alpha|$, поэтому у функции $F(x, \lambda)$ в этой точке может появиться полюс. В действительности таковой отсутствует, так как согласно редукции (36) $\gamma(i|\alpha|) = 0$, а значит $T_-^{(1)}(x, i|\alpha|) = 0$ при $\alpha < 0, x > 0$.

Интегральное представление для кусочно-аналитической функции $F(x, \lambda)$ имеет вид

$$\begin{aligned} F(x, \lambda) = & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sum_n \frac{c_n y(x, \lambda_n)}{\lambda - \lambda_n} + \\ & + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \frac{T_+^{(2)}(x, \mu) r(\mu) \exp\left(\frac{i\mu x}{2}\right)}{\mu - \lambda}, \end{aligned} \quad (48)$$

где

$$\begin{aligned} & y(x, \lambda_n) = T_+^{(2)}(x, \lambda_n) \exp(i\lambda_n x/2), \\ & c_n = \gamma(\lambda_n)/a'(\lambda_n), \quad \gamma(\lambda_n)\gamma^*(-\lambda_n^*) = -(\alpha^2 + \lambda_n^2). \end{aligned}$$

В этой и последующих формулах величины c_n и $r(\mu)$ зависят от времени:

$$c_n(t) = c_n(t=0) e^{-i\lambda_n^2 t}, \quad r(\mu, t) = r(\mu, t=0) e^{-i\mu^2 t}.$$

Последнее из свойств (25) переносится с вещественной λ -оси в комплексную плоскость и для столбцов $T_+^{(1)}(x, \lambda)$ и $T_+^{(2)}(x, \lambda)$ принимает вид

$$T_+^{(1)}(x, \lambda) = i\sigma_2 [T_+^{(2)}(x, \lambda^*)]^*, \quad \text{Im}\lambda \leq 0. \quad (49)$$

С учетом (49) представление (48) дает замкнутую систему линейных интегральных уравнений для расчета функций $T_+^{(2)}(x, \lambda)$ при $-\infty < \lambda < \infty$ и дискретных значений $y(x, \lambda_n)$ ($\text{Im}\lambda_n > 0$):

$$i\sigma_2[T_+^{(2)}(x, \lambda)]^* \exp\left(\frac{i\lambda x}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sum_n \frac{c_n y(x, \lambda_n)}{\lambda - \lambda_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \frac{T_+^{(2)}(x, \mu)}{\mu - \lambda + i0} r(\mu) \exp\left(\frac{i\mu x}{2}\right), \quad \lambda \in R;$$

$$i\sigma_2 y^*(x, \lambda_n) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ix\lambda_n^*} + \sum_m \frac{c_m y(x, \lambda_m) e^{-ix\lambda_n^*}}{\lambda_n^* - \lambda_m} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \frac{T_+^{(2)}(x, \mu)}{\mu - \lambda_n^*} r(\mu) \exp\left(\frac{i\mu x}{2} - ix\lambda_n^*\right).$$

(50)

После того, как решение уравнений (50) найдено, формула (48) определяет значения функции $F(x, \lambda)$ во всех точках верхней и нижней λ -полуплоскости.

Для солитонных состояний коэффициент отражения $r(\mu) \equiv 0$ и значит функция $F(x, \lambda)$ не имеет скачка на вещественной оси λ . Поэтому остаются только алгебраические уравнения для расчета функций $y^*(x, \lambda_n)$ и $y(x, \lambda_n)$. После простых преобразований можно исключить $y^*(x, \lambda_n)$ и получить замкнутую систему линейных уравнений для вычисления $y(x, \lambda_n)$:

$$y(x, \lambda_n) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ix\lambda_n} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \sum_m \frac{c_m^* e^{ix(\lambda_n - \lambda_m^*)}}{\lambda_m^* - \lambda_n} + \sum_{p,m} \frac{c_m^* c_p e^{ix(\lambda_n - \lambda_m^*)} y(x, \lambda_p)}{(\lambda_m^* - \lambda_n)(\lambda_m^* - \lambda_p)}. \quad (51)$$

Формулы для мультисолитонов упрощаются, если вместо функций $\gamma(\lambda, t)$ и $a(\lambda)$ ввести

$$\tilde{\gamma}(\lambda, t) = \frac{\gamma(\lambda, t)}{\lambda + i\alpha},$$

$$\tilde{a}(\lambda) = \frac{a(\lambda)}{\lambda + i\alpha} = \prod_{s=1}^M \left(\frac{\lambda - i\nu_s}{\lambda + i\nu_s} \right) \prod_{k=1}^N \frac{(\lambda - \lambda_k)(\lambda + \lambda_k^*)}{(\lambda + \lambda_k)(\lambda - \lambda_k^*)}. \quad (52)$$

Тогда

$$c_n(t) = \tilde{\gamma}(\lambda, t) / \tilde{a}'(\lambda_n),$$

$$\tilde{\gamma}(\lambda_n, t) \tilde{\gamma}^*(-\lambda_n^*, t) = f(-\lambda_n), \quad (53)$$

$$\tilde{\gamma}(\lambda_n, t) = \tilde{\gamma}(\lambda_n, t=0) e^{-i\lambda_n^2 t},$$

где $f(\lambda) = (\lambda + i\alpha)/(\lambda - i\alpha)$.

Из системы (51) следует, что проекции векторов $y(x, t, \lambda_n)$ независимы. Согласно (47), (48), (22), солитонные решения НУШ выражаются через вторые из них:

$$\chi(x, t) = - \sum_n c_n(t) y_2(x, t, \lambda_n), \quad 0 \leq x < \infty, \quad (54)$$

и по построению удовлетворяют краевому условию (6) с соотношением (43):

$$[\partial_x \chi - \beta \chi]|_{x=0} = 0, \quad \beta = (-1)^M \alpha, \quad (55)$$

где M — число нулей коэффициента $\tilde{a}(\lambda)$ вида $\lambda = i\nu_s$ ($\nu_s > |\alpha|$).

4. АНАЛИЗ СОЛИТОНОВ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПЛАСТИНЕ

Прецессирующие солитоны, локализованные около края пластины

Обсудим вначале коллективные возбуждения, которые параметризуются мнимыми нулями функции $\tilde{a}(\lambda)$ (52). Оказывается, что все они отвечают неподвижным солитонам, ядра которых имеют колебательные степени свободы и локализованы около края $x = 0$ пластины.

Пусть $M = 1$, $\tilde{a}(\lambda) = (\lambda - i\nu)/(\lambda + i\nu)$ и $\nu > |\alpha|$. Из соотношений (53) найдем $|\tilde{\gamma}(i\nu)| = \sqrt{(\nu - \alpha)/(\nu + \alpha)}$ и запишем выражение для $c_1(t) \equiv c(t)$ в виде

$$c(t) = 2\nu \left(\frac{\nu - \alpha}{\nu + \alpha} \right)^{1/2} e^{i\varphi(t)}, \quad \varphi(t) = \nu^2 t + \delta_0, \quad (56)$$

где δ_0 — произвольная вещественная постоянная. Тогда система (51) дает компоненты вектора $y(i\nu)$:

$$y_1(i\nu) = \frac{ic^*(t)e^{-\nu x}}{2\nu\Delta(x)}, \quad y_2(i\nu) = \frac{1}{\Delta(x)}, \quad (57)$$

где $\Delta(x) = e^{\nu x} + |c(t)/(2\nu)|^2 e^{-\nu x}$, а формулы (54), (55) дают солитонное решение НУШ:

$$\chi(x, t) = - \frac{c(t)}{\Delta(x)} = - \frac{\nu\sqrt{\nu^2 - \alpha^2}}{\nu \text{ch}(\nu x) + \alpha \text{sh}(\nu x)} e^{i\nu^2 t + i\delta_0}, \quad \nu^2 > \alpha^2, \quad 0 < x < \infty, \quad (58)$$

с краевым условием $\partial_x \ln \chi|_{x=0} = -\alpha$ (55). Солитон (58) примыкает к краю $x = 0$ пластины. Согласно формулам (2), компоненты намагниченности в ядре солитона (58) совершают однородную прецессию с

частотой $\omega = \nu^2$ вокруг нормали к плоскости пленки.

При $\alpha = 0$ выражение (58) упрощается:

$$\chi(x, t) = -\frac{\nu}{\text{ch}(\nu x)} e^{i\nu^2 t + i\delta_0}, \quad (59)$$

и описывает солитон в отсутствие закрепления спинов на границе $x = 0$ образца. В этом случае ширина солитона $l \sim \nu^{-1}$, частота его прецессии $\omega = \nu^2$ и максимальная амплитуда $A = \nu$ удовлетворяют алгебраическим связям, которые допускают экспериментальную проверку:

$$l^{-1} \sim \sqrt{\omega} \sim A.$$

Для полубесконечной пластины при отсутствии закрепления спинов на ее границе, когда $\partial_x \chi|_{x=0} = 0$, энергия модели (5) записывается в виде

$$H = \int_0^\infty (|\partial_x \chi(x, t)|^2 - |\chi(x, t)|^4) dx.$$

Слагаемые в скобках учитывают вклад обменно-дипольных взаимодействий, взаимодействие с постоянным внешним магнитным полем и объемную энергию одноосной магнитной анизотропии [5, 7]. Солитон (59) локализован около границы $x = 0$ пленки, потому что притягивается к своему мнимому изображению $\chi(-x, t)$ в нефизической области $-\infty < x < 0$.

Частичное закрепление спинов на границе пленки и краевое условие $[\partial_x \chi - \beta \chi]|_{x=0} = 0$ связаны с появлением энергии поверхностной магнитной анизотропии в функции Гамильтона системы:

$$H = \int_0^\infty (|\partial_x \chi(x, t)|^2 - |\chi(x, t)|^4) dx + \beta |\chi(x = 0, t)|^2.$$

Когда постоянная β поверхностной анизотропии положительна, солитону энергетически выгоднее отодвинуться от границы образца. В случае $\beta < 0$, наоборот, полная энергия системы снижается, когда солитон плотнее прижимается к границе $x = 0$ пленки. Степень сжатия ядра солитона растет с увеличением $|\beta|$. В общем случае параметр α мультисолитонов соотношением (43) связан с постоянной поверхностной магнитной анизотропии β . Для солитона (58) $M = 1$, а значит, $\beta = -\alpha$. Структура такого солитона вблизи границы $x = 0$ пленки количественно и качественно меняется при изменении величины и знака параметра α (см. рис. 1).

Интересно, что при частичном закреплении спинов на краю пленки (при $|\alpha| < \infty$) частота прецессии солитона (58) всегда больше определенного порогового значения

$$\omega = \nu^2 > \alpha^2 = \beta^2.$$

Для двухсолитонного возбуждения с двумя мнимыми нулями $\lambda = i\nu_{1,2}$ (52) функции $c_{1,2}(t)$ (53) имеют вид

$$c_{1,2}(t) = \pm 2\nu_{1,2} \left[\frac{\nu_1 + \nu_2}{\nu_1 - \nu_2} \right] \left(\frac{\nu_{1,2} - \alpha}{\nu_{1,2} + \alpha} \right)^{1/2} e^{i\varphi_{1,2}(t)},$$

$$\nu_{1,2} > |\alpha|; \quad \varphi_{1,2}(t) = \nu_{1,2}^2 t + \delta_{1,2},$$

где $\delta_{1,2}$ — произвольные вещественные постоянные. Вычисления, аналогичные прежним, дают решение НУШ:

$$\chi(x, t) = -\frac{1}{D_0} [c_1(e^{\nu_2 x} + e^{-\nu_2 x} f(-i\nu_2)) + c_2(e^{\nu_1 x} + e^{-\nu_1 x} f(-i\nu_1))], \quad (60)$$

$$D_0 = e^{(\nu_1 + \nu_2)x} + e^{-(\nu_1 + \nu_2)x} f(-i\nu_1) f(-i\nu_2) + \left(\frac{\nu_1 + \nu_2}{\nu_1 - \nu_2} \right)^2 [e^{-(\nu_1 - \nu_2)x} f(-i\nu_1) + e^{(\nu_1 - \nu_2)x} f(-i\nu_2)] + (c_1^* c_2 + c_1 c_2^*) (\nu_1 + \nu_2)^{-2},$$

где $f(-i\nu) = (\nu - \alpha)/(\nu + \alpha)$.

В данном случае $M = 2$, поэтому поле (60) удовлетворяет краевому условию $\partial_x \ln \chi|_{x=0} = \alpha$ (55). Оно описывает нелинейную суперпозицию двух солитонов (58). Таковые локализованы около границы $x = 0$ образца в слоях толщиной порядка ν_1^{-1} и ν_2^{-1} . Намагниченность в ядрах солитонов прецессирует с частотами ν_1^2 и ν_2^2 вокруг нормали к развитой поверхности пленки.

Из-за взаимодействия солитонов амплитуда каждого из них осциллирует с частотой $|\nu_1^2 - \nu_2^2|$. Если для односолитонного состояния (58) компонента m_3 намагниченности на границе пленки была постоянной, то для двухсолитонного возбуждения она совершает колебания с частотой $|\nu_1^2 - \nu_2^2|$ между двумя предельными значениями (см. рис. 2):

$$|\chi(x = 0, t)|^2 = (\nu_1^2 - \nu_2^2)^2 [\nu_1^2 + \nu_2^2 - 2\alpha^2 - 2\sqrt{(\nu_1^2 - \alpha^2)(\nu_2^2 - \alpha^2)} \times \cos(\varphi_1(t) - \varphi_2(t))]^{-1}, \quad (61)$$

$$|\chi|_{\min}^2 = (\nu_1^2 - \nu_2^2)^2 [(\nu_1^2 - \alpha^2)^{1/2} + (\nu_2^2 - \alpha^2)^{1/2}]^{-2},$$

$$|\chi|_{\max}^2 = (\nu_1^2 - \nu_2^2)^2 [(\nu_1^2 - \alpha^2)^{1/2} - (\nu_2^2 - \alpha^2)^{1/2}]^{-2}.$$

Когда нет закрепления спинов (при $\alpha = 0$), из (61) получаем

$$|\nu_2 - \nu_1| \leq |\chi(x = 0, t)| \leq |\nu_1 + \nu_2|.$$

В общем случае мультисолитоны, параметризуемые разными наборами мнимых нулей (31) коэффициента $\tilde{a}(\lambda)$, описывают серию долгоживущих приграничных колебаний намагниченности с дискретными частотами амплитудной и фазовой модуляции поля $\chi(x, t)$.

Отражение движущихся солитонов от края пластины

Каждая пара комплексно сопряженных нулей функции $\tilde{a}(\lambda)$ (30) параметризует один движущийся частицеподобный объект. На больших расстояниях от края пластины он принимает форму солитона типичного для безграничной среды. Парные взаимодействия солитонов являются упругими: после столкновения у каждого из них изменяются только начальная фаза внутренних колебаний и координата центра. Между тем, около границы пленки из-за взаимодействия с ней ядро движущегося солитона сильно деформируется. Взаимодействие с границей можно формально трактовать как взаимодействие реального солитона с фиктивным солитоном изображения. Поэтому столкновение каждого солитона с краем пленки также оказывается упругим. Поясним утверждение на примере простейшего солитона, который параметризуют два нуля $\lambda = \lambda_0, -\lambda_0^*$ ($\text{Im}\lambda_0 > 0$) коэффициента $\tilde{a}(\lambda)$ (52):

$$\tilde{a}(\lambda) = \frac{(\lambda - \lambda_0)(\lambda + \lambda_0^*)}{(\lambda + \lambda_0)(\lambda - \lambda_0^*)}.$$

Из (53) находим функции $c_{1,2}(t)$:

$$c_1(t) = \frac{2\lambda_0(\lambda_0 - \lambda_0^*)}{(\lambda_0 + \lambda_0^*)} \gamma_0 e^{-i\lambda_0^2 t},$$

$$c_2(t) = \frac{2\lambda_0^*(\lambda_0 - \lambda_0^*)}{(\lambda_0 + \lambda_0^*)\gamma_0^*} f^*(-\lambda_0) e^{-i\lambda_0^{*2} t},$$

где γ_0 — произвольная комплексная постоянная, $f(\lambda) = (\lambda + i\alpha)/(\lambda - i\alpha)$. Формулы (51), (54) определяют солитонное решение модели (5):

$$\chi(x, t) = -\frac{2}{D} \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right) \times$$

$$\times \left[\lambda_0 \gamma_0 e^{-i\lambda_0^2 t} (e^{i\lambda_0^* x} + f^*(-\lambda_0) e^{-i\lambda_0^* x}) + \right.$$

$$\left. + \frac{\lambda_0^* f^*(-\lambda_0)}{\gamma_0^*} e^{-i\lambda_0^{*2} t} (e^{-i\lambda_0 x} + f(-\lambda_0) e^{i\lambda_0 x}) \right], \quad (62)$$

$$D = e^{-ix(\lambda_0 - \lambda_0^*)} + |f(-\lambda_0)|^2 e^{ix(\lambda_0 - \lambda_0^*)} +$$

$$+ \left(\frac{2|\lambda_0|}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right)^2 \times$$

$$\times \left(|\gamma_0|^2 e^{-i(\lambda_0^2 - \lambda_0^{*2})t} + \left| \frac{f(-\lambda_0)}{\gamma_0} \right|^2 e^{i(\lambda_0^2 - \lambda_0^{*2})t} \right) +$$

$$+ \left(\frac{\lambda_0 - \lambda_0^*}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right)^2 \times$$

$$\times \left(f(-\lambda_0) e^{i(\lambda_0 + \lambda_0^*)x} + f^*(-\lambda_0) e^{-i(\lambda_0 + \lambda_0^*)x} \right),$$

которое удовлетворяет краевому условию (55) с $M = 2$:

$$\partial_x \ln \chi|_{x=0} = \alpha = \beta. \quad (63)$$

В справедливости (63) легко убедиться простой проверкой с учетом равенств

$$\partial_x D|_{x=0} = 0, \quad 1 - f(-\lambda_0) = \frac{2i\alpha}{\lambda_0 + i\alpha},$$

$$1 + f(-\lambda_0) = \frac{2\lambda_0}{\lambda_0 + i\alpha}.$$

Формула (62) описывает процесс распространения частицеподобного возбуждения из внутренней части пластины, где $0 < x < \infty$, к границе $x = 0$, его отражение от границы и последующее удаление снова вглубь образца. Покажем, что на больших расстояниях от края пластины возбуждение (62) трансформируется в движущийся прецессионный солитон безграничного образца. Для этого заметим, что характер решения (62) при значениях $x \gg 1$ определяется конкуренцией слагаемых в числителе с экспоненциальными множителями $\exp[\pm u(x + \nu t)/2]$, $\exp[\pm u(x - \nu t)/2]$ и ведущих членов в знаменателе с коэффициентами $e^{\pm ux}$, $e^{\pm u\nu t}$, где $\nu + iu = 2\lambda_0$. Поскольку $\text{Im}\lambda_0 > 0$, параметр u всегда положителен. Примем для определенности, что параметр ν также положителен. Значения u и ν задают соответственно размер $l_0 \sim u^{-1}$ солитона и его скорость. Действительно, при $x \gg 1$ в пределе $t \rightarrow \pm\infty$ в системах отсчета, связанных с солитоном, когда $x \mp \nu t = \text{const}$, его структура описывается выражениями

$$\chi(x, t \rightarrow \pm\infty) \approx$$

$$\approx \text{Im}\lambda_0 \exp \left[i \left(\frac{(u^2 - \nu^2)t}{4} \pm \frac{\nu x}{2} - \frac{\pi}{2} + \varphi_{\pm} \right) \right] \times$$

$$\times \text{ch}^{-1} \left[\frac{u}{2} (x \mp \nu t - x_{\pm}) \right], \quad (64)$$

$$\varphi_+ = \arg(\gamma_0 \lambda_0), \quad \varphi_- = -\arg \left(\frac{\lambda_0 f(-\lambda_0)}{\gamma_0} \right),$$

$$x_+ = \frac{2}{u} \ln \left| \frac{2\lambda_0 \gamma_0}{\lambda_0 + \lambda_0^*} \right|, \quad x_- = \frac{2}{u} \ln \left| \frac{2\lambda_0 f(-\lambda_0)}{(\lambda_0 + \lambda_0^*)\gamma_0} \right|.$$

Формулы (64) определяют простейший солитон безграничного образца [10, 11], движущийся вдоль оси x со скоростью $\pm\nu$. Из (64) следует, что на больших расстояниях от края $x = 0$ пленки единственным результатом взаимодействия солитона с границей оказывается изменение фазы внутренней прецессии и сдвиг центра солитона. В системах отсчета, связанных с солитоном, намагниченность совершает прецессию с частотой $\Omega = (u^2 + \nu^2)/4$ вокруг нормали к плоскости пленки. Изменение начальной фазы прецессии солитона после его отражения от границы имеет вид

$$\varphi_+ - \varphi_- = \arg \left[\lambda_0 \left(\frac{\lambda_0 - i\alpha}{\lambda_0 + i\alpha} \right) \right].$$

Сдвиг фазы зависит от параметра закрепления поверхностных спинов α ($\alpha^2 = \beta^2$), а также от комплексного числа $\lambda_0 = (\nu + iu)/2$, вместо которого можно использовать подходящие наблюдаемые величины, например, ширину u^{-1} и скорость ν солитона или скорость ν солитона и частоту его прецессии Ω . Отсюда следует, что измерение сдвига фазы солитона после его отражения от границы образца дает информацию о параметре α . Это обстоятельство можно использовать для диагностики состояния спинов на краю пленки. В работе [21] теоретически предсказано и экспериментально подтверждено отражение солитона продольной деформации от торца нелинейно-упругого стержня. Подобные процессы характерны и для солитонов в ферромагнитных пленках.

Полному закреплению спинов на краю пленки соответствует условие Дирихле

$$\chi(x = 0, t) = 0, \tag{65}$$

которое получается из общего условия (55) в пределе $|\beta| = |\alpha| \rightarrow \infty$. В этом случае функция $\tilde{a}(\lambda)$ (52) не имеет чисто мнимых нулей, так как их существование противоречит ограничению (36). Отсюда следует, что при полном закреплении спинов отсутствуют долгоживущие локализованные колебания около грани $x = 0$ пластины. В то же время, в пластине допустимо формирование движущихся мультисолитонов. В пределе $\alpha \rightarrow \infty$ функция $f(-\lambda_0) \rightarrow -1$, поэтому из (62) сразу находим аналитическое выра-

жение для простейшего из таких солитонов:

$$\begin{aligned} \chi(x, t) = & -\frac{2i}{D} \left(\frac{u}{\nu} \right) \exp \left(-\frac{i(u^2 - \nu^2)t}{2} \right) \times \\ & \times \left(\lambda_0 \gamma_0 \left[\exp \left(\frac{i\nu x}{2} + \frac{u}{2}(x + \nu t) \right) + \right. \right. \\ & + \theta \exp \left(-\frac{i\nu x}{2} - \frac{u}{2}(x - \nu t) \right) \left. \right] + \\ & + \frac{\lambda_0^*}{\gamma_0^*} \left[\exp \left(\frac{i\nu x}{2} - \frac{u}{2}(x + \nu t) \right) + \right. \\ & \left. \left. + \theta \exp \left(-\frac{i\nu x}{2} + \frac{u}{2}(x - \nu t) \right) \right] \right), \tag{66} \\ D = & 2 \left[\text{ch}(ux) + \left(\frac{2|\lambda_0|}{\nu} \right)^2 \text{ch}(u\nu t + \ln |\gamma_0|^2) - \right. \\ & \left. - \theta \left(\frac{u}{\nu} \right)^2 \cos(\nu x) \right], \end{aligned}$$

где $\nu + iu = 2\lambda_0$, $\theta \equiv -1$. Нетрудно проверить, что (66) удовлетворяет краевому условию (65).

Обратный случай свободных спинов ($\alpha = 0$) описывается тем же выражением (66) при $\theta \equiv 1$. В этом случае $f(-\lambda_0) = 1$. В обоих случаях, $\alpha = 0$ и $\alpha \rightarrow \infty$, после отражения от границы солитон имеет одинаковый сдвиг центра тяжести $\Delta x = x_+ - x_- = 4u^{-1} \ln \gamma_0$ (рис. 3).

5. ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ПЛЕНКЕ

Рассмотренную процедуру можно интерпретировать как нелинейный аналог решения методом Фурье краевой задачи для линейного дифференциального уравнения. Действительно, в малоамплитудном пределе при отсутствии солитонов, когда справедливы соотношения

$$\alpha = \beta, \quad a(\lambda) = \lambda + i\beta, \quad [T_+^{(2)}(x, \lambda)]_2 \approx \exp \left(\frac{i\lambda x}{2} \right),$$

волновое поле $\chi(x, t)$, найденное по формулам (48), (22), имеет вид

$$\begin{aligned} \chi(x, t) \approx & \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu r(\mu, t) e^{i\mu x} = \\ = & \frac{1}{2\pi i} \int_0^{+\infty} d\mu b(\mu, t = 0) e^{-i\mu^2 t} \left[\frac{e^{i\mu x}}{\mu + i\beta} + \frac{e^{-i\mu x}}{\mu - i\beta} \right], \\ & x \geq 0, \tag{67} \end{aligned}$$

и, следовательно, связано с коэффициентом отражения $r(\mu)$ задачи рассеяния стандартным преобразованием Фурье. При переходе к правой части формулы (67) мы учли нечетность функции $b(\lambda)$ (27). Непосредственной проверкой легко убедиться, что формула (67) дает решение линеаризованного уравнения (5) на интервале $0 < x < \infty$ с краевыми условиями (6), (7).

Хорошо известно, что далекие фурье-компоненты функций, не имеющих особенностей на вещественной оси, экспоненциально малы [22]. В данной задаче из-за продолжения поля $\chi(x)$ на всю вещественную ось его производные приобретают скачки в точке $x = 0$. Когда волновое поле $\psi(x)$ или его производные имеют скачки на вещественной оси, экспоненциальная малость его фурье-компонент $r(\mu)$ при $\mu \rightarrow \infty$ превращается в степенную [22]. Указанную закономерность преобразований Фурье наследуют спектральные плотности $b(\mu)$ обратной задачи рассеяния. В этом разделе мы получим степенное разложение для коэффициента $b(\mu)$ при $\mu \rightarrow \infty$. Для построения чисто солитонных возбуждений в полубесконечной пластине отличие функций $b(\mu)$ от тех, что были в безграничной пластине, не существенно, так как для солитонов по определению $b(\mu) \equiv 0$. В то же время, мы покажем, что условие $b(\mu) \equiv 0$ приводит к дополнительным законам сохранения для волнового поля на границе образца, обеспечивающим локализацию солитонных колебаний вблизи края пленки и упругое отражения движущихся солитонов от границы образца.

Получим серию локальных интегралов движения для солитонов и диспергирующих волн в пластине из разложения по степеням λ^{-1} не зависящего от времени функционала $a(\lambda)$. Воспользуемся формулой (41) для $a(\lambda)$, в которую введем представление функции Йоста $T_+(+0, \lambda)$ в виде

$$T_+(+0, \lambda) = (I + W(+0, \lambda)) e^{Z(+0, \lambda)}. \quad (68)$$

Разложение по обратным степеням λ антидиагональной матрицы $W(x, \lambda)$ при $x \geq 0$ получено в [11]:

$$W(x, \lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^n} [\omega_n^*(x)\sigma_+ - \omega_n(x)\sigma_-], \quad x \geq 0. \quad (69)$$

Здесь $\omega_1 = \chi(x)$, следующие коэффициенты определяются рекуррентно:

$$\omega_{n+1}(x) = -i \partial_x \omega_n(x) - \chi^*(x) \sum_{k=1}^{n-1} \omega_k(x) \omega_{n-k}(x),$$

$$n = 1, 2, \dots$$

При $n = 1$ второе слагаемое в правой части равенства отсутствует. Диагональная матрица $Z(+0, \lambda)$ выражается через $\omega_n(x)$:

$$Z(+0, \lambda) = \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^n} \int_0^{\infty} [\chi^*(z) \omega_n(z)(I + \sigma_3) - \chi(z) \omega_n^*(z)(I - \sigma_3)] dz. \quad (70)$$

После простых вычислений находим первые наиболее важные из интегралов движения [16]:

$$\ln \frac{a(\lambda)}{\sqrt{\lambda^2 + \beta^2}} = -\frac{2iN}{\lambda} - \frac{2i}{\lambda^3} H + \dots, \quad (71)$$

где

$$N = \int_0^{\infty} |\partial_x \chi(x, t)|^2 dx - \frac{\beta}{2}$$

— число спиновых отклонений [23, 24], а

$$H = \int_0^{\infty} (|\partial_x \chi(x, t)|^2 - |\chi(x, t)|^4) dx + \beta |\chi(x=0, t)|^2 + \frac{\beta^3}{6}$$

— функция Гамильтона (энергия) магнитных колебаний в пленке.

С другой стороны, ряд по степеням λ^{-1} для функции $a(\lambda)$ сразу следует из (38). Напомним, что $\beta = (-1)^M \alpha$. Сравнение двух разложений для $a(\lambda)/\sqrt{\lambda^2 + \beta^2}$ дает явные формулы для N и H при наличии солитонов и диспергирующих волн в полубесконечной пластине:

$$N = \int_0^{\infty} n(\mu) d\mu + 2 \sum_{k=1}^N \text{Im} \lambda_k + \sum_{s=1}^M \nu_s - \frac{\alpha}{2};$$

$$H = \int_0^{\infty} \mu^2 n(\mu) d\mu + \frac{2}{3} \sum_{k=1}^N \text{Im} \lambda_k^3 - \frac{1}{3} \sum_{s=1}^M \nu_s^3 + \frac{\alpha^3}{6}. \quad (72)$$

Величина

$$n(\mu) = -\frac{1}{2\pi} \ln \left(1 - \frac{|b(\mu)|}{\mu^2 + \alpha^2} \right) > 0$$

имеет смысл плотности спин-волновых мод с волновым числом μ . Дискретные слагаемые в (72) соответствуют аддитивным вкладам в интегралы движения от разных солитонов.

Покажем, что для полубесконечной пластины с краевыми условиями (6), (7), в отличие от случая

неограниченного образца, спектральная плотность спиновых волн $b(\lambda)$ в пределе $\lambda \rightarrow \infty$ имеет не экспоненциальную, а степенную малость. Для этого воспользуемся формулой (42). Вычисления упрощаются, если с помощью соотношения (49) правую часть равенства (42) выразить через те же функции, что были использованы в формуле (41) для коэффициента $a(\lambda)$:

$$b(\lambda) = (\lambda + i\beta)[T_+(+0, \lambda^*)]_{12}^*[T_+(+0, -\lambda^*)]_{22}^* + (\lambda - i\beta)[T_+(+0, \lambda^*)]_{22}^*[T_+(+0, -\lambda^*)]_{12}^*, \quad \lambda \in R. \quad (73)$$

Используя соотношения (68)–(70), (73), находим асимптотическое разложение при $\lambda \gg 1$ для функции $b(\lambda)$:

$$b(\lambda) = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^{2k-1}} (\omega_{2k} + i\beta\omega_{2k-1})|_{x=0} \times \exp\left(2i \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \chi^*(z) \omega_{2n}(z) \lambda^{-2n} dz\right). \quad (74)$$

Первый член ряда имеет вид

$$b(\lambda) = \left[\frac{2i}{\lambda^3} (\partial_x^3 \chi - \beta \partial_x^2 \chi + 4\beta |\chi|^2 \chi)\right]_{x=0} + O\left(\frac{1}{\lambda^5}\right) \times \exp\left(\frac{2}{\lambda^2} \int_0^{\infty} \chi^*(z) \partial_z \chi(z) dz + O\left(\frac{1}{\lambda^4}\right)\right).$$

Разумеется, для чисто солитонных состояний все предэкспоненциальные множители в (74) обращаются в нуль. Для простейшего солитона (58) в справедливости тождества

$$(\partial_x^3 \chi - \beta \partial_x^2 \chi + 4\beta |\chi|^2 \chi)\Big|_{x=0} = 0$$

легко убедиться прямой проверкой.

Таким образом, для мультисолитонов в полубесконечной пластине ($0 \leq x < \infty$) существует серия нетривиальных связей между полем $\chi(x, t)$ и его пространственными производными на границе $x = 0$ образца.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что в полубесконечной пластине при любом локализованном начальном распределении намагниченности кроме серии локальных интегралов движения, каждый из которых

представляет сумму аддитивных вкладов от солитонов и диспергирующих волн, существует серия новых законов сохранения для волнового поля на краю пленки. Последние гарантируют возможность локализации солитоноподобных колебаний намагниченности около границы образца и упругое отражение от нее движущихся солитонов.

Полученные формулы для мультисолитонов могут быть использованы как пробные для аналитического описания солитонных состояний вблизи границ образцов конечных размеров. Они полезны для верификации численных расчетов. Могут стать основой экспериментов по диагностике закрепления спинов на поверхности образца, по измерению сдвига фазы солитонов после их отражения от границы.

В заключение, обсудим условия зарождения солитонов в полубесконечной пленке. Пусть λ , T , A — характерный пространственный, временной масштабы модуляций спиновой волны и их амплитуда соответственно. Поскольку при образовании солитонов имеет место баланс эффектов дисперсии и нелинейности, из размерного уравнения НУШ (1) получаем оценки:

$$\lambda^2 \sim \frac{|\partial_k^2 \omega(k)|}{gA^2}, \quad T \sim \frac{1}{gA^2}.$$

Здесь $\omega(k)$ — зависящая от волнового числа k частота основной гармоники, g — постоянная взаимодействия волн. Напомним, что в области возбуждения солитонов выполняется критерий Лайтхилла (4). Пусть формирование солитонов (на границе или внутри пленки) происходит из импульсов продолжительностью τ_{ext} . Тогда $\lambda \sim c_g \tau_{ext}$, где $c_g = \partial_k \omega(k)$ — групповая скорость спиновых волн, и для пороговой амплитуды накачки, начиная с которой возможно генерирование солитонов, получаем оценку

$$gA^2 \sim |\partial_k^2 \omega(k)| / (c_g \tau_{ext})^2.$$

При этом для возможности образования солитонов огибающей должно выполняться неравенство $\lambda \gg k^{-1}$. Согласно [4, 7], при $\tau_{ext} = 10\text{--}20$ нс в области существования солитонных состояний $k > 10^3\text{--}10^4 \text{ см}^{-1}$. Рассмотрение меньших волновых чисел недопустимо. Дело в том, что закон дисперсии $\omega(k)$ не дифференцируем в точке $k = 0$ и в окрестности этой точки нелинейная динамика магнитной пленки описывается другим уравнением с нелокальным дисперсионным членом [25]. Нелокальная часть магнитостатической дисперсии сглаживает неоднородности распределения намагниченности в пленке.

В результате в длинноволновом пределе отсутствуют экспоненциальные солитоны типичные для локального НУШ. Вместо них формируются новые слаболокализованные обменно-дипольные состояния типа алгебраических солитонов.

Генерирование солитонов, локализованных около края пленки, из импульсов внешнего воздействия происходит пороговым образом по амплитуде накачки. Изменение числа таких солитонов должно приводить к появлению дискретных частот резонансных колебаний намагниченности около края образца, проявляться в характерных частотных и амплитудных модуляциях компоненты намагниченности, перпендикулярной к плоскости пленки.

Финансирование. Работы выполнены в рамках государственного задания министерства науки и высшего образования РФ, тема «Квант» № АААА-А18-118020190095-4.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б.А. Калиникос, Н.Г. Ковшиков, А.Н. Славин, Письма в ЖЭТФ **38**, 343 (1983).
2. Б.А. Калиникос, Н.Г. Ковшиков, А.Н. Славин, ЖЭТФ **94**, 159 (1988).
3. B.A. Kalinikos, N.G. Kovshikov, and A.N. Slavin, Phys. Rev. B. **42**, 8658 (1990).
4. А.Б. Борисов, В.В. Киселев, *Квазиодномерные магнитные солитоны*, Физматлит, Москва (2014).
5. А.К. Звездин, А.Ф. Попков, ЖЭТФ **84**, 606 (1983).
6. R.E. De Wames and T. Wolfram, J. Appl. Phys. **41**, 987 (1970).
7. В.В. Киселев, А.П. Танкеев, А.В. Кобелев, ФММ **82**, 38 (1996).
8. Б.А. Калиникос, Изв. вузов. Физика **25**, 42 (1981).
9. G.V. Whitham, *Linear and nonlinear waves*, John Willey and Sons, inc. (1974).
10. В.Е. Захаров, С.В. Манаков, С.П. Новиков, Л.П. Питаевский, *Теория солитонов: метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
11. Л.Д. Фаддеев, Л.А. Тахтаджян, *Гамильтонов подход в теории солитонов*, Наука, Москва (1986).
12. Н.Н. Ахмедиев, А. Анкевич, *Солитоны: нелинейные импульсы и пучки*, Физматлит, Москва (2003). N. Akhmediev and A. Ankiewicz, *Solitons: Non-linear pulses and beams*, Springer US (1997).
13. Ю.С. Кившарь, Г.П. Агравал, *Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам*, Физматлит, Москва (2005). Y. S. Kivshar and G. P. Agrawal, *Optical Solitons: From fibers to photonic crystals*, Academic Press (2003).
14. Н.Н. Розанов, *Диссипативные оптические солитоны. От микро- к нано- и атто-*, Физматлит, Москва (2011).
15. H. C. Yuen and B. M. Lake, Adv. Appl. Mech. **22**, 67 (1982).
16. П.Н. Бибииков, В.О. Тарасов, ТМФ **79**, 334 (1989).
17. V. O. Tarasov, Inverse Problems **7**, 435 (1991).
18. И.Т. Хабибуллин, ТМФ **86**, 43 (1991).
19. A.S. Fokas, Physica D **35**, 167 (1989).
20. Е.К. Склянин, Функции. ан. прил. **21**, 86 (1987).
21. Г. В. Дрейден, А. В. Порубов, А. М. Самсонов, И. В. Семенова, ЖТФ **71**, 1 (2001).
22. А.Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1979).
23. А.М. Косевич, Е.А. Иванов, А.С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
24. А.М. Kosevich, B.A. Ivanov, and A.S. Kovalev, Phys. Rep. **194**, 117 (1990).
25. V.V. Kiselev and A.P. Tankeyev, J. Phys.: Condens. Matt. **8**, 10219 (1996).

ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ВРЕМЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

С. В. Колесников*, Е. С. Сапронова

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2022 г.,
после переработки 25 апреля 2022 г.
Принята к публикации 17 мая 2022 г.

Перемагничивание атомных цепочек на поверхности металлов исследовано теоретически с помощью разработанного ранее аналитического метода и геодезического метода упругой ленты. Атомные цепочки могут быть разделены на три группы: цепочки с малой, средней и большой шириной доменной стенки. Показано, что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени спонтанного перемагничивания цепочек ФМ \parallel и АФМ \perp и уменьшению времени перемагничивания цепочек ФМ \perp и АФМ \parallel . Для цепочек ФМ \perp и АФМ \perp с доменной стенкой средней ширины учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к появлению энергетического барьера между двумя состояниями доменной стенки, отличающимися направлением вращения магнитных моментов. Перемагничивание атомных цепочек из третьей группы может происходить двумя способами: либо все магнитные моменты переворачиваются одновременно, либо по очереди. Переход от одного режима перемагничивания к другому происходит при критической длине N_0 . При этом влияние диполь-дипольного взаимодействия наиболее существенно при длине цепочки, близкой к N_0 . Численные оценки показали, что в некоторых случаях учет диполь-дипольного взаимодействия может изменить время перемагничивания цепочки на порядок величины.

DOI: 10.31857/S0044451022110116

EDN: KZYENI

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование свойств атомных цепочек и нанопроводов имеет огромное значение для развития спинтроники [1], квантовых компьютеров [2], квантовой передачи информации [3, 4] и многих других областей современной физики [5–7]. Возможность использования атомных цепочек в качестве бита информации появилась после открытия «гигантской» энергии магнитной анизотропии (ЭМА) атомов Со в ферромагнитных цепочках на поверхности Pt(997) [8, 9]. Для хранения информации могут быть также использованы и антиферромагнитные цепочки из атомов Fe на поверхности Cu₂N/Cu(001) [10, 11].

Магнитные свойства атомных цепочек можно удовлетворительно описать в рамках классической модели Гейзенберга с одноосной магнитной анизотропией [12]. Гамильтониан такой модели имеет вид

$$H = -J \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e})^2, \quad (1)$$

где \mathbf{s}_i и \mathbf{e} — соответственно единичные векторы магнитных моментов атомов и оси легкого намагничивания, K — энергия магнитной анизотропии, J — обменный интеграл. Для ферромагнитной цепочки $J > 0$, а для антиферромагнитной $J < 0$. Параметры гамильтониана (1) могут быть найдены экспериментально или вычислены из первых принципов, например, в рамках теории функционала плотности [13] или методом гриновских функций Корринги–Кона–Ростокера [14].

Кратко обсудим вопрос о применимости классической модели. Во-первых, в атомных цепочках конечной длины возможны квантовые осцилляции между основным и первым возбужденным состоя-

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

ниями. Однако на поверхности металла эти осцилляции подавляются за счет взаимодействия цепочки с электронным газом подложки [12], и их можно не учитывать при температуре выше нескольких милликельвинов. Учет вероятности туннелирования при вычислении частот переворота магнитных моментов в квазиклассическом приближении [15] показывает, что этим эффектом также можно пренебречь при температурах выше одного кельвина [16, 17]. Таким образом, при температуре выше 1 К мы можем описывать магнитный момент атома с помощью классического вектора. Более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в обзорной статье [6].

Для исследования коллективных магнитных свойств атомной цепочки можно решать уравнение Ландау — Лифшица — Гильберта [18, 19] или моделировать ее свойства кинетическим методом Монте-Карло (КММК) [20]. Например, простейшая КММК-модель [21], предполагающая, что магнитные моменты всех атомов параллельны оси легкой намагниченности, позволяет вычислять критическую температуру, среднее время спонтанного перемагничивания и коэрцитивную силу ферромагнитных цепочек [17, 22–24]. Эта модель также может быть использована для исследования магнитных свойств антиферромагнитных цепочек [25, 26]. Однако предположение о коллинеарности магнитных моментов может быть весьма грубым. Хорошо известно, что метастабильные состояния ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек могут быть неколлинеарными [27–29]. Недавно была предложена усовершенствованная КММК-модель [30], позволяющая учитывать неколлинеарность метастабильных состояний при перемагничивании. При этом было показано, что при условии $|J| \gtrsim K$ результаты, полученные в рамках коллинеарной и неколлинеарной КММК-моделей, могут существенно различаться.

Важно отметить, что КММК является статистическим методом, а следовательно, его использование сопряжено с долгими и ресурсозатратными компьютерными вычислениями. К счастью, оказывается возможным построить простой аналитический метод [31–34], позволяющий вычислять средние времена спонтанного и вынужденного перемагничивания атомных цепочек, а также строить кривые намагничивания для ферромагнитных цепочек. Использование аналитического метода позволяет легко оценить возможные перспективы технического применения тех или иных атомных цепочек [35]. При этом результаты аналитических вычислений находятся

в превосходном количественном согласии с результатами КММК-моделирования в случае как коллинеарной, так и неколлинеарной моделей [30].

В данной работе мы обсудим влияние диполь-дипольного взаимодействия между атомами цепочки на время ее спонтанного перемагничивания. Мы будем работать в рамках неколлинеарной модели [30], используя при этом разработанный ранее аналитический метод [31–34].

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Кратко опишем основные идеи, лежащие в основе аналитического метода [31–34] вычисления времени перемагничивания атомной цепочки конечной длины. Мы рассматриваем атомные цепочки, основное состояние которых является коллинеарным (ферромагнитным или антиферромагнитным), а метастабильные (возбужденные) состояния цепочки могут быть неколлинеарными. Метастабильным состоянием с наименьшей энергией является состояние атомной цепочки с одной доменной стенкой. Таким образом, можно предположить, что перемагничивание достаточно короткой атомной цепочки происходит за счет образования одной доменной стенки и ее блуждания вдоль цепочки. В простейшем случае можно считать, что случайное блуждание доменной стенки характеризуется тремя частотами: частотой ν_1 появления доменной стенки на краю цепочки, частотой ν_2 ее исчезновения на краю цепочки и частотой ν_3 перехода доменной стенки внутри цепочки из одного метастабильного положения в соседнее. Тогда среднее время τ спонтанного перемагничивания атомной цепочки будет равно среднему времени блуждания доменной стенки внутри цепочки [31]:

$$\tau = \frac{1}{2b} \left\{ \frac{b}{\nu_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2b)}{1-b} \right] + \frac{1}{\nu_1} [N(1-b) - 2(1-2b)] \right\}, \quad (2)$$

где $b = \nu_3/(\nu_2 + \nu_3)$, N — число атомов в цепочке. Формула (2) справедлива как в случае ферромагнитных, так и антиферромагнитных цепочек [32]. Она также допускает обобщение на случай двойных атомных цепочек [33].

Необходимо отметить, что при выводе формулы (2) предполагается, что среднее время блуждания доменной стенки внутри цепочки не должно превышать среднего времени образования доменной

стенки на краю цепочки. Из равенства этих времен легко получить условие [31]

$$\frac{(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)(\nu_2 + \nu_3)}{\nu_1\nu_2} = \left(\frac{N}{2} - 1\right)^2. \quad (3)$$

Условие (3) позволяет найти верхние пределы применимости формулы (2): либо максимальную температуру T_{max} для цепочки фиксированной длины, либо максимальную длину цепочки N_{max} при фиксированной температуре. Важно подчеркнуть, что температура T_{max} ниже критической температуры фазового перехода в парамагнитное состояние.

В работе [30] было показано, что формула (2) может быть успешно использована и в рамках неколлинеарной модели. При этом число атомов N должно быть заменено на $N_{eff} \leq N$, где $N_{eff} - 1$ — число метастабильных положений доменной стенки в цепочке. Частоты ν_i ($i = 1, 2, 3$) вычисляются по формуле Арренюса:

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right), \quad (4)$$

где T — температура системы, k_B — постоянная Больцмана, ΔE_i — энергетический барьер между двумя состояниями атомной цепочки, $\nu_0 = 10^9$ Гц [8] — частотный префактор. Энергетические барьеры ΔE_i вычисляются с помощью геодезического метода упругой ленты (geodesic nudged elastic band, GNEB) [36]. Поиск метастабильных состояний атомной цепочки может быть осуществлен методами, описанными в работе [30] или в работах [28, 29].

Для учета диполь-дипольного взаимодействия необходимо добавить к гамильтониану (1) следующее слагаемое:

$$H_{dip} = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \sum_{i>j} \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) r_{ij}^2 - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}, \quad (5)$$

где $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ — радиус-вектор, соединяющий i -й и j -й атомы, μ — магнитный момент, который мы считаем одинаковым для всех атомов, $\mu_0/4\pi = 10^{-7}$ Гн/м. Если направить ось z вдоль атомной цепочки, то слагаемое H_{dip} может быть записано в виде

$$H_{dip} = A \left(\frac{\mu}{\mu_B}\right)^2 \left(\frac{1\text{Å}}{a}\right)^3 \sum_{i>j} \frac{s_x^i s_x^j + s_y^i s_y^j - 2s_z^i s_z^j}{(n_i - n_j)^3}, \quad (6)$$

где a — расстояние между ближайшими атомами в цепочке, n_i — номер i -го атома, μ_B — магнетон Бора, $A = 5.37 \cdot 10^{-5}$ эВ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Учет неколлинеарности магнитных моментов и диполь-дипольного взаимодействия между ними может существенно повлиять на оценку времени спонтанного перемагничивания магнитных цепочек. Ниже мы сначала обсудим некоторые закономерности общего характера, а затем рассмотрим несколько конкретных примеров.

3.1. Закономерности общего характера

Как известно [37, 38], полуширина доменной стенки δN в модели без диполь-дипольного взаимодействия зависит только от отношения констант $|J|$ и K : $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$. Рассмотрим сначала предельный случай $K/|J| \gg 1$. В этом случае шириной доменной стенки можно пренебречь, а энергетические барьеры для переворота магнитных моментов вычислять по формуле [21]

$$\Delta E_i = \frac{(2K + h_i)^2}{4K}, \quad (7)$$

где $h_i = J(\mathbf{s}_i \cdot (\mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{s}_{i-1}))$. В рамках этой модели легко учесть вклад диполь-дипольного взаимодействия. При этом надо различать следующие четыре случая: ферромагнитная/антиферромагнитная атомная цепочка может быть параллельна (ФМ \parallel /АФМ \parallel), либо перпендикулярна (ФМ \perp /АФМ \perp) оси легкого намагничивания. Рассмотрим, например, образование доменной стенки на краю цепочки в случае ФМ \parallel . Пусть в начальном состоянии все магнитные моменты направлены по оси z . Тогда, согласно выражению (6), крайний атом цепочки находится во внешнем магнитном поле

$$\mathbf{B} = \mathbf{e}_z \frac{2\mu A}{a^3} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{n^3}, \quad (8)$$

где магнитный момент μ измеряется в магнетонах Бора, a — в ангстремах. Для достаточно длинной цепочки можно заменить $N - 1$ на бесконечность, тогда $\sum_n 1/n^3 = \zeta(3) \approx 1.202$. И для энергетического барьера ΔE_1 получим выражение (7) с $h_1 = J + 2.404A\mu^2/a^3$. Результаты аналогичных вычислений величин h_1 и h_2 приведены в табл. 1. Кроме того, при вычислении энергетического барьера для сдвига доменной стенки вдоль цепочки во всех четырех случаях получаем $h_3 = 0$ ($\Delta E_3 = K$), если доменная стенка находится посередине цепочки.

Из табл. 1 и формулы (2) видно, что диполь-дипольное взаимодействие в модели коллинеарного

Таблица 1. Выражения для параметров h_1 и h_2 , необходимых для вычисления энергетических барьеров для образования и исчезновения доменной стенки на краю атомной цепочки; μ измеряется в магнетонах Бора, a — в ангстремах

Тип	h_1	h_2
ФМ	$J + 2.404A\mu^2/a^3$	$-J - 2.404A\mu^2/a^3$
ФМ⊥	$J - 1.202A\mu^2/a^3$	$-J + 1.202A\mu^2/a^3$
АФМ	$ J - 1.803A\mu^2/a^3$	$- J + 1.803A\mu^2/a^3$
АФМ⊥	$ J + 0.902A\mu^2/a^3$	$- J - 0.902A\mu^2/a^3$

магнетизма приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочек ФМ|| и АФМ⊥ и уменьшению времени τ цепочек ФМ⊥ и АФМ||.

В области параметров $2/3 < K/|J| < C_1$, где $C_1 \gtrsim 1$, доменная стенка имеет полуширину менее одного межатомного расстояния [38], и магнитные моменты в доменной стенке остаются почти коллинеарными. В этом случае для вычисления времени спонтанного перемагничивания можно использовать формулу (2), не внося в нее никаких изменений [30], однако энергетические барьеры теперь должны вычисляться не по формуле (7), а с помощью метода GNEB [36]. Отметим, что в этой области параметров обычно выполняется условие $\nu_1 \ll \nu_3 \ll \nu_2$, и формулу (2) можно приближенно записать в виде

$$\tau \approx \frac{N - 2}{2} \frac{\nu_2}{\nu_1 \nu_3}. \tag{9}$$

Наиболее интересной представляется область параметров $C_2 < K/|J| < 2/3$, где $C_2 \simeq 0.2$. В этой области параметров доменная стенка имеет ширину порядка нескольких атомов. Барьеры ΔE_2 и ΔE_3 экспоненциально быстро убывают при уменьшении параметра $K/|J|$, что соответствует результатам работы [38] для бесконечно длинной цепочки. При этом первое метастабильное положение доменной стенки оказывается между i_0 -м и $(i_0 + 1)$ -м атомом с края, где $i_0 \geq 1$. Получается, что число метастабильных положений доменной стенки в атомной цепочке равно не $N - 1$, а $N_{eff} - 1$, где $N_{eff} = N + 2 - 2i_0$. Для оценки среднего времени спонтанного перемагничивания цепочки можно по-прежнему использовать формулу (2), однако N необходимо заменить на N_{eff} . При этом обычно выполняются соотношения $\nu_1 \ll \nu_2 \approx \nu_3 \approx \nu_0$, и формула (9) приобретает совсем простой вид

$$\tau \approx (N_{eff} - 2)/2\nu_1.$$

В случае, когда ось легкого намагничивания (обозначим ее x) перпендикулярна атомной цепочке (расположена вдоль оси z), возможны различные конфигурации доменных стенок. В неелевской доменной стенке магнитные моменты лежат в плоскости xz , а в блоховской — в плоскости xy . В отсутствие диполь-дипольного взаимодействия энергии неелевской и блоховской доменных стенок (а также всех промежуточных вариантов) одинаковы. Диполь-дипольное взаимодействие приводит к тому, что в случае ФМ⊥ энергетически более выгодной оказывается неелевская стенка, а в случае АФМ⊥ — блоховская. В результате два отличающиеся друг от друга направлением вращения магнитных моментов метастабильные состояния оказываются разделены энергетическим барьером ΔE_4 . Отметим, что в рамках аналитической модели [31–34] величина барьера ΔE_4 не влияет на время перемагничивания атомной цепочки.

Наконец, в области параметров $K/|J| \ll 1$ либо энергетический барьер ΔE_3 пренебрежимо мал, либо формирование доменной стенки вообще не происходит. В этом случае аналитическая модель [31–34], конечно же, неверна. У атомной цепочки нет метастабильных состояний, и время перемагничивания цепочки можно оценить по формуле

$$\tau = \frac{1}{2\nu_0} \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \tag{10}$$

где ΔE — энергетический барьер перемагничивания всей атомной цепочки как единого целого. При этом перемагничивание цепочки может происходить двумя способами. Если длина цепочки N меньше некоторой критической длины N_0 , то все магнитные моменты переворачиваются одновременно и $\Delta E = KN$. Если $N \geq N_0$, то магнитные моменты переворачиваются по очереди, т. е. происходит формирование промежуточного неустойчивого состояния в виде доменной стенки. В этом случае энергетический барьер ΔE может быть вычислен с помощью метода GNEB [36].

Для оценки критической длины N_0 по порядку величины можно воспользоваться следующими соображениями. Как известно [37, 38], при $K/|J| \ll 1$ энергия доменной стенки в бесконечно длинной цепочке равна $\sqrt{8K|J|}$. Приравнявая эту величину к KN_0 , получим

$$N_0 = \sqrt{\frac{8|J|}{K}}. \tag{11}$$

3.2. Численные оценки

Рассмотрим цепочки из атомов Fe, Co и Mn на поверхностях различных металлов. Величины обменных интегралов J , ЭМА K и магнитных моментов μ , взятые из работ [8, 10, 11, 25, 39, 40], приведены в табл. 2 и 3. Данные в таблицах упорядочены по возрастанию величины $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$, которую можно считать грубой оценкой полуширины доменной стенки. В этой же последовательности эти цепочки обсуждаются ниже.

3.2.1. Малая ширина доменной стенки

В качестве первого примера рассмотрим антиферромагнитную цепочку Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$. Данная система привлекла к себе огромное внимание исследователей в связи с возможностью создания антиферромагнитных битов информации размером около десяти атомов [10]. Ось легкого намагничивания атомов совпадает с направлением вдоль цепочки (АФМ||). Расстояние между атомами Fe составляет $a = 7.23 \text{ \AA}$. Для численных оценок выбраны параметры J , K , μ , приведенные в табл. 2. Отношение $K/|J|$ равно 2.3, поэтому доменная стенка имеет полуширину менее одного межатомного расстояния ($\delta N = 0.47$), и магнитные моменты в доменной стенке остаются почти коллинеарными. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, необходимые для оценки времени спонтанного перемагничивания, также приведены в табл. 2. Вычисления проводились для цепочки из $N = 20$ атомов. Для формирования доменной стенки на краю цепочки достаточно переворота одного магнитного момента, поэтому $N_{\text{eff}} = N$. Вследствие достаточно большого межатомного расстояния a учет диполь-дипольного взаимодействия не оказывает существенного влияния на эти барьеры. Приведем здесь разности энергетических барьеров $\delta E_i = \Delta E_i^{\text{dip}} - \Delta E_i$, вычисленные с учетом и без учета диполь-дипольного взаимодействия: $\delta E_1 = -2.65 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_2 = 1.31 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_3 = -4.83 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}$. Для сравнения, аналогичные величины, вычисленные согласно оценочным формулам из табл. 1, равны $\delta E_1 = -2.41 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_2 = 1.55 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_3 = 0$. Видно, что учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к изменению энергетических барьеров на величину порядка 10^{-6} эВ , что на два порядка меньше, чем изменение энергетических барьеров в этой же системе при учете неколлинеарности магнитных моментов [30]. Таким образом, даже в случае почти коллинеарного магнетизма учет диполь-дипольного

взаимодействия без учета эффекта неколлинеарности не имеет смысла. С другой стороны, оценочные формулы из табл. 1 позволяют правильно оценить вклад диполь-дипольного взаимодействия по порядку величины.

На рис. 1а показана зависимость времени спонтанного перемагничивания цепочки из 20 атомов Fe, вычисленная по формуле (2) в температурном интервале от 2 К до $T_{\text{max}} = 7.5 \text{ К}$. На рис. 1б в том же температурном интервале показано отношение τ_{dip}/τ времен перемагничивания, вычисленных с учетом и без учета диполь-дипольного взаимодействия. Отношение τ_{dip}/τ монотонно растет от значения 0.97 при температуре 2 К и стремится к 1 при увеличении температуры.

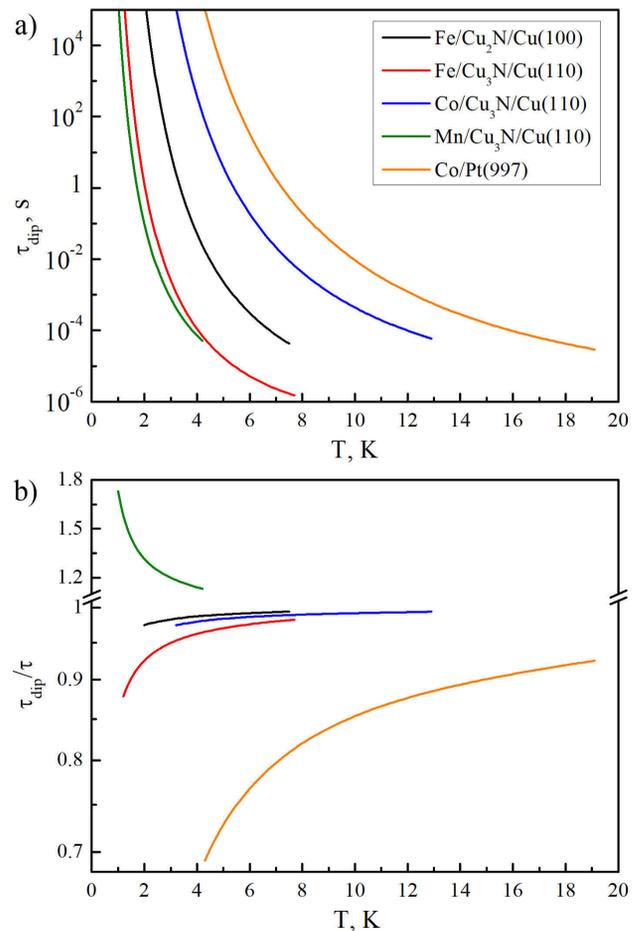


Рис. 1. (В цвете онлайн) а) Зависимости времени спонтанного перемагничивания атомных цепочек τ_{dip} от температуры. б) Отношения времен перемагничивания, вычисленных с учетом (τ_{dip}) и без учета (τ) диполь-дипольного взаимодействия

Далее рассмотрим ферромагнитную цепочку из атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$. Вы-

Таблица 2. Характеристики атомных цепочек Fe, Co и Mn на металлических поверхностях. Обменные интегралы J , ЭМА K и магнитные моменты μ атомов взяты из работ [8, 10, 11, 25]. Полуширина доменной стенки вычислена по формуле $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$, а энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$ — с помощью метода GNEB при учете диполь-дипольного взаимодействия

Система	Тип	J , мэВ	K , мэВ	μ/μ_B	δN	ΔE_1 , мэВ	ΔE_2 , мэВ	ΔE_3 , мэВ
Fe/Cu ₂ N/Cu(001)	АФМ	-1.3	3.0	2.78	0.47	4.320	1.724	2.762
Fe/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ⊥	1.25	1.21	2.78	0.72	2.581	0.083	0.739
Co/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ⊥	3.81	2.3	1.67	0.91	7.502	0.059	0.396
Mn/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ	1.25	0.67	3.78	0.96	2.484	0.055	0.074
Co/Pt(997)	ФМ⊥	7.5	2.0	2.4	1.37	10.545	0.003	0.006

Таблица 3. Характеристики атомных цепочек Fe, Co на поверхности Cu(775). Обменные интегралы J , ЭМА K и магнитные моменты μ атомов взяты из работ [7, 39, 40]. Полуширина доменной стенки вычислена по формуле $\delta N = \sqrt{J/2K}$, энергия доменной стенки в бесконечно длинной цепочке — по формуле $\Delta E_\infty = \sqrt{8KJ}$, критические длины цепочек N_0 и N_0^{dip} — с помощью метода GNEB

Система	Тип	J , мэВ	K , мэВ	μ/μ_B	δN	ΔE_∞ , мэВ	N_0	N_0^{dip}
Co/Cu(775)	ФМ	72.5	2.33	1.66	3.94	36.76	13	13
Fe/Cu(775)	ФМ	75.0	0.72	2.88	7.21	20.78	23	22

числения методом функционала плотности [25] показали, что ось легкого намагничивания атомов перпендикулярна цепочке (ФМ⊥). Параметры J , K , μ приведены в табл. 2. Отношение K/J близко к 1, поэтому доменная стенка в данном случае оказывается несколько шире ($\delta N = 0.72$), чем в предыдущей системе. Тем не менее для формирования доменной стенки на краю цепочки по-прежнему достаточно переворота одного магнитного момента ($N_{eff} = N$), поэтому система Fe/Cu₃N/Cu(110) в целом очень похожа на рассмотренную выше систему Fe/Cu₂N/Cu(001). Однако атомы Fe находятся на меньшем расстоянии $a = 5.11 \text{ \AA}$ друг от друга, следовательно, возрастает и роль диполь-дипольного взаимодействия. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочки из 20 атомов, приведены в табл. 2. Зависимость времени спонтанного перемагничивания цепочки из 20 атомов Fe в температурном интервале от 1.2 К до $T_{max} = 7.7 \text{ К}$ приведена на рис. 1а, а на рис. 1б в том же температурном интервале показано отношение τ_{dip}/τ . Видно, что величина τ_{dip}/τ изменяется от 0.88 до 0.98.

3.2.2. Средняя ширина доменной стенки

Рассмотрим ферромагнитные цепочки из атомов Co и Mn на поверхности Cu₃N/Cu(110). Парамет-

ры J , K , μ для этих систем вычислены методом функционала плотности [25] и приведены в табл. 2. Расстояние между атомами в цепочке такое же, как в системе Fe/Cu₃N/Cu(110), т. е. $a = 5.11 \text{ \AA}$. Ось легкого намагничивания атомов Co перпендикулярна цепочке (ФМ⊥), а атомов Mn — параллельна цепочке (ФМ||). Отношение K/J равно 0.6 для цепочек из атомов Co и 0.54 для цепочек из атомов Mn. Увеличение ширины доменной стенки приводит к тому, что для формирования доменной стенки на краю цепочки не достаточно переворота одного магнитного момента: первому метастабильному состоянию соответствует переворот двух (трех) магнитных моментов атомов Co (Mn). В результате число метастабильных положений доменной стенки внутри цепочки оказывается равным $N_{eff} - 1$, где $N_{eff} = N - 2$ для цепочки из атомов Co и $N_{eff} = N - 4$ для цепочки из атомов Mn. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочек из 100 атомов Co и Mn, приведены в табл. 2. Зависимости времени τ_{dip} спонтанного перемагничивания и отношения τ_{dip}/τ от температуры для этих цепочек показаны на рис. 1. Температурные интервалы выбраны следующим образом: от 3.2 К до $T_{max} = 12.9 \text{ К}$ для Co и от 1 К до $T_{max} = 4.2 \text{ К}$ для Mn. На рис. 1б видно, что величина τ_{dip}/τ изменяется от 0.97 до 0.99 для Co и от 1.73 до 1.13 для Mn. Отметим, что данный результат согласуется с выводом, сделанным на основе

анализа результатов, приведенных в табл. 1. Действительно, диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочки ФМ \parallel и уменьшению времени τ цепочки ФМ \perp .

Для системы Co/Cu₃N/Cu(110) имеет смысл вычисление энергетического барьера ΔE_4 между двумя неелевскими доменными стенками, отличающимися друг от друга направлением вращения магнитных моментов. В данном случае величина $\Delta E_4 = 1.87 \cdot 10^{-6}$ эВ оказывается на два порядка меньше барьера ΔE_3 для перемещения доменной стенки вдоль атомной цепочки.

Наконец, рассмотрим ферромагнитную цепочку из атомов Co на поверхности Pt(997). На сегодняшний день эту систему можно считать наиболее хорошо экспериментально изученным примером одномерного ферромагнетизма [5, 6]. Расстояние между атомами в цепочке $a = 2.78$ Å, параметры J , K , μ , взятые из работы [8], приведены в табл. 2. Ось легкого намагничивания направлена перпендикулярна цепочке (ФМ \perp). Отношение $K/J = 0.27$ достаточно мало, поэтому полуширина доменной стенки превышает один атом ($\delta N = 1.37$). Это приводит к тому, что первому метастабильному состоянию доменной стенки на краю цепочки соответствует переворот сразу пяти магнитных моментов атомов Co, таким образом, $N_{eff} = N - 10$. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочки из 100 атомов Co, приведены в табл. 2.

Следует обратить особое внимание на малую величину барьера ΔE_3 , она оказывается на порядок меньше $k_B T$ даже при температуре 1 К. Строго говоря, это означает, что предположение о прыжковом механизме перемещения доменной стенки между соседними метастабильными положениями в данном случае неверно. Поэтому время τ спонтанного перемагничивания, вычисленное по формуле (2), является лишь оценкой сверху. В качестве оценки снизу может быть взята формула (10) при $\Delta E = \Delta E_1$. Вообще данный случай является промежуточным между системами с узкой доменной стенкой, рассмотренными выше, и системами с широкой доменной стенкой, которым посвящен следующий раздел статьи. Итак, для системы Co/Pt(997) можно утверждать, что время спонтанного перемагничивания равно $\tau = N^*/2\nu_1$, где $1 < N^* < N_{eff} - 2$. Из общих соображений можно также утверждать, что величина N^* монотонно убывает с увеличением температуры. Тем не менее основная зависимость от температуры определяется множителем $1/\nu_1$, поэтому для оценки τ по порядку величины мы можем про-

должать пользоваться формулой (2). Зависимости времени τ_{dip} и отношения τ_{dip}/τ в температурном интервале от 4.3 К до $T_{max} = 19.1$ К показаны на рис. 1. Видно, что отношение τ_{dip}/τ изменяется от 0.69 до 0.93. Таким образом, различие величин τ_{dip} и τ может достигать 30%. Отметим, что энергетический барьер ΔE_4 между двумя неелевскими доменными стенками, отличающимися друг от друга направлением вращения магнитных моментов, оказывается равным $1.12 \cdot 10^{-4}$ эВ, что на два порядка превышает величину ΔE_3 . Поэтому вероятность изменения типа доменной стенки во время перемагничивания крайне мала.

В заключение этого раздела сделаем несколько замечаний, относящихся ко всем рассмотренным выше системам. Во-первых, как видно из приближенной формулы (9), время спонтанного перемагничивания цепочки прямо пропорционально величине $N_{eff} - 2$. Поэтому зависимости, приведенные на рис. 1а, легко масштабируются при изменении длины цепочки, а зависимости, приведенные на рис. 1б, вообще не меняются. Во-вторых, минимальная температура при построении графиков на рис. 1 выбиралась так, чтобы соответствующее время τ было порядка 10^5 с. При таких временах τ атомная цепочка может считаться стабильным битом информации. В-третьих, из табл. 2 видно, что величина энергетического барьера ΔE_3 быстро уменьшается при уменьшении параметра $K/|J|$, что находится в согласии с работой [38]. При дальнейшем уменьшении параметра $K/|J|$ аналитический метод [31–34] становится неприменимым.

3.2.3. Большая ширина доменной стенки

Рассмотрим ферромагнитные цепочки из атомов Co и Fe на поверхности Cu(775). Для обеих систем ось легкого намагничивания направлена вдоль цепочки [40] (ФМ \parallel). Параметры J , K , μ , вычисленные методом функционала плотности [7, 39, 40], приведены в табл. 3. Отношение K/J равно $3.2 \cdot 10^{-2}$ для системы Co/Cu(775) и $9.6 \cdot 10^{-3}$ для системы Fe/Cu(775), что соответствует полуширине δN доменной стенки 3.94 и 7.21 атомов. Для столь широких доменных стенок энергетический барьер ΔE_3 пренебрежимо мал [38]. Поэтому для вычисления времени спонтанного перемагничивания цепочек используется формула (10). Отметим, что атомы Co и Fe в рассматриваемых цепочках находятся на небольшом расстоянии $a = 2.56$ Å друг от друга, что увеличивает роль диполь-дипольного взаимодействия.

Как видно из рис. 2а, без учета диполь-дипольного взаимодействия зависимость энергетического барьера ΔE перемагничивания атомной цепочки от ее длины стремится к энергии $\Delta E_\infty = \sqrt{8KJ}$ формирования доменной стенки в бесконечно длинной цепочке. Учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к тому, что предельное значение ΔE_∞^{dip} превышает величину $\sqrt{8KJ}$ на $2.55 \cdot 10^{-4}$ эВ для цепочки Co/Cu(775) и на $1.34 \cdot 10^{-3}$ эВ для цепочки Fe/Cu(775). Отметим, что данный результат находится в согласии с выводом (см. разд. 3.1), что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени спонтанного перемагничивания цепочек ФМ||. Отношение τ_{dip}/τ показано на рис. 2б. Видно, что для длинных цепочек при температуре 10 К оно стремится к 1.34 для цепочки Co/Cu(775) и к 4.76 для цепочки Fe/Cu(775).

Отдельного обсуждения заслуживает переход от режима, в котором все магнитные моменты переворачиваются одновременно и $\Delta E = KN$ (штриховые линии на рис. 2а), к режиму, в котором происходит формирование промежуточного неустойчивого состояния в виде доменной стенки. Вычисленная по формуле (11) критическая длина цепочки составляет 16 атомов для цепочки Co/Cu(775) и 29 атомов для цепочки Fe/Cu(775). Для цепочки конечной длины энергия формирования доменной стенки ΔE оказывается меньше, чем ΔE_∞ . Поэтому и критическая длина цепочки N_0 оказывается несколько ниже (см. табл. 3 и рис. 2а). Отметим, что в случае системы Co/Cu(775) критическая длина оказывается одинаковой ($N_0 = 13$) как с учетом, так и без учета диполь-дипольного взаимодействия. В случае системы Fe/Cu(775) учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к уменьшению критической длины цепочки с 23 атомов до 22. Как видно на рис. 2б, диполь-дипольное взаимодействие оказывает максимальное влияние на время спонтанного перемагничивания атомной цепочки, если ее длина близка к критической. Отношение τ_{dip}/τ при температуре 10 К достигает максимального значения 1.48 для цепочки из 12 атомов Co и значения 9.56 для цепочки из 22 атомов Fe.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итоги работы, отметим, что магнитные атомные цепочки на поверхности металлов могут быть разделены на три группы: цепочки с малой, средней и большой шириной доменной стенки.

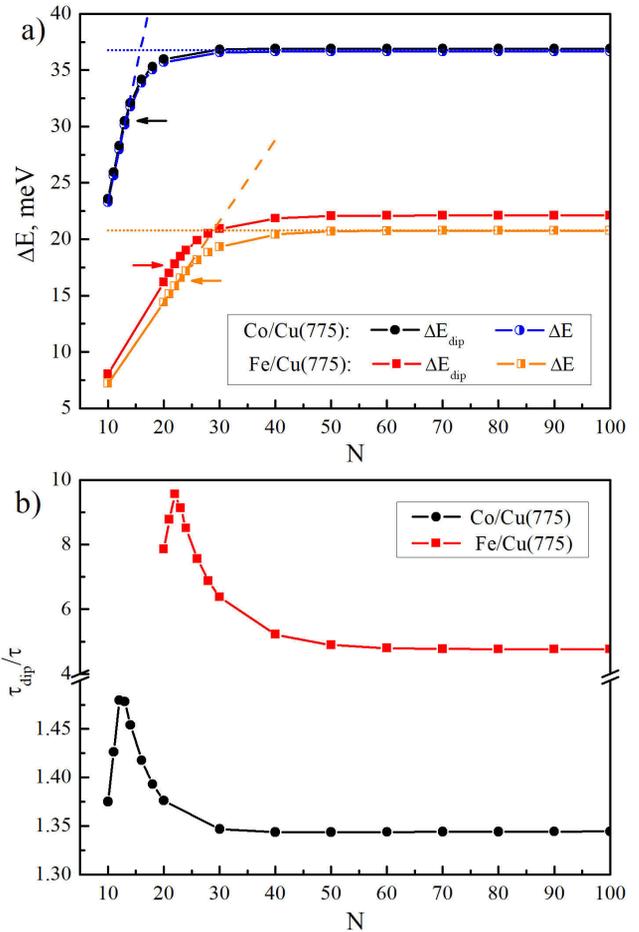


Рис. 2. (В цвете онлайн) а) Зависимости энергетического барьера ΔE для перемагничивания атомной цепочки от ее длины N . Штриховой линией показана величина KN , пунктирной — величина $\sqrt{8KJ}$, стрелками отмечены точки, соответствующие критической длине N_0 . б) Отношения времен перемагничивания при температуре 10 К, вычисленных с учетом (τ_{dip}) и без учета (τ) диполь-дипольного взаимодействия

При вычислении времени спонтанного перемагничивания цепочек из двух первых групп можно использовать аналитический метод [31–34], а время спонтанного перемагничивания цепочек из третьей группы может быть оценено по формуле (10). При этом энергетические барьеры для переворота магнитных моментов должны вычисляться в рамках неколлинеарной модели. Это можно сделать, например, с помощью метода GNEB.

На основе простой коллинеарной модели [21] можно сделать вывод о том, что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочек ФМ|| и АФМ \perp и уменьшению времени τ цепочек ФМ \perp и АФМ||. Этот результат остается

верным и в неколлинеарной модели даже для атомных цепочек с доменной стенкой большой ширины.

Для цепочек ФМ \perp и АФМ \perp с доменной стенкой средней ширины учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к появлению энергетического барьера между двумя состояниями доменной стенки, различающимися направлением вращения магнитных моментов. Несмотря на то, что этот барьер не оказывает влияния на время спонтанного перемагничивания цепочки, он может быть существенен для вычисления других физических величин, например, критической температуры.

Перемагничивание атомных цепочек из третьей группы может происходить двумя способами: либо все магнитные моменты переворачиваются одновременно, либо по очереди. Переход от одного режима перемагничивания к другому происходит при критической длине N_0 . Важно отметить, что влияние диполь-дипольного взаимодействия на время τ наиболее существенно при длине цепочки, близкой к N_0 .

Численные оценки влияния диполь-дипольного взаимодействия на время спонтанного перемагничивания показали, что в некоторых случаях отношение τ_{dip}/τ может достигать 10. Таким образом, диполь-дипольное взаимодействие может играть существенную роль в динамике перемагничивания атомных цепочек конечной длины на металлических поверхностях.

Благодарности. При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант No 21-72-20034). Один из авторов (Е. С. С.) является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
2. N. D. Mermin, *Quantum Computer Science: an Introduction*, Cambridge Univ. Press (2007).
3. S. Bose, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 207901 (2003).
4. H. Verma, L. Chotorlishvili, J. Berakdar, and S. K. Mishra, *Eur. Phys. Lett.* **119**, 30001 (2017).
5. D. J. Choi, N. Lorente, J. Wiebe, K. von Bergmann, A. F. Otte, and A. J. Heinrich, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 041001 (2019).
6. А. Г. Сыромятников, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк, *УФН* **191**, 705 (2021).
7. A. G. Syromyatnikov, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *Mater. Lett.* **179**, 69 (2016).
8. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, *Nature* **416**, 301 (2002).
9. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, S. Rusponi, P. Ohresser, W. Eberhardt, C. Carbone, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077203 (2004).
10. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz, D. M. Eigler, and A. J. Heinrich, *Science* **335**, 196 (2012).
11. S. Yan, D.-J. Choi, J. A. J. Burgess, S. Rolf-Pissarczyk, and S. Loth, *Nat. Nanotechnol.* **10**, 40 (2015).
12. J.-P. Gauyacq and N. Lorente, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 455301 (2015).
13. W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
14. H. Ebert, D. Ködderitzsch, and J. Minár, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 096501 (2011).
15. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988).
16. W. Wernsdorfer, R. Cle'rac, C. Coulon, L. Lecren, and H. Miyasaka, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237203 (2005).
17. A. S. Smirnov, N. N. Negulyaev, W. Hergert, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, *New J. Phys.* **11**, 063004 (2009).
18. L. D. Landau and E. Lifshitz, *Phys. Z. Sowjetunion* **8**, 153 (1935).
19. K. Tao, O. P. Polyakov, and V. S. Stepanyuk, *Phys. Rev. B* **93**, 161412(R) (2016).
20. M. E. I. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford Univ. Press (2001).
21. Y. Li and B.-G. Liu, *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).
22. Y. Li and B.-G. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 217201 (2006).
23. K. M. Tsysar, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Chin. Phys. B* **24**, 097302 (2015).
24. С. В. Колесников, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, *ФТТ* **57**, 1492 (2015).

25. D. I. Bazhanov, O. V. Stepanyuk, O. V. Farberovich, and V. S. Stepanyuk, *Phys. Rev. B* **93**, 035444 (2016).
26. K. M. Tsysar, S. V. Kolesnikov, I. I. Sitnikov, and A. M. Saletsky, *Mod. Phys. Lett. B* **31**, 1750142 (2017).
27. L. Trallori, *Phys. Rev. B* **57**, 5923 (1998).
28. A. P. Popov, A. V. Anisimov, O. Eriksson, and N. V. Skorodumova, *Phys. Rev. B* **81**, 054440 (2010).
29. A. P. Popov, A. Rettori, and M. G. Pini, *Phys. Rev. B* **92**, 024414 (2015).
30. S. Kolesnikov and I. Kolesnikova, *Europhys. Lett.* **137**, 56003 (2022).
31. С. В. Колесников, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 668 (2016).
32. С. В. Колесников, И. Н. Колесникова, *ЖЭТФ* **152**, 759 (2017).
33. S. V. Kolesnikov and I. N. Kolesnikova, *Phys. Rev. B* **100**, 224424 (2019).
34. S. V. Kolesnikov and I. N. Kolesnikova, *IEEE Magn. Lett.* **10**, 2509105 (2019).
35. S. Kolesnikov and E. Sapronova, *IEEE Magn. Lett.* **13**, 2501205 (2022).
36. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, *Comput. Phys. Comm.* **196**, 335 (2015).
37. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
38. J. J. van der Broek and H. Zijlstra, *IEEE Trans. Magn.* **7**, 226 (1971).
39. H. Hashemi, G. Fischer, W. Hergert, and V. S. Stepanyuk, *J. Appl. Phys.* **107**, 09E311 (2010).
40. A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *J. Magn. Mater.* **510**, 166896 (2020).

СТРУКТУРНЫЙ И МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ПО ДАННЫМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

К. В. Фролов^{a*}, О. А. Алексеева^a, И. С. Любутин^a, В. Ксенофонтов^{b,c},
Е. С. Смирнова^a, В. Л. Темеров^d, И. А. Гудим^d, М. В. Любутина^a

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

^b Институт неорганической и аналитической химии Университета им. И. Гутенберга
55128, Майнц, Германия

^c Институт химии Общества Макса Планка
55128, Майнц, Германия

^d Институт физики им. Л.В. Куренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2022 г.,
после переработки 19 июня 2022 г.
Принята к публикации 20 июня 2022 г.

Температурные зависимости структурных параметров в монокристалле $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, изученные методом рентгеновской дифракции ниже и выше структурного фазового перехода при $T_S = 365$ К, хорошо коррелируют с поведением мессбауэровского параметра квадрупольного взаимодействия. Однако две структурные позиции ионов железа Fe1 и Fe2, формирующиеся в фазе с пространственной группой $P3_121$, возникающей при температурах ниже T_S , не удается различить методом мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe . Это возможно сделать только ниже температуры Нееля T_N . Установлено, что ниже T_N ионы железа формируют трехмерный магнитный порядок изинговского типа с критическим параметром $\beta = 0.283(1)$ и размерностью параметра порядка $n = 1$. Уточненное значение температуры Нееля $T_N = 37.42(1)$ К. Наблюдаемая вблизи температуры $T = 4.4$ К динамика поведения мессбауэровских параметров квадрупольного смещения ε и магнитного сверхтонкого поля B_{hf} для ионов железа в позициях Fe1 и Fe2 указывает на переориентацию магнитных моментов железа. Это коррелирует со спин-переориентационным переходом для ионов Fe и Ho, ранее наблюдавшимся в $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ методом нейтронной дифракции.

DOI: 10.31857/S0044451022110128
EDN: KZZWCB

1. ВВЕДЕНИЕ

Редкоземельные ферробораты $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Ce-Er}$) относятся к новому классу мультиферроиков (II типа) [1–4], в которых сегнетоэлектричество возникает только в маг-

нитоупорядоченном состоянии преимущественно циклоидального и геликоидального типа [5–10]. Кристаллы $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ демонстрируют разнообразие свойств и фазовых переходов в зависимости от ионного радиуса R-элементов [11]. В частности, магнитоэлектрический эффект обнаружен в соединениях с $\text{R} = \text{Ho}, \text{Gd}, \text{Nd}, \text{Sm}$ [12–16]. Наличие двух магнитных подсистем, ионов железа и ионов R, привлекает особое внимание и позволяет рассматривать редкоземельные ферробораты как интересные модельные соединения для изучения магнитных

* E-mail: green@crys.ras.ru

взаимодействий и спиновой динамики в мультиферроиках II типа. В $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ обнаружен каскад структурных и магнитных фазовых переходов [17–19], в том числе спонтанная низкотемпературная спиновая переориентация, найденная также в $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [20,21]. Соразмерно-несоразмерное преобразование магнитной структуры ионов железа ниже температуры Нееля T_N было обнаружено в $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [22] и $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [23, 24]. Магнитные свойства $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ также активно изучаются [12, 25–30], однако полного понимания взаимосвязи кристаллической структуры, магнитных и сегнетоэлектрических свойств пока не достигнуто даже в рамках специальной теоретической модели [31, 32]. В настоящей работе методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и мессбауэровской спектроскопии (МС) в интервале температур $T = 3.5\text{--}500$ К исследованы динамика структурных и магнитных фазовых переходов, тип и размерность магнитного порядка в кристаллах $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$.

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Высококачественные монокристаллы ферробората гольмия $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ были выращены из раствора–расплава тримolibдата висмута по методике, подробно описанной в работах [33, 34]. РСА-исследования параметров решетки монокристаллов $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ проводились в интервале температур $T = 11\text{--}500$ К с шагом 5–20 К. Полученные результаты подробно описаны в нашей предыдущей работе [35]. Измерения проводились на канале BM01 синхротронной станции SNBL ESRF с использованием дифрактометра PILATUS@SNBL, оснащенного криостатами с открытым ламинарным потоком газа Oxford Cryostream 700+ и модифицированным в ESRF Oxford Helijet, и на лабораторном рентгеновском дифрактометре Rigaku Oxford CCD Xcalibur EOS S2, оснащенный криостатом с открытым ламинарным потоком газа Oxford Cobra Plus.

МС-измерения проводились на порошковом образце, приготовленном из монокристалла $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Мессбауэровские спектры поглощения на ядрах ^{57}Fe получены в интервале температур $T = 3.5\text{--}80$ К на стандартном спектрометре Wessel с гелиевым криостатом замкнутого цикла (C2 Montana Instruments). В диапазоне температур $T = 90\text{--}480$ К использовался стандартный спектрометр MC-1104Em, оснащенный проточным азотным криостатом и высокотемпературной резистивной

печью MRF-750K. Источник гамма-излучения $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$ Ritverc MCo7.114 [36] находился при комнатной температуре. Значения изомерных сдвигов измерялись относительно эталонного поглотителя Ritverc MRA.2.6 (фольга $\alpha\text{-Fe}$ толщиной 30 мкм, при комнатной температуре) [36]. Компьютерный анализ мессбауэровских спектров был выполнен с помощью программы Univem-MS (входит в комплект поставки спектрометра MC-1104Em), программы Recoil [37] и программы SpectrRelax [38].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Измерения методом РСА

Результаты детального РСА-исследования монокристаллов $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ представлены в нашей предыдущей статье [35]. Показано, что выше температуры структурного фазового перехода $T_S \approx 365$ К кристаллическая структура $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ трансформируется из пространственной группы симметрии $P3_121$ в $R32$ (рис. 1a). При температурах $T > T_S$ слои атомов, состоящие из тригональных призм HoO_6 и октаэдров FeO_6 меньшего размера, располагаются перпендикулярно оси c (C_3). Атомы бора образуют с атомами кислорода треугольники $[\text{BO}_3]^{3-}$ двух типов. Треугольники первого типа $[\text{B1O}_3]$ соединены своими вершинами только с октаэдрами FeO_6 . Остальные треугольники $[\text{B2O}_3]$ соединены одной вершиной с двумя октаэдрами FeO_6 , а каждая из двух других вершин соединена с октаэдром FeO_6 и призмой HoO_6 . Октаэдры FeO_6 соединены ребрами и образуют спиральные цепочки, вытянутые вдоль оси c . В процессе фазового перехода при $T_S \approx 365$ К происходит изменение пространственной группы симметрии кристаллической структуры $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ с $R32$ на $P3_121$ и возникают два типа октаэдрических позиций FeO_6 (Fe1O_6 и Fe2O_6), а также три типа групп BO_3 (рис. 1b). Заселенности двух кристаллографических позиций железа, Fe1 и Fe2, находятся в соотношении 1 : 2.

Установлено, что при охлаждении ниже $T_S \approx 365$ К параметр ячейки c монотонно уменьшается. В диапазоне температур от 150 до 60 К он выходит на плато, оставаясь практически постоянным. Затем в диапазоне от 60 до 30 К он возрастает, демонстрируя «отрицательное» тепловое расширение, и, наконец, снова уменьшается вплоть до температуры $T = 10$ К (рис. 2a). Такой эффект для параметра c в монокристалле $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ впервые наблюдался методом высокоточной емкостной

дилатометрии [12]. Магнитоэлектрическая связь в мультиферроиках и магнитоэлектрических соединениях может быть вызвана ионными смещениями, которые обычно приводят к макроскопическим искажениям или деформациям решетки вдоль кристаллографических осей. Поэтому выяснение причин и особенностей эффекта «отрицательного» теплового расширения представляет особый интерес [31, 32, 39, 40]. Например, подобное «отрицательное» расширение в мультиферроиках HoMnO_3 [39] и DyMn_2O_5 [40] трактуется как признак сильных магнитных корреляций и спин-решеточных взаимодействий, связанных с большой магнитной анизотропией. В редкоземельных ферроборатах при $T < T_N$ магнитный сверхобмен Fe–O–Fe в цепочках вдоль оси c значительно сильнее любых других сверхобменов в ab -плоскостях между ионами железа и/или между ионами железа и редкоземельных элементов [41]. Кроме того, показано [42], что низкотемпературные (при $T < 150$ К) аномалии упругих констант могут наблюдаться в редкоземельных ферроборатах и должны быть связаны с симметрией локального окружения ионов R и с f - d -взаимодействием между подсистемами ионов Fe и R.

Недавно мы обнаружили «отрицательное» тепловое расширение параметра c при температурах ниже $T \approx 90$ К в монокристаллах $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [43], $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [44, 45] и $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [46, 47]. В монокристаллах $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$, кроме того, наблюдалось «отрицательное» тепловое расширение параметра ячейки a при охлаждении ниже $T = 200$ К. Мы обсудили возможное влияние этой аномалии на нарушение локальной симметрии ионов Nd и Fe, что, в частности, хорошо демонстрирует температурная зависимость мессбауэровского сверхтонкого параметра квадрупольного расщепления $\Delta(T)$.

При охлаждении $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ниже $T = 30$ К наблюдается заметное уменьшение параметра ячейки c (вставка на рис. 2а). Это область существования магнитоэлектрического эффекта, где возникает спонтанная сегнетоэлектрическая поляризация P , величина которой увеличивается с понижением температуры от 30 до 5 К [12].

3.2. Измерения методом МС при различных температурах в парамагнитном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$

Мессбауэровский спектр на ядрах ^{57}Fe $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, измеренный при комнатной температуре, представляет собой слегка асимметричный

квадрупольный дублет (рис. 3), указывающий на парамагнитное состояние ионов железа. Рассчитанные из этого спектра сверхтонкие параметры (изомерный сдвиг $\delta = 0.3891(3)$ мм/с, квадрупольное расщепление $\Delta = 0.3085(5)$ мм/с и ширина линии на полувысоте $\Gamma = 0.258(1)$ мм/с) имеют значения, характерные для высокоспинового состояния ионов железа $\text{Fe}^{3+}(S = 5/2, 3d^5)$ в кристаллографических позициях с октаэдрическим кислородным локальным окружением.

При комнатной температуре кристаллическая решетка $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ описывается пространственной группой $P3_121$ и содержит два типа неэквивалентных позиций ионов железа Fe1 и Fe2. Ранее мы показали, что асимметрия парамагнитного дублета обусловлена текстурным эффектом, который может возникнуть при приготовлении порошкового образца из измельченных монокристаллов. Этот эффект не связан с двумя неэквивалентными позициями железа Fe1 и Fe2, поэтому разделить их вклады в спектр при комнатной температуре невозможно [35]. Во всем диапазоне температур $T = 40$ – 480 К в парамагнитном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ мессбауэровские спектры аналогичны спектру при комнатной температуре (рис. 3) и также не позволяют различить позиции Fe1 и Fe2. Две неэквивалентные позиции ионов железа проявляются при охлаждении лишь в некотором уширении спектра, при этом четкого расщепления линий не наблюдается. Такой же результат ранее мы получили для соединений $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ и $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [43, 44]. Сверхтонкие параметры, рассчитанные из мессбауэровских спектров, измеренных при различных температурах в парамагнитном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, приведены в табл. 1. Температурное поведение изомерного сдвига $\delta(T)$ характерно для эффекта Доплера второго порядка [35].

В МС параметр Δ очень чувствителен к изменению симметрии локального окружения, включающего все координационные сферы вокруг атомов Fe. Температурная зависимость квадрупольного расщепления $\Delta(T)$ для $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ имеет сложный характер в процессе структурного фазового перехода при $T_S \approx 365$ К (рис. 2б), что коррелирует с поведением температурной зависимости параметра ячейки $c(T)$. Используя наши данные РСА [35] и новый программный инструмент PolyDis [48], мы рассчитали для ионов Ho, Fe1 и Fe2 относительное отклонение окружающих их первых координационных кислородных полиэдров от идеальной симметричной формы, а также относительное смещение этих ионов от положения «центра масс» их кис-

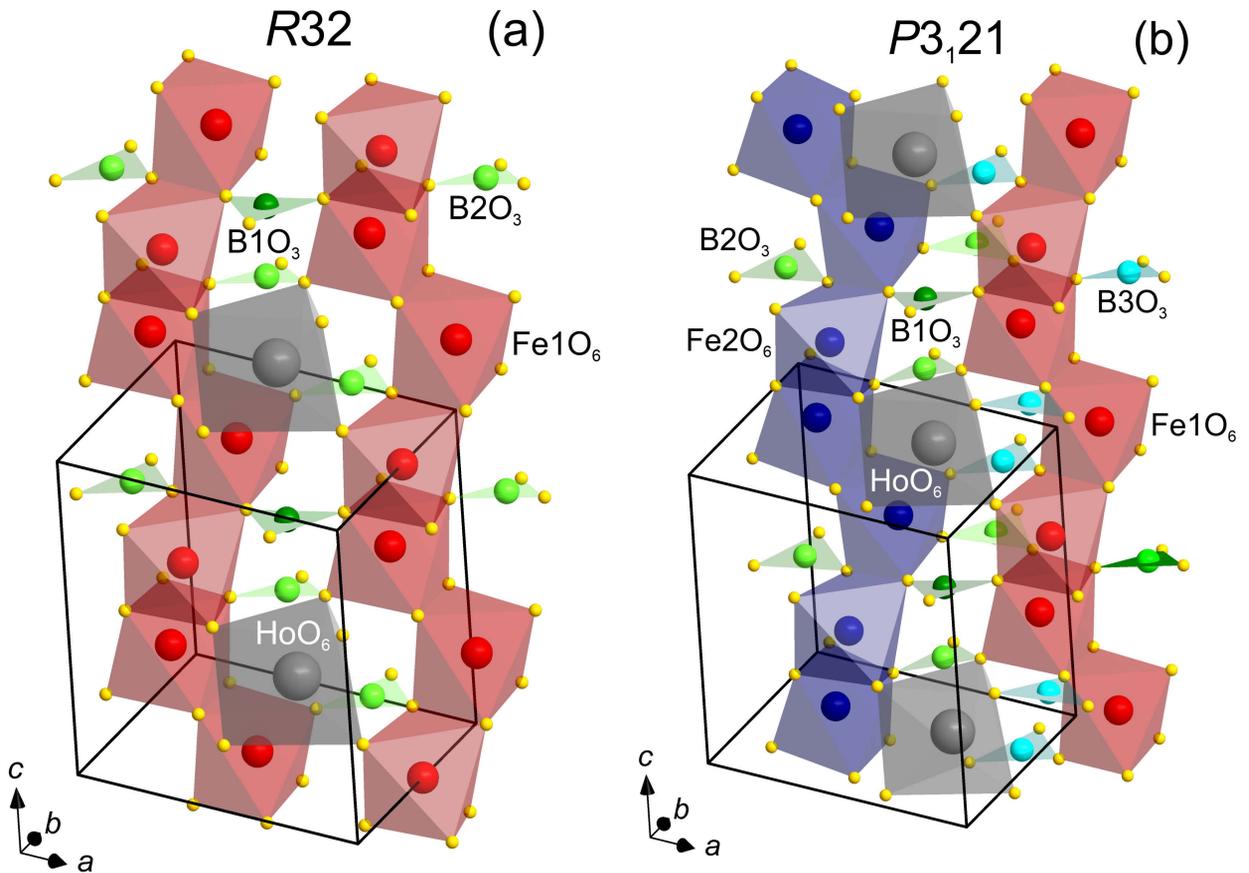


Рис. 1. (В цвете онлайн) Кристаллическая структура $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ при температурах выше температуры структурного фазового перехода (а) с пространственной группой $R32$ и ниже перехода (б) с пространственной группой $P3_121$

Таблица 1. Сверхтонкие параметры, рассчитанные из мессбауэровских спектров $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, измеренных в парамагнитной области температур (δ — изомерный сдвиг, Δ — квадрупольное расщепление)

T , К	δ , мм/с	Δ , мм/с
440	0.296(1)	0.302(1)
380	0.338(1)	0.306(2)
340	0.360(1)	0.307(1)
295	0.389(1)	0.309(1)
210	0.440(1)	0.308(1)
120	0.485(1)	0.309(1)
90	0.494(1)	0.309(1)
60	0.501(1)	0.310(1)
40	0.501(1)	0.313(1)

лородных полиэдров при различных температурах (рис. 4). Хорошо видно, что для ионов Ho и Fe1 оба параметра при температурах выше точки структурного фазового перехода $T_S \approx 365$ К практически не изменяются, а ион Ho находится точно в «центре масс» своего кислородного полиэдра. При температурах $T < T_S$ кристаллографическая позиция железа разделяется на две неэквивалентные позиции, Fe1 и Fe2, и значения обоих параметров, показанных на рис. 4, заметно расходятся. При дальнейшем охлаждении от 360 до 90 К оба параметра для ионов Ho, Fe1 и Fe2 изменяются незначительно. Наиболее заметные изменения в этом температурном интервале происходят в отклонении ионов Ho от положения «центра масс» и в искажении формы кислородного октаэдра ионов Fe2. В парамагнитной области динамика изменения формы кислородных октаэдров ионов железа при охлаждении в основном коррелирует с увеличением параметра квадрупольного расщепления Δ , выявленным из МС-измерений. Слож-

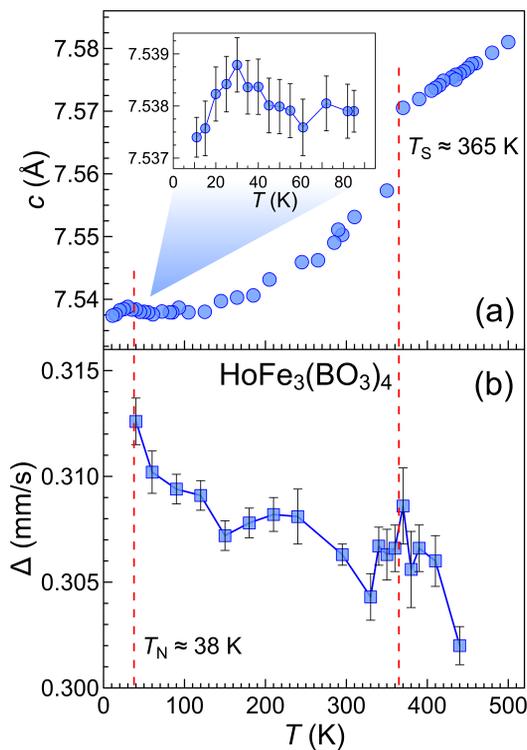


Рис. 2. (В цвете онлайн) Температурные зависимости параметра элементарной ячейки c монокристалла $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ (a) и мессбауэровского параметра квадрупольного взаимодействия Δ (b)

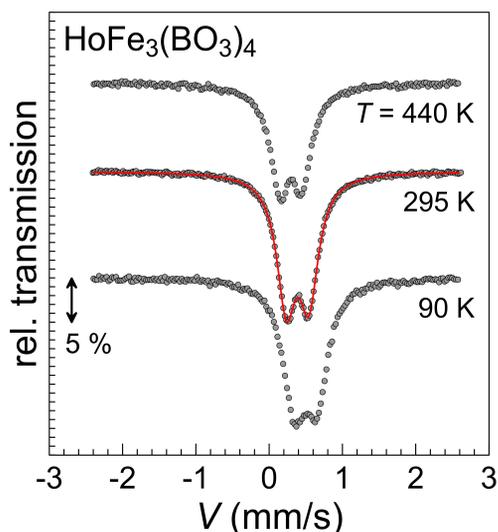


Рис. 3. (В цвете онлайн) Мессбауэровские спектры, измеренные при различных температурах в парамагнитном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Красная сплошная линия показывает результат аппроксимации спектров одним дублетом

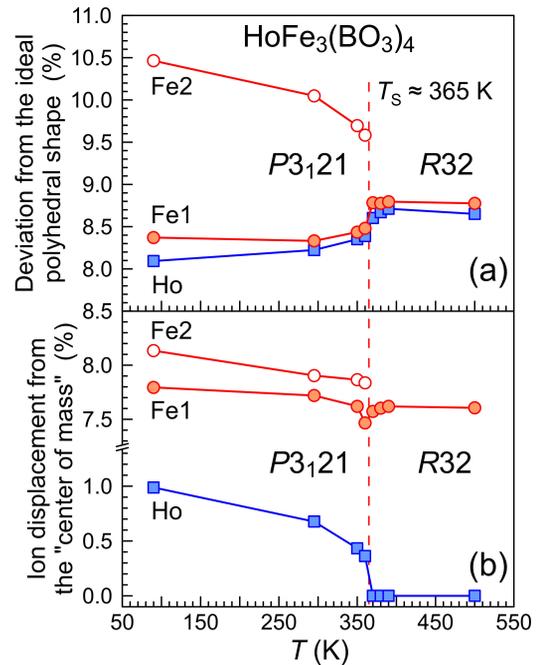


Рис. 4. (В цвете онлайн) Температурные зависимости структурных параметров в $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, свидетельствующие об отклонении кислородных полиэдров от идеальной симметрии в фазах $P3_121$ и $R32$

ное поведение этого параметра указывает на необходимость учета влияния всего локального окружения, а не только первой координационной сферы.

3.3. Измерения методом МС при низких температурах в магнитоупорядоченном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$

Ниже $T \approx 38$ К в мессбауэровских спектрах соединения $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ наблюдается характерное расщепление резонансных линий, свидетельствующее о магнитном упорядочении ионов железа (рис. 5). Из результатов нейтронной дифракции, СКВИД-магнитометрии и измерений теплоемкости [20, 21] известно, что непосредственно ниже температуры Нееля $T_N = 37.4$ К магнитные моменты железа и гольмия образуют магнитную структуру с легкой плоскостью ab . Магнитные моменты в подсистемах ионов Fe2 и Ho лежат в плоскостях ab и упорядочены ферромагнитно в каждой плоскости, но антиферромагнитно в соседних плоскостях. Магнитный момент ионов Fe1 наклонен относительно плоскости ab так, что его компонента в плоскости ферромагнитно связана с моментами Fe2, и, кроме того, есть ненулевая компонента вдоль оси c (рис. 6a). Величина компоненты момента Fe1 вдоль

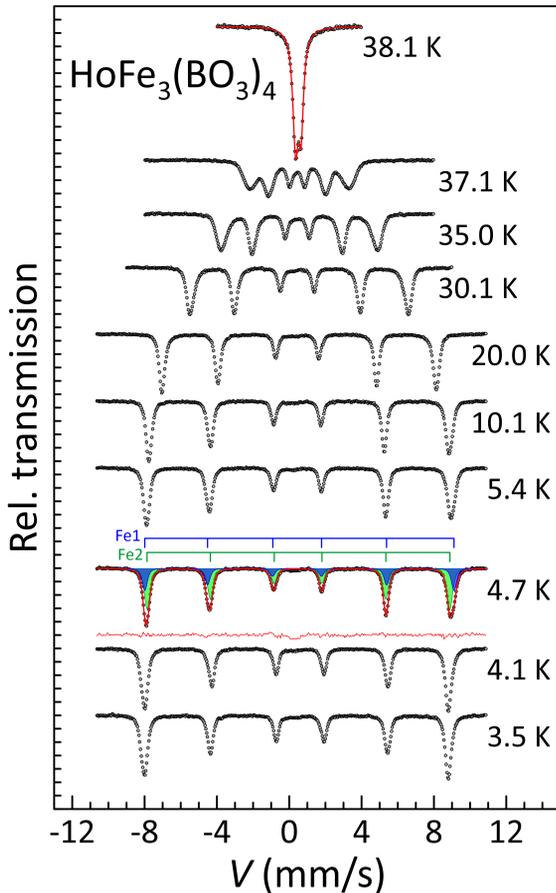


Рис. 5. (В цвете онлайн) Низкотемпературные мессбауэровские спектры, измеренные в магнитоупорядоченном состоянии $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Для спектра при $T = 4.7$ К показана аппроксимация двумя секстетам, соответствующими кристаллографическим позициям Fe1 (синий) и Fe2 (зеленый)

оси c монотонно возрастает с понижением температуры вплоть до спонтанной спиновой переориентации при $T_{SR} = 4.7$ К. При температурах $T < T_{SR}$ подсистемы железа и гольмия упорядочены антиферромагнитно с магнитными моментами, направленными вдоль оси c . При этом магнитные моменты ионов Fe1 и Fe2 лежат строго вдоль оси c , а моменты Ho несколько отклоняются от оси c , образуя распространяющуюся вдоль нее спиновую спираль [26] (рис. 6b).

При самой низкой экспериментальной температуре $T = 3.5$ К мессбауэровский спектр $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ хорошо аппроксимируется только одним секстетом, хотя имеет небольшую асимметрию по внешним линиям, где шестая спектральная линия секстета на 0.5–0.8 % интенсивнее первой. При небольшом повышении температуры форма спектра меняется, и уже при $T = 4.7$ К первая

спектральная линия заметно интенсивнее последней. Эта асимметрия сохраняется до температуры $T = 25$ К и указывает на то, что для интерпретации мессбауэровских спектров в магнитном состоянии при температурах между 4.5 и 25 К следует учитывать по крайней мере две позиции железа. Как будет показано в разд. 3.4, изменение формы спектра при температуре $T \approx 4.4$ К хорошо согласуется с температурным диапазоном спиновой переориентации.

При температурах от 3.5 до 37 К мессбауэровские спектры хорошо аппроксимируются двумя псевдофойгтовскими секстетам S1 и S2 с отношением площадей $A1 : A2 = 1 : 2$. Это коррелирует с отношением заселенностей (1 : 2) двух кристаллографических позиций железа Fe1 и Fe2, полученным из измерений РСА [35]. Выше температуры $T \approx 37$ К спектр становится слишком широким, поэтому модель, основанная на двух секстетам, уже неприменима, и адекватно аппроксимировать спектры можно только методом распределения сверхтонких параметров. Сверхтонкие параметры, полученные из низкотемпературных мессбауэровских спектров, представлены в табл. 2. Ионы Fe^{3+} в позициях Fe1 и Fe2 имеют практически одинаковые изомерные сдвиги δ , но немного разные значения параметров квадрупольного смещения ϵ и сверхтонких магнитных полей $B_{hf1} > B_{hf2}$. Ранее аналогичный результат был получен нами для соединения $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [43], где вклад двух позиций железа удалось учесть только в мессбауэровских спектрах, полученных при $T < T_N$. В то же время для соединения $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$, не содержащего второй магнитной подсистемы редкоземельных ионов, вклад двух позиций железа не удалось разделить даже в магнитоупорядоченном состоянии [45]. Это указывает на различие обменного $f-d$ взаимодействия редкоземельных ионов с ионами железа в неэквивалентных кристаллографических позициях Fe1 и Fe2.

На рис. 7 показана температурная зависимость среднего значения магнитного сверхтонкого поля $\langle B_{hf} \rangle$ на ядрах ^{57}Fe . Ранее было обнаружено небриллюэновское поведение температурной зависимости полного магнитного момента железа в $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [20], что объяснялось сильным влиянием подсистемы железа на магнетизм редкоземельных элементов. Мы уточнили температуру магнитного фазового перехода T_N в $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ и определили тип и размерность магнитного упорядочения подсистемы железа способом, ранее использованным в наших работах [43, 45, 47]. Экспериментальная зависимость

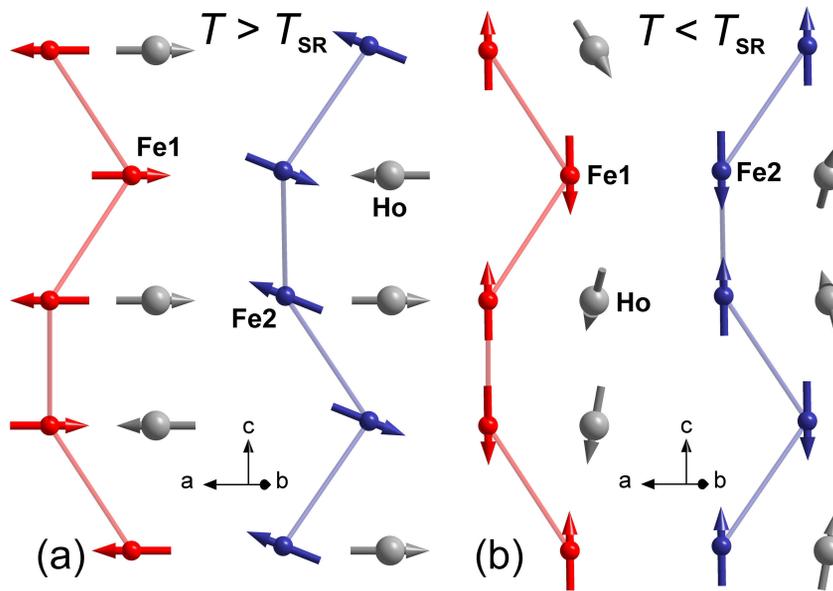


Рис. 6. (В цвете онлайн) Схема ориентации магнитных моментов ионов Fe1, Fe2 и Ho при температурах выше (a) и ниже (b) $T_{SR} = 4.7$ K

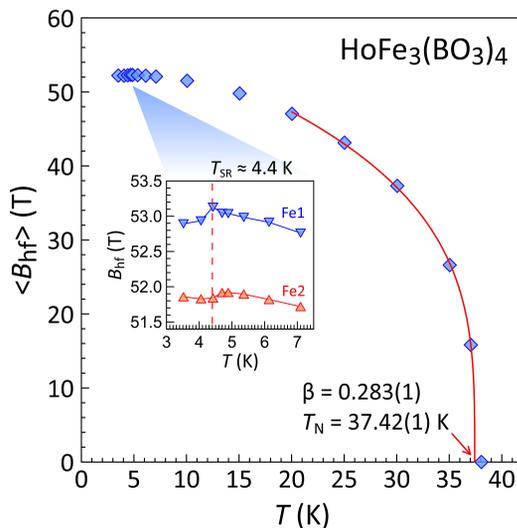


Рис. 7. (В цвете онлайн) Температурная зависимость среднего магнитного сверхтонкого поля $\langle B_{hf} \rangle$ на ядрах железа. На вставке показано изменение величины B_{hf} в области переориентации магнитных моментов ионов железа Fe1 и Fe2

$B_{hf}(T)$ вблизи T_N была аппроксимирована расчетной кривой (рис. 7) с использованием модели критических коэффициентов $B(T) = B_0(1 - T/T_N)^\beta$ [49]. Значение коэффициента β позволяет определить размерность d магнитной решетки и размерность n

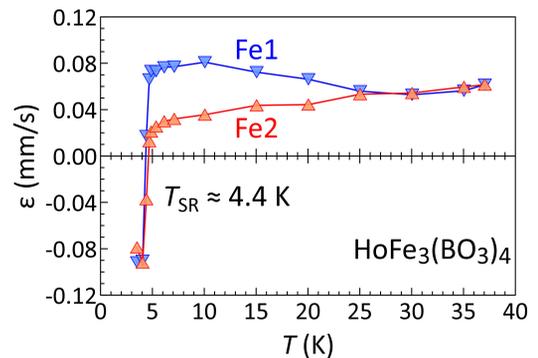


Рис. 8. (В цвете онлайн) Температурные зависимости квадрупольного смещения ϵ в мессбауэровских спектрах для секстетов S1 и S2, соответствующих ионам железа в неэквивалентных кристаллографических позициях Fe1 и Fe2

параметра порядка (табл. 3). Значение $d = 1$ соответствует одномерным магнитным цепочкам, $d = 2$ — слоистой магнитной структуре или поверхности, $d = 3$ — объемному магнитному материалу. Параметр n определяется моделью, описывающей магнитную систему: модель Изинга ($n = 1$) допускает двумерный и трехмерный дальний порядок, а низкоразмерный порядок ($d = 1$ и $d = 2$) отсутствует в моделях XY ($n = 2$) и Гейзенберга ($n = 3$). Дальний порядок для всех n существует только

Таблица 2. Сверхтонкие параметры, рассчитанные из мессбауэровских спектров $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$, измеренных при низких температурах $T < 38$ К (δ — изомерный сдвиг, ε — квадрупольное смещение, B_{hf} — магнитное сверхтонкое поле на ядрах ^{57}Fe , $\langle B_{hf} \rangle$ — среднее магнитное сверхтонкое поле, рассчитанное методом распределения сверхтонких параметров; S1 и S2 — магнитные секстеты, связанные с кристаллографическими позициями ионов железа соответственно Fe1 и Fe2; звездочкой обозначено среднее значение, рассчитанное методом распределения сверхтонких параметров)

T , К	δ , мм/с		ε , мм/с		B_{hf} , Тл		$\langle B_{hf} \rangle$, Тл
	S1	S2	S1	S2	S1	S2	
3.5	0.466(2)	0.475(1)	-0.092(1)	-0.079(1)	52.89(2)	51.86(2)	52.21(2)
4.1	0.487(3)	0.499(1)	-0.090(1)	-0.092(1)	52.94(2)	51.83(2)	52.18(2)
4.4	0.486(2)	0.494(1)	0.017(1)	-0.037(1)	53.13(2)	51.84(1)	52.24(2)
4.7	0.497(2)	0.499(1)	0.066(1)	0.013(1)	53.04(1)	51.92(1)	52.30(1)
4.9	0.494(2)	0.500(1)	0.073(1)	0.021(1)	53.04(1)	51.92(1)	52.29(1)
5.4	0.496(2)	0.499(1)	0.073(1)	0.025(1)	52.99(1)	51.90(1)	52.25(1)
6.1	0.496(2)	0.499(1)	0.077(1)	0.030(1)	52.91(1)	51.82(1)	52.18(1)
7.1	0.497(2)	0.500(1)	0.077(1)	0.032(1)	52.76(1)	51.72(1)	52.07(1)
10.1	0.495(2)	0.499(1)	0.081(1)	0.036(1)	52.14(1)	51.17(1)	51.50(1)
15.1	0.498(2)	0.498(1)	0.072(1)	0.044(1)	50.30(1)	49.48(1)	49.78(1)
20.0	0.494(2)	0.499(1)	0.066(1)	0.044(1)	47.53(1)	46.72(1)	47.03(1)
25.0	0.498(1)	0.499(1)	0.056(1)	0.053(1)	43.66(2)	42.71(1)	43.13(1)
30.1	0.500(1)	0.497(1)	0.053(1)	0.054(1)	37.97(2)	36.75(2)	37.30(2)
35.0	0.499(1)	0.498(2)	0.056(2)	0.060(2)	27.49(2)	25.62(2)	26.61(2)
37.1	0.498(2)*		0.062(2)*		-	-	15.81(2)

Таблица 3. Значения критического коэффициента β при различных значениях параметров d и n [51]

d	3			2
n	1	2	3	1
β	0.31	0.33	0.35	0.125

при $d = 3$ [50, 51].

В результате расчетов для $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ были получены значения $T_N = 37.42(1)$ К и $\beta = 0.283(1)$ ($n = 1$). Значение коэффициента β характерно для трехмерной модели Изинга.

3.4. Спиновая переориентация

На рис. 8 представлены температурные зависимости квадрупольных смещений ε_1 и ε_2 в секстетах S1 и S2, соответствующих неэквивалентным позициям железа Fe1 и Fe2 в структуре $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Форма и динамика этих зависимо-

стей аналогичны наблюдаемым нами ранее при исследовании спин-переориентационного перехода в соединении $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [43]. В $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ значения ε_1 и ε_2 отрицательны при температурах ниже $T = 4.4$ К. При небольшом повышении температуры до $T = 4.7$ К обе величины резко возрастают в сторону положительных значений, при этом абсолютное значение $|\varepsilon_1|$ больше, чем $|\varepsilon_2|$ (рис. 8). Как показано на вставке к рис. 7, магнитные сверхтонкие поля B_{hf} на ионах железа в позициях Fe1 и Fe2 демонстрируют аномалию при той же температуре. Такое аномальное поведение мессбауэровского параметра хорошо коррелирует с обнаруженным ранее спин-переориентационным переходом в обеих магнитоупорядоченных подсистемах ионов Ho и Fe [20, 21, 30], происходящим одновременно с резким ростом сегнетоэлектрической поляризации P от 5 до 90 мкКл/м² [12]. При дальнейшем нагреве до $T_N = 37.4$ К значения ε_1 и ε_2 остаются положительными и изменяются незначительно, при этом $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ в интервале температур 4.1–25 К. В этом же интервале температур

Таблица 4. Расстояния между атомами О противоположными друг другу относительно иона Fe и углы между всеми связями O-Fe-O в полиэдрах Fe1O₆ и Fe2O₆ в кристаллической структуре HoFe₃(BO₃)₄ при температуре T = 90 К

Полиэдр Fe1O ₆				Полиэдр Fe2O ₆			
Противолежащая пара	d, Å	Угловая тройка	Угол, градусы	Противолежащая пара	d, Å	Угловая тройка	Угол, градусы
O1-O3'	3.9791(7)	O1-Fe-O1'	87.58(3)	O5-O5'	4.0093(10)	O5-Fe-O7	89.81(3)
		O1-Fe-O6'	93.89(3)			O5-Fe-O2'	96.60(3)
		O1-Fe-O3	85.28(4)			O5-Fe-O2	75.95(3)
		O1-Fe-O6	77.36(3)			O5-Fe-O4	94.85(3)
		O1-Fe-O3'	167.31(4)			O5-Fe-O5'	166.52(4)
		O1'-Fe-O6'	77.36(4)			O7-Fe-O2'	82.00(3)
O1'-O3	3.9790(11)	O1'-Fe-O3	167.31(3)	O7-O2	3.9616(13)	O7-Fe-O2	160.41(2)
		O1'-Fe-O6	93.89(3)			O7-Fe-O4	101.05(4)
		O1'-Fe-O3'	85.28(3)			O7-Fe-O5	99.88(4)
		O6'-Fe-O3	92.65(4)			O2'-Fe-O2	86.30(3)
O6'-O6	3.9811(9)	O6'-Fe-O6	167.99(5)	O2'-O4	4.0051(10)	O2'-Fe-O4	168.17(3)
		O6'-Fe-O3'	94.77(3)			O2'-Fe-O5'	75.70(3)
		O3-Fe-O6	94.77(3)			O2-Fe-O4	93.60(4)
		O3'-Fe-O3	103.55(4)			O2-Fe-O5'	92.33(4)
		O3'-Fe-O6	92.65(3)			O4-Fe-O5'	92.49(3)

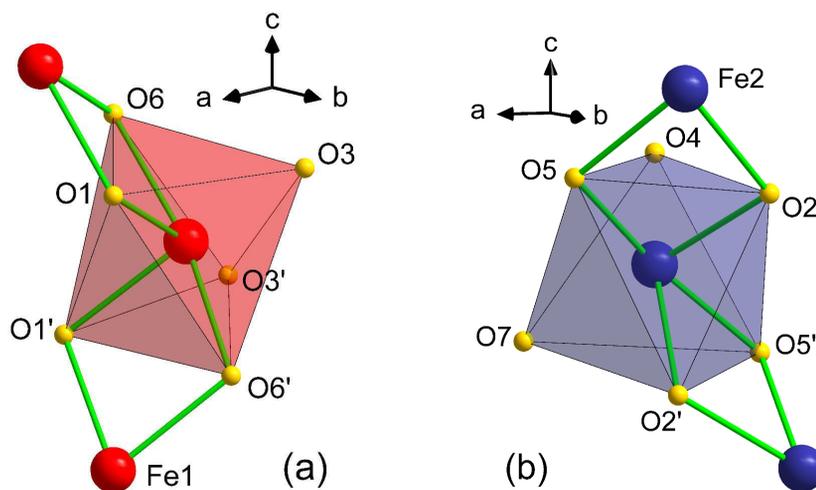


Рис. 9. (В цвете онлайн) Полиэдры Fe1O₆ (a) и Fe2O₆ (b) в структуре HoFe₃(BO₃)₄ при T = 90 К. Зелеными линиями показаны связи Fe-O-Fe в геликоидальных цепочках

обнаружены сильные магнитопьезоэлектрический и магнитоэластический эффекты [29], которые могут влиять на кристаллическую структуру.

Поведение мессбауэровского параметра квадрупольного смещения ϵ очевидно определяется особенностями локального окружения ионов железа,

в том числе искажениями кислородных октаэдров Fe1O_6 и Fe2O_6 (сжатие против удлинения). На рис. 9 показаны формы полиэдров и положения атомов железа для кристаллографических позиций Fe1 и Fe2. В табл. 4 приведены расстояния между атомами O, противоположными друг другу относительно иона Fe, и углы между всеми связями O–Fe–O для полиэдров Fe1O_6 и Fe2O_6 в $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ при $T = 90$ К, рассчитанные по нашим РСА-данным [35]. Результаты расчетов показывают, что менее искаженный полиэдр Fe1O_6 лишь немного вытянут в направлении $\text{O6}'\text{--O6}$, тогда как значительно более искаженный полиэдр Fe2O_6 заметно уплощен в направлении O7--O2 .

При температуре $T = 25$ К квадрупольные смещения ε_1 и ε_2 практически выравниваются и не изменяются при дальнейшем нагреве до температуры Нееля T_N . Отметим, что в интервале температур 15–20 К обнаружено изменение знака константы магнитоупругого взаимодействия [29], а в интервале $T = 20\text{--}30$ К спонтанная сегнетоэлектрическая поляризация P уменьшается и исчезает [12]. С другой стороны, нейтронографические измерения на монокристалле $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ показали, что при охлаждении ниже температуры $T = 25$ К магнитный момент ионов Fe2 начинает быстро отклоняться от плоскости ab к оси c , что в конечном итоге приводит к спонтанной спиновой переориентации как в железной, так и в гольмиевой подсистемах при температуре $T_{SR} = 4.7$ К [20, 30].

В наших мессбауэровских измерениях, помимо резкого скачка значений квадрупольных смещений ε_1 и ε_2 при температуре $T \approx 4.4$ К (см. рис. 7), мы обнаружили одновременное увеличение сверхтонкого магнитного поля B_{hf} на ядрах ^{57}Fe в кристаллографических позициях Fe1 и Fe2, как показано на вставке к рис. 7. Отметим, что увеличение B_{hf1} для ионов железа в позициях Fe1 более выражено; оно начинается при температуре $T \approx 4$ К и заканчивается при $T \approx 4.4$ К, а для ионов железа в менее симметричных позициях Fe2 рост значения B_{hf2} начинается при температуре $T \approx 4.4$ К и заканчивается при $T \approx 4.7$ К. Ранее скачок магнитного момента ионов железа в процессе спиновой переориентации при температуре $T_{SR} = 4.7$ К был обнаружен методами нейтронографии и СКВИД-магнитометрии [20].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Низкотемпературные измерения методом МС на ядрах ^{57}Fe установили, что ионы железа в

$\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ создают трехмерный магнитный порядок изинговского типа с критическим параметром $\beta = 0.289(1)$ и размерностью параметра порядка $n = 1$. Уточненное значение температуры Нееля $T_N = 37.54(1)$ К.

Согласно данным РСА, при температурах ниже структурного фазового перехода, $T < T_S = 365$ К, кристаллическая структура $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ изменяет пространственную группу симметрии $R32$ на $P3_121$, в которой возникают две неэквивалентные структурные позиции ионов железа, Fe1 и Fe2. В то же время мессбауэровские измерения не различают ионы железа в позициях Fe1 и Fe2 при температурах выше T_N (в парамагнитном состоянии) из-за одинаковых сверхтонких параметров, однако эти позиции можно различить ниже T_N .

Наблюдаемая динамика мессбауэровских параметров квадрупольных смещений $\varepsilon_1(T)$ и $\varepsilon_2(T)$, а также магнитных сверхтонких полей $B_{hf1}(T)$ и $B_{hf2}(T)$ при температуре $T \approx 4.4$ К хорошо коррелирует со спин-переориентационным переходом. Более того, наблюдаемые аномалии в поведении параметров ε и B_{hf} указывают на прямую связь между искажениями симметрии локального окружения ионов железа в позициях Fe1 и Fe2 и силой обменных взаимодействий Fe–Fe и Fe–Ho. В свою очередь, это приводит к формированию геликоидальной магнитной структуры ионов Ho.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и с применением оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. А. Смоленский, И. Е. Чупис, УФН **137**, 415 (1982) [Sov. Phys. Usp. **25**, 475 (1982)].
2. H. Schmid, Ferroelectrics **162**, 317 (1994).
3. D. I. Khomskii, J Magn. Magn. Mater. **306**, 1 (2006).
4. D. Khomskii, Physics **2**, 20 (2009).
5. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, УФН **182**, 593 (2012) [Phys. Usp. **55**, 557 (2012)].
6. Y. Tokura, S. Seki, and N. Nagaosa, Rep. Prog. Phys. **77**, 076501 (2014).

7. S. Dong, J. M. Liu, S. W. Cheong et al., *Adv. Phys.* **64**, 519 (2015).
8. M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Meier et al., *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16046 (2016).
9. S. Luo and K. Wang, *J. Alloys Compd.* **726**, 833 (2017).
10. A. Scaramucci, H. Shinaoka, M. V. Mostovoy et al., *Phys. Rev. X* **8**, 011005 (2018).
11. А. М. Кадомцева, Ю. Ф. Попов, Г. П. Воробьев и др., *ФНТ* **36**, 640 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 511 (2010)].
12. R. P. Chaudhury, F. Yen, B. Lorenz et al., *Phys. Rev. B* **80**, 104424 (2009).
13. А. К. Звездин, С. С. Кротов, А. М. Кадомцева и др., *Письма в ЖЭТФ* **81**, 335 (2005) [*JETP Lett.* **81**, 272 (2005)].
14. А. К. Звездин, Г. П. Воробьев, А. М. Кадомцева и др., *Письма в ЖЭТФ* **83**, 600 (2006) [*JETP Lett.* **83**, 509 (2006)].
15. J. E. Hamann-Borrero, S. Partzsch, S. Valencia, et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 267202 (2012).
16. Ю. Ф. Попов, А. П. Пятаков, А. М. Кадомцева и др., *ЖЭТФ* **138**, 226 (2010) [*JETP* **111**, 199 (2010)].
17. A. D. Balaev, L. N. Bezmaternykh, I. A. Gudim et al., *J. Magn. Magn. Mat.* **258–259**, 532 (2003).
18. R. Z. Levitin, E. A. Popova, R. M. Chtsherbov et al., *Письма в ЖЭТФ* **79**, 531 (2004) [*JETP Lett.* **79**, 423 (2004)].
19. А. И. Панкрац, Г. А. Петраковский, Л. Н. Безматерных, О. А. Баюков, *ЖЭТФ* **126**, 887 (2004) [*JETP* **99**, 766 (2004)].
20. C. Ritter, A. Vorotynov, A. Pankrats et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 365209 (2008).
21. A. Pankrats, G. Petrakovskii, A. Kartashev et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 436001 (2009).
22. H. Mo, C. S. Nelson, L. N. Bezmaternykh et al., *Phys. Rev. B* **78**, 214407 (2008).
23. M. Janoschek, P. Fischer, J. Schefer et al., *Phys. Rev. B* **81**, 094429 (2010).
24. S. Hayashida, M. Soda, S. Itoh et al., *Phys. Rev. B* **92**, 054402 (2015).
25. А. А. Демидов, Д. В. Волков, *ФТТ* **53**, 926 (2011) [*Phys. Solid State* **53**, 985 (2011)].
26. D. K. Shukla, S. Francoual, A. Skaugen et al., *Phys. Rev. B* **86**, 224421 (2012).
27. А. М. Кадомцева, Г. П. Воробьев, Ю. Ф. Попов и др., *ЖЭТФ* **141**, 930 (2012) [*JETP* **114**, 810 (2012)].
28. Д. А. Ерофеев, Е. П. Чукалина, Л. Н. Безматерных и др., *Опт. и спектр.* **120**, 588 (2016) [*Opt. and Spectr.* **120**, 558 (2016)].
29. М. П. Колодяжная, Г. А. Звягина, И. В. Билыч и др., *ФНТ* **544**, 1712 (2018) [*Low Temp. Phys.* **44**, 1341 (2018)].
30. M. N. Popova, E. P. Chukalina, D. A. Erofeev et al., *Phys. Rev. B* **103**, 094411 (2021).
31. A. I. Popov, D. I. Plokhov, and A. K. Zvezdin. *Phys. Rev. B* **87**, 024413 (2013).
32. T. Kurumaji, K. Ohgushi, and Y. Tokura. *Phys. Rev. B* **89**, 195126 (2014).
33. I. A. Gudim, E. V. Eremin, and V. L. Temerov, *J. Cryst. Growth* **312**, 2427 (2010).
34. I. A. Gudim, E. V. Eremin, and M. S. Molokeev, *Sol. St. Phen.* **215**, 364 (2014).
35. E. S. Smirnova, O. A. Alekseeva, A. P. Dudka et al., *Acta Cryst. B* **75**, 954 (2019).
36. <https://ritverc.com/en/products/sources-scientific-application/mossbauer-sources/57co>
37. K. Lagarec and D. G. Rancourt. *Recoil – Mössbauer Spectral Analysis Software for Windows*. Department of Physics, University of Ottawa, Ottawa, ON, Canada (1998), version 1.0. <https://denisrancourt.ca/Recoil-Manual.pdf>
38. M. E. Matsnev and V. S. Rusakov. *AIP Conf. Proc.* **1489**, 178 (2012).
39. C. R. dela Cruz, F. Yen, B. Lorenz et al., *Phys. Rev. B* **71**, 060407(R) (2005).
40. C. R. dela Cruz, F. Yen, B. Lorenz et al., *Phys. Rev. B* **73**, 100406(R) (2006).
41. D. Fausti, A. A. Nugroho, P. H. M. van Loosdrecht et al., *Phys. Rev. B* **74**, 024403 (2006).
42. Д. В. Волков, А. А. Демидов, Н. П. Колмакова, Л. В. Такунов, *ФТТ* **50**, 1613 (2008) [*Phys. Sol. St.* **50**, 1677 (2008)].
43. K. V. Frolov, I. S. Lyubutin, E. S. Smirnova et al., *J. Alloys Compd.* **671**, 545 (2016).
44. E. S. Smirnova, O. A. Alekseeva, A. P. Dudka et al., *Acta Cryst. B* **74**, 226 (2018).
45. K. V. Frolov, I. S. Lyubutin, O. A. Alekseeva et al., *J. Alloys Compd.* **748**, 989 (2018).

46. E. S. Smirnova, O. A. Alekseeva, A. P. Dudka et al., *Acta Cryst. B* **78**, 1 (2022).
47. K. V. Frolov, I. S. Lyubutin, O. A. Alekseeva et al., *J. Alloys Compd.* **909**, 164747 (2022).
48. D. Stoiber and R. Niewa, *Z. Kristallogr.* **234**, 201 (2019).
49. H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1971), p. 42.
50. J-P. Renard, in *Organic and Inorganic Low-Dimensional Crystalline Materials*, ed. by P. Delhaes and M. Drillon, Plenum Press, New York, London (1987), p. 125.
51. L. J. de Jongh, in *Magnetic properties of layered transition metal compounds*, ed. by L. J. de Jongh, Kluwer Acad. Publ., Netherlands (1990), p. 1.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОЦК-ЛИТИЯ В УСЛОВИЯХ ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

*В. А. Попов**, *А. В. Попов***

*Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова
656038, Барнаул, Россия*

Поступила в редакцию 16 мая 2022 г.,
после переработки 09 июня 2022 г.
Принята к публикации 20 июня 2022 г.

На примере лития рассмотрена оригинальная методика описания возбужденных состояний электронов в кристаллических структурах. Показано, что спектр электронов в литии претерпевает незначительные изменения при больших значениях параметра решетки вплоть до 8.77 боровских радиусов. Времена жизни возбужденных электронов внешних состояний s - и p -симметрии существенно различаются при значениях параметра решетки $d < 8.77$ боровских радиусов. Обнаружено метастабильное кристаллическое состояние ОЦК-лития, почти не зависящее от мощности возбуждения при значении постоянной решетки, равном 6.55 боровских радиуса, соответствующем значению постоянной ОЦК-решетки лития в основном состоянии.

DOI: 10.31857/S004445102211013X
EDN: LAAGNI

1. ВВЕДЕНИЕ

Литий является одним из наиболее изученных щелочных металлов. Он имеет единственный валентный электрон, что позволяет с легкостью использовать модель почти свободных электронов. В связи с этим первые успехи были достигнуты в изучении электронной структуры так называемого «объемного» лития. Позже появились работы по структурным свойствам малых кластеров лития. Так, в работе [1] впервые были изучены структуры Li_3 и Li_4 , в работе [2] — кластеры Li_n ($n = 3-6$), а в работе [3] проведено первое систематическое изучение зависимости геометрии кластера от электронной структуры. Дальнейшие исследования были направлены на уточнение ранее обнаруженных структур и поиск новых стабильных структур [4–8]. В работе [9] на примере кластеров лития было показано, что металлические кластеры похожи в электронном строении на простые молекулы. Так, электронные состояния и химические связи кластеров Li_4 , Li_{10} и Li_8 схожи с молекулами F_2 , N_2 , и CH_4 соответственно.

В работе [10] проведено сравнение результатов расчета различными методами теоретического исследования кластеров лития.

Стоит отметить, что электронная структура и связанные с ней физико-химические свойства для кристаллического лития в основном состоянии изучалась давно и многими авторами (см., например, работы [11–13] и ссылки к ним). Результаты исследования электронного строения лития от малых кластеров Li_n ($n = 4-40$) до объемного металла и поверхностей представлены в обзоре [14]. Свойства электронов металлического лития в условиях тепловых, оптических, рентгеновских и примесных возбуждений настолько небольшой интенсивности, что позволило пренебречь изменениями энергетической зонной структурой, рассмотрены в [15–17]. Однако вопрос о механизме формирования кристаллического лития в условиях внешнего воздействия остается открытым. Электроны формируемых систем испытывают орбитальные переходы, приводящие к образованию возбужденных структур с различным временем жизни, что добавляет существенные трудности не только при теоретическом описании, но и при экспериментальном изучении происходящих процессов. При этом особого внимания заслуживают методы, основывающиеся на первых принципах квантовой механики, не требующие введения каких-либо эмпирических параметров.

* E-mail: pva379@mail.ru

** E-mail: Popov.Barnaul@mail.ru

Один из подходов к описанию возбуждений опирается на формализм многочастичной теории возмущений, позволяющей учесть все взаимодействия между частицами. Данная теория дает адекватные результаты в случае, если возмущения малы [18]. Если же возмущения велики, то возникает ряд трудностей технического характера. При этом остается открытым вопрос и об учете сплошного спектра в задаче на собственные значения энергии электронов. До сих пор отсутствуют четкие критерии, позволяющие ограничить бесконечный набор дискретных состояний и континуум. Для описания динамики электронов в металлах часто используют теорию ферми-жидкости. При этом низкоэнергетические возбуждения системы описываются с помощью невзаимодействующих фермионов — квазичастиц, являющихся, по сути, долгоживущими возбуждениями, скорость затухания которых определяется мнимой частью собственной энергии квазичастицы. Эволюция такой системы описывается при помощи одночастичной функции Грина. Для функции Грина системы с обычным кулоновским взаимодействием между электронами существует строгое уравнение движения, включающее двухчастичную функцию Грина, однако решение этого уравнения в настоящее время затруднено. Формально точная система уравнений, позволяющая получить самосогласованное решение для функции Грина, была получена Хедином [19]. Тем не менее для описания многих систем используются именно приближения, из которых наиболее популярным является GW-приближение. При этом наилучшее согласие с экспериментальными данными достигается в случае слабых возмущений многоэлектронной системы. Более того, в ряде случаев наблюдается несоответствие экспериментальным данным, например, при описании изоляторов Мотта и получении фотоэмиссионного спектра материалов [20]. Хорошо согласующееся с экспериментом описание свойств системы взаимодействующих частиц можно получить, используя теорию функционала электронной плотности [21]. Основная сложность при реализации данного подхода заключается в том, что необходимо получить точный функционал, универсальный вид которого неизвестен [22, 23]. Многоконфигурационное приближение, позволяющее учесть все взаимодействия электронов, дает наилучшее совпадение с экспериментальными данными [24]. Однако ряды, реализующие данный подход, чрезвычайно слабо сходятся, а расчеты настолько трудоемки ввиду экспоненциального роста вычислительных затрат с увеличением числа частиц, что применяются для рас-

чета систем с небольшим числом электронов, даже при использовании адаптивных схем расчета [25, 26]. В настоящей работе рассмотрена методика описания электронной структуры кристаллического лития в условиях внешнего воздействия с учетом изменений энергетических уровней, позволяющая в рамках единого подхода оценить время жизни возбуждения.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Известно, что спектр оператора Гамильтона системы электронов в кристалле включает бесконечное число дискретных состояний и континуум. Это существенно затрудняет использование даже одноэлектронных функций при решении спектральной задачи. К сожалению, четкие критерии, позволяющие ограничить набор дискретных состояний и учесть вклад сплошного спектра, отсутствуют. Один из способов преодоления этих трудностей, предложенный в работе [27], заключается в усреднении полной энергии электронов по всем значениям волнового вектора \mathbf{k} в зоне Бриллюэна, позволяющем в результате существенно сократить численные расчеты.

Следуя работе [27], представим полную энергию E_T всех электронов многоатомной системы в виде суммы кинетической энергии E_K , энергии кулоновского электронно-ядерного взаимодействия E_N , энергии кулоновского взаимодействия электронов E_E , энергии кулоновского взаимодействия ядер E_C , обменно-корреляционного взаимодействия электронов E_{EX} :

$$E_T = E_K + E_N + E_E + E_C + E_{EX}. \quad (1)$$

В каждом из перечисленных слагаемых в (1) заложено суммирование по состояниям, занятым электронами, с номерами i и волновым векторам \mathbf{k} .

Волновую функцию в кристаллической ячейке разложим по полному набору базисных функций $\{\phi_n(\mathbf{r})\}$:

$$\Psi_{ik}(\mathbf{r}) = \sum_{j,n} C_{ij} \left(\mathbf{S}^{-1/2} \right)_{jn} \phi_n(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Здесь C_{ij} — коэффициенты разложения, \mathbf{S} — матрица интегралов перекрытия, отличная от единичной, если функции $\phi_n(\mathbf{r})$ не ортонормированы. В качестве $\phi_n(\mathbf{r})$ выберем кристаллические функции гауссова типа. Для состояний s -симметрии предста-

вим их в виде суммы по \mathbf{R}_p — векторам прямой решетки при больших α_n :

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\alpha_n}{\pi}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_p \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_p - \alpha_n |\mathbf{R}_p - \mathbf{r} + \mathbf{a}_n|^2\}, \quad \alpha_n \geq \alpha_0, \quad (3)$$

и в виде суммы по \mathbf{K}_p — векторам обратной решетки при малых α_n :

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\pi}{\alpha_n \Omega^2}\right)^{3/4} \sum_p \exp\left\{i(\mathbf{K}_p + \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) - \frac{|\mathbf{K}_p + \mathbf{k}|^2}{4\alpha_n}\right\}, \quad \alpha_n \leq \alpha_0. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{a}_n — вектор, указывающий положение атома в ячейке объемом Ω ,

$$\alpha_0 = \frac{K_{max}}{2R_{max}} \quad (5)$$

— параметр сходимости, выбираемый так, чтобы обе суммы по решеткам в (3) и (4) имели одинаково быструю сходимость до максимальных значений радиусов R_{max} и K_{max} сфер, охватывающих близкое друг к другу число узлов как по векторам прямой решетки \mathbf{R}_p в (3), так и по векторам обратной решетки \mathbf{K}_p в (4). Отметим, что построенная функция (3) удовлетворяет теореме Блоха, а представление (4) есть результат фурье-преобразования функции (3) к сумме по векторам обратной решетки. Важно, что функции p -, d -, f -, ... симметрии легко получить через функции s -симметрии (3) и (4) дифференцированием по компонентам вектора \mathbf{a}_n . Отметим, что эта идея лежит в основе последующих аналитических вычислений методом дифференцирования всех матричных элементов.

В каждом слагаемом выражения (1) для полной энергии выполним интегрирование по волновым векторам \mathbf{k} в зоне Бриллюэна для каждой полосы с номером i в предположении слабой зависимости спектра и волновой функции от волнового вектора \mathbf{k} . Это предположение вполне оправдано для основных состояний. Для внешних состояний оно будет также приемлемым для полос, полностью заполненных электронами, и тем точнее, чем уже полоса с номером i . Отметим, что при кратном увеличении размера ячейки прямой решетки во столько же раз уменьшается размер зоны Бриллюэна, следовательно, энергетические полосы сужаются. Таким образом, при достаточно больших размерах ячейки прямой решетки погрешность, вносимая от заранее выполненного усреднения по всем значениям

волнового вектора \mathbf{k} зоны Бриллюэна в выражении для полной энергии (1), может быть пренебрежимо малой. При этом аналитически выполненное усреднение позволяет существенно сократить численные расчеты.

После того, как выполнено интегрирование по волновым векторам \mathbf{k} в выражении для полной энергии (1), из условия минимума может быть получена система алгебраических уравнений для вычисления вариационных коэффициентов C_{ij} — теперь уже средних по зоне Бриллюэна:

$$\mathbf{HC} = \mathbf{ESC}. \quad (6)$$

Здесь \mathbf{E} — диагональная матрица собственных значений, \mathbf{C} — матрица собственных векторов, \mathbf{S} — матрица интегралов перекрывания функций гауссового типа, \mathbf{H} — матрица с элементами оператора кинетической энергии, кулоновского электрон-ядерного взаимодействия, кулоновского взаимодействия электронов, кулоновского взаимодействия ядер и обменно-корреляционного взаимодействия электронов, вычисленных на базисных функциях (3), (4).

Стоит отметить, что ОЦК-литий (с объемной гранцентрированной решеткой) имеет энергетические зоны, заполненные лишь наполовину. Изложенный же выше метод основывается на интегрировании по всей зоне Бриллюэна в предположении, что все энергетические зоны полностью заполнены и слабо зависят от волнового вектора. Однако, как показано в [28], предложенный подход дает приемлемые результаты для ОЦК-лития даже без увеличения размеров ячейки.

Далее перейдем к учету внешнего воздействия. Для начала рассмотрим матрицу оператора кинетической энергии с элементами

$$K_{12} \equiv \int \phi_1^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right) \phi_2(\mathbf{r}) d^3r. \quad (7)$$

Здесь оператор Лапласа Δ в сферической системе координат содержит угловую часть

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (8)$$

собственные значения которой обычно представляют в виде

$$\Lambda = -l(l+1). \quad (9)$$

Если собственные функции оператора (8) регуляры, то l в (9) принимает только целочисленные значения $l = 0, 1, 2, \dots$

Поскольку любое внешнее воздействие на электрон приводит к изменению ее импульса и момента импульса, собственные значения соответствующих им операторов также изменяются. Если не накладывать периодических граничных условий на собственные функции оператора (8) по полярной угловой переменной θ , то собственные значения (9) оператора (8) будут произвольными. Не будем ограничиваться рассмотрением только целочисленных значений орбитального квантового числа l . В общем случае можно считать его комплексным числом, $L = l + x + iy$, где l пусть по-прежнему принимает только целочисленные значения $l = 0, 1, 2, \dots$. Это позволяет включить в рассмотрение нерегулярные решения, описывающие спонтанный распад орбитальных возбуждений за конечное время τ , которое в соответствии с принципом неопределенностей Гейзенберга обратно пропорционально ширине энергетического уровня, $\Gamma \sim \hbar/\tau$ [29]. При этом вероятность обнаружить электрон в данном состоянии будет затухать по экспоненциальному закону вида $\exp(-\Gamma t/\hbar)$. Волновая функция

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp \left\{ -i \left(E - \frac{i\Gamma}{2} \right) \frac{t}{\hbar} \right\}, \quad (10)$$

описывающая состояния с затуханием, по-прежнему удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathbf{H}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

теперь уже с комплексными значениями энергии $\epsilon = E - i\Gamma/2$ в задаче (6) на собственные значения. В этом случае каждый матричный элемент оператора кинетической энергии можно записать в виде суммы двух слагаемых. Первое из них представим в виде (7), таком же, как и для невозмущенной задачи. Далее перейдем к рассмотрению второго слагаемого, описывающего орбитальные возбуждения.

Стоит отметить, что такой подход не содержит предположений о типах возбуждений, а потому позволяет включить в рассмотрение возбуждения любой природы и мощности. В рамках данной идеи было получено аналитическое решение спектральной задачи для атома водорода, которое продемонстрировало широкие возможности для описания как основного состояния, так и возбужденных электронных состояний атома водорода [30]. Также предложенный подход к описанию электронных возбуждений в атомах был обобщен на случай многоатомных систем типа кластеров [31].

В общем случае многоцентровой задачи, например, при описании возбуждений кластера в кристаллической ячейке, матричные элементы оператора

возбуждения для квадрата момента импульса можно вычислить по формуле

$$L_{12} \equiv \sum_{ijn} (\mathbf{S}^{-1/2})_{1n} \sum_k B_{nk}^+ \Lambda'_k B_{ki} (\mathbf{S}^{-1/2})_{ij} M_{j2}. \quad (12)$$

Здесь при $\alpha \leq \alpha_0$

$$\begin{aligned} M_{12} &\equiv \frac{\hbar^2}{2m} (u + iv) \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) \sum_p \frac{d^3r}{|\mathbf{R}_p + \mathbf{r}|^2} = \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{m\Omega} (u + iv) S_{12} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{\mathbf{K}_p} \exp \left(i\mathbf{K}_p \cdot \mathbf{a} - \frac{K_p^2}{4\alpha} \right) \end{aligned} \quad (13)$$

и при больших значениях $\alpha \geq \alpha_0$

$$\begin{aligned} M_{12} &= \frac{\hbar^2 (u + iv)}{2m} S_{12} \times \\ &\times \left\{ \sqrt{\pi\alpha} \sum_p \frac{\operatorname{erfc}(i\sqrt{\alpha - \alpha_0} |\mathbf{R}_p + \mathbf{a}|)}{i|\mathbf{R}_p + \mathbf{a}|} \exp(-\alpha |\mathbf{R}_p + \mathbf{a}|^2) + \right. \\ &+ \frac{2\pi^2}{\Omega} \left[\sum_{p \neq 0} \frac{1}{\mathbf{K}_p} \exp \left(i\mathbf{K}_p \cdot \mathbf{a} - \frac{K_p^2}{4\alpha} \right) \times \right. \\ &\left. \left. \times \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{\alpha - \alpha_0}{4\alpha\alpha_0}} K_p \right) - \sqrt{\frac{\alpha - \alpha_0}{\pi\alpha\alpha_0}} \right] \right\}, \quad (14) \end{aligned}$$

$$\mathbf{a} \equiv \frac{\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2}{\alpha_1 + \alpha_2}, \quad \alpha \equiv \alpha_1 + \alpha_2,$$

$$u \equiv x(x + 2l + 1) - y^2, \quad v \equiv y(2x + 2l + 1),$$

B_{ki} — элементы собственных векторов сферической части оператора Лапласа, вычисленные на функциях s -симметрии (3) и (4), представимые через проекции векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 на оси декартовой системы координат. Величина

$$\begin{aligned} \Lambda_{12} &\equiv \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \Lambda \varphi_2(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= 4S_{12} \left(\frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \right) \left\{ \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left(|a_{1x} a_{2y} - a_{2x} a_{1y}|^2 + \right. \right. \\ &+ |a_{1x} a_{2z} - a_{2x} a_{1z}|^2 + |a_{1y} a_{2z} - a_{2y} a_{1z}|^2 \Big) - \\ &\left. \left. - a_{1x} a_{2x} + a_{1y} a_{2y} + a_{1z} a_{2z} \right\}, \quad (15) \end{aligned}$$

изменение k -го собственного значения сферической части оператора Лапласа Λ'_k запишем через Λ_k — k -е собственное значение этого оператора:

$$\Lambda'_k = (l_k + x + iy)(l_k + x + iy + 1) - \Lambda_k, \quad (16)$$

$$l_k = \sqrt{0.25 + \Lambda_k} - 0.5.$$

Перебирая все возможные значения орбитально-квантового числа L в комплексной области, например, при $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$, можно проследить по минимуму полной энергии возбужденного кластера в кристаллической ячейке и за его спектральными характеристиками в процессе поиска самосогласованных решений уравнения Шредингера. Отметим, что такой подход приводит к решению системы алгебраических уравнений (6) для каждого из множества добавок x и y к целочисленному значению l , при этом параметр x отвечает за штарковский сдвиг энергетических уровней при $y = 0$, а параметр y — за уширение этих уровней при $x = 0$.

Чтобы улучшить сходимость суммы по узлам кристаллической решетки в выражении для потенциальной энергии кулоновского взаимодействия ядер

$$E_C = \frac{1}{2} \sum_{ijp} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{a}_i + \mathbf{a}_j|}, \quad (17)$$

можно воспользоваться стандартным методом Эвальда [32]. Результат представим в виде

$$E_C = e^2 \sum_{ij} Z_i Z_j \left(\sum_p \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha} |\mathbf{R}_p - \mathbf{a}_i + \mathbf{a}_j|)}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{a}_i + \mathbf{a}_j|} + \frac{4\pi}{\Omega} \left[\sum_{p \neq 0} \frac{1}{K_p^2} \exp\left(i\mathbf{K}_p \cdot (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j) - \frac{K_p^2}{4\alpha_0}\right) - \frac{1}{4\alpha_0} \right] \right). \quad (18)$$

В дальнейшем в качестве обменно-корреляционной энергии E_{EX} в (1) будем использовать стандартное выражение для обменной энергии в приближении Хартри–Фока. Однако стоит отметить, что предложенная методика вычисления энергетической структуры электронов в условиях внешнего воздействия может быть применена для описания возбуждений путем обобщения метода функционала электронной плотности с различными обменно-корреляционными потенциалами.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Для удобства воспользуемся атомной системой единиц, в которой постоянная Планка $\hbar = 1$, квадрат заряда электрона $e^2 = 2$, масса электрона $m = 1/2$. Тогда энергия будет измеряться в ридбергах, а расстояние — в боровских радиусах.

Чтобы выяснить, насколько оправданным является описанное выше приближение, и исследовать

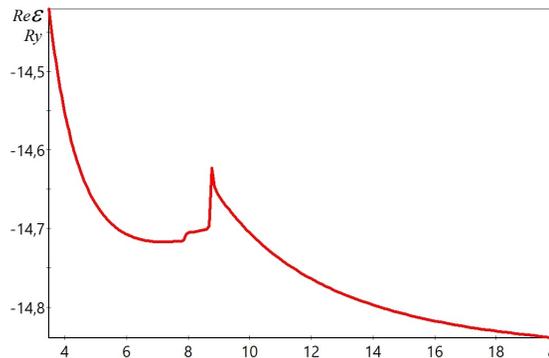


Рис. 1. Действительная часть $\operatorname{Re}E$ полной энергии в ридбергах для электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки d в боровских радиусах при $x = 0$ и $y = 0, \pm 4 \cdot 10^{-4}, \pm 8 \cdot 10^{-4}$

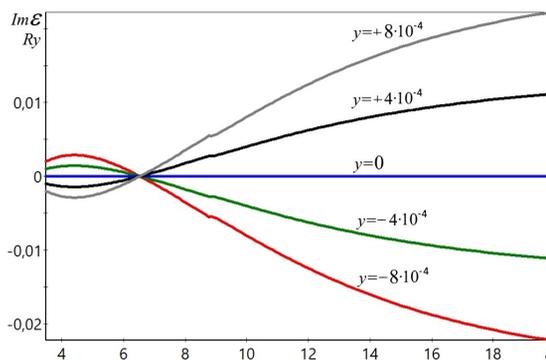


Рис. 2. Мнимая часть $\operatorname{Im}E$ полной энергии в ридбергах для электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки d в боровских радиусах при $x = 0$ и $y = 0, \pm 4 \cdot 10^{-4}, \pm 8 \cdot 10^{-4}$

область его применимости, был выбран литий — один из простейших и достаточно хорошо изученных химических элементов. Известно, что металлический литий в кристаллическом состоянии имеет ОЦК кристаллическую решетку. Поэтому для верификации предлагаемого подхода к описанию возбуждений все расчеты были выполнены для ОЦК-лития. В соответствии с изложенной выше идеей для моделирования процесса кристаллизации лития из газовой фазы будем изменять постоянную ОЦК решетки d от 20 до 3 боровских радиусов. Результаты соответствующих расчетов полной энергии при $x = 0$ и $y = 0, \pm 4 \cdot 10^{-4}, \pm 8 \cdot 10^{-4}$ представлены на рис. 1, 2.

Отметим, что действительная часть $\operatorname{Re}E$ полной энергии электронной системы ОЦК-лития на рис. 1, практически не зависящая от параметра возбуждения $|y| < 10^{-3}$, имеет минимум при значении $d = 6.55$ боровских радиусов. При этом же значе-

нии постоянной решетки d мнимая часть $\text{Im}E$ полной энергии на рис. 2 обращается в нуль при всех значениях $|y| < 10^{-3}$. Условие $\text{Im}E = 0$ указывает на неограниченно долго живущее состояние кристаллического ОЦК-лития только при значении постоянной решетки $d = 6.55$ боровских радиуса. При $d < 8.77$ боровских радиусов мнимая часть $\text{Im}E$ полной энергии плавно стремится к нулю (см. рис. 2), что указывает на увеличение времени жизни рассматриваемых неравновесных состояний, вплоть до равновесного значения постоянной решетки $d = 6.55$ боровских радиуса. Отметим, что значение постоянной решетки $d = 6.55$ боровских радиуса лежит в пределах разброса данных, полученных другими авторами (см. работы [11–13] для основного состояния ОЦК-лития). Таким образом, результаты расчетов указывают на стабилизацию системы кристаллического лития только при равновесном значении постоянной ОЦК-решетки.

Потенциальный барьер, равный $0.095Ry$, с максимумом при значении постоянной ОЦК-решетки $d = 8.77$ боровских радиусов (рис. 1) в возбужденном литии оказался заметно меньше энергии связи ОЦК-лития, равной $0.122Ry$ [33]. За пределами этого барьера при $d > 8.77$ боровских радиусов мнимая часть $\text{Im}E$ полной энергии тем больше отстоит от нуля, чем больше d (рис. 2). Таким образом, по мере увеличения значения параметра решетки d снижается вероятность образования кристаллического лития в ОЦК-структуре. Отметим, что в работе [34] были исследованы зарождающиеся структуры лития в плазменном потоке гелия, в том числе обнаружены метастабильные малые кластеры лития с межатомными расстояниями около 13 боровских радиусов, играющие важную роль в процессе нуклеации.

На рис. 3, 4 приведены энергетические состояния электронов симметрии $1s$, $2s$, $2p$ в неравновесном ОЦК-литии при $x = 0$ и $y = 8 \cdot 10^{-4}$. Прочие уровни энергии здесь не приводятся, чтобы не загромождать рисунок. Результаты расчета показывают, что при всех внешних состояниях электронов. Энергии E_{2s} и E_{2p} практически совпадают на рис. 3. Однако значения Γ_{2s} и Γ_{2p} , обратно пропорциональные времени жизни этих возбуждений, существенно различаются при $d < 8.77$ боровских радиусов на рис. 4.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках предложенной методики описания возбужденных состояний показано, что спектр элек-

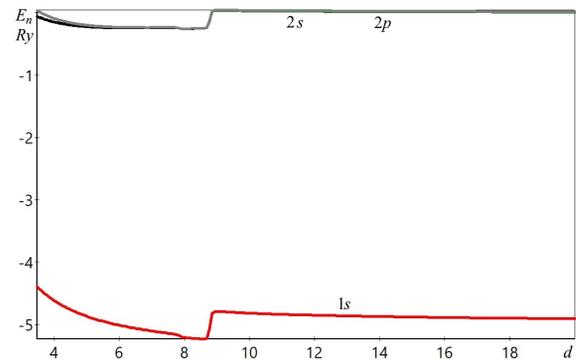


Рис. 3. Действительная часть E_n спектра электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки d в боровских радиусах при $x = 0$ и $y = 8 \cdot 10^{-4}$

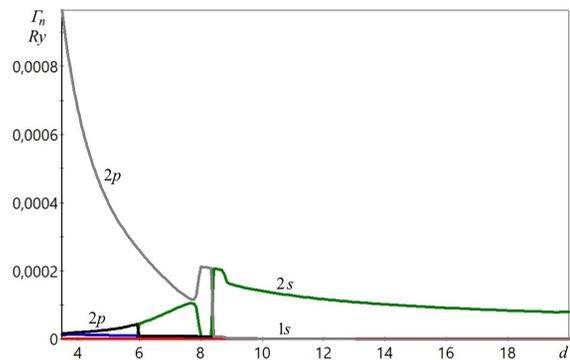


Рис. 4. Мнимая часть Γ_n спектра электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки d в боровских радиусах при $x = 0$ и $y = 8 \cdot 10^{-4}$

тронов в литии претерпевает незначительные изменения при больших значениях параметра решетки вплоть до 8.77 боровских радиусов. Времена жизни возбужденных электронов внешних состояний как s -, так и p -симметрии существенно различаются при значениях параметра решетки $d < 8.77$ боровских радиусов. Обнаружено неограниченно долго живущее стабильное кристаллическое состояние ОЦК-лития, почти не зависящее от мощности возбуждения при значении постоянной решетки, равной 6.55 боровских радиусов, соответствующем экспериментальному значению постоянной ОЦК решетки лития в основном состоянии.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. L. Companion, *J. Chem. Phys.* **50**, 1165 (1969).
2. B. T. Pickup, *Proc. Roy. Soc. London* **A333**, 69 (1973).
3. I. Boustani, W. Pewestorf, P. Fantucci et al., *Phys. Rev. B* **35**, 9437 (1987).
4. J. Blanc, V. Bonacic-Koutecky, M. Broyer et al., *J. Chem. Phys.* **96**, 1793 (1992).
5. A. M. Sapse, P. von R. Schleyer et al., *Lithium Chemistry: a Theoretical and Experimental Overview*, Wiley-Interscience, New York (1995).
6. R. Fournier, J. B. Y. Cheng, and A. Wong, *J. Chem. Phys.* **119**, 9444 (2003).
7. A. N. Alexandrova and A. I. Boldyrev, *J. Chem. Theory Comput.* **1**, 566 (2005).
8. B. G. A. Brito, E. L. Verde, G-Q. Hai et al., *J. Mol. Model.* **27**, 207 (2021).
9. L. Cheng and J. Yang, *J. Chem. Phys.* **138**, 141101 (2013).
10. B. G. A. Brito, L. Candido, J. N. T. Rabelo et al., *Chem. Phys. Lett.* **616-617**, 212 (2014).
11. W. Y. Ching and J. Callaway, *Phys. Rev. B* **9**, 5115 (1974).
12. J. Callaway, X. Zou, and D. Bagayoko, *Phys. Rev. B* **27**, 631 (1983).
13. K. Doll, N. M. Harrison, and V. R. Saunders, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 5007 (1999).
14. R. Rousseau and D. Marx, *Chem. Eur. J.* **6**, 2982 (2000).
15. В. А. Попов, *ЖЭТФ* **110**, 1474 (1996).
16. V. A. Popov, *Comput. Mater. Sci.* **14**, 67 (1999).
17. В. А. Попов, *ФТТ* **7**, 1185 (1998).
18. T. Kato, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer (1966).
19. L. Hedin, *Phys. Rev. A* **139**, 796 (1965).
20. L. Reining, *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **8**, e1344 (2017).
21. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
22. А. М. Сарры, М. Ф. Сарры, *ФТТ* **54**, 1237 (2012).
23. А. Н. Ипагов, *ЖЭТФ* **137**, 226 (2010).
24. H. Lischka, D. Nachtigallova, A. J. Aquino et al., *Chem. Rev.* **118**, 7293 (2018).
25. C. F. Fischer, M. Godefroid, T. Brage et al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 182004 (2016).
26. D. S. Levine, D. Hait, N. M. Tubman et al., *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2340 (2020).
27. А. В. Попов, *ФТТ* **50**, 759 (2008).
28. А. Попов, *Mol. Phys.* **117**, 1833 (2019).
29. А. В. Попов, *Опт. и спектр.* **93**, 5 (2002).
30. А. В. Попов, *Can. J. Phys.* **99**, 387 (2021).
31. А. Попов, *Int. J. Quant. Chem.* **119**, e26045 (2019).
32. А. Попов and В. Попов, *J. Math. Chem.* **58**, 2399 (2020).
33. С. В. Чернов, *Матем. моделирование* **1**, 36 (1989).
34. А. В. Попов, В. А. Попов, *ЖТФ* **89**, 1170 (2019).

АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КЛАССИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ. ПРИНЦИП ФЕРМА

П. С. Кондратенко^{}, А. В. Мухаряпова*

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
115191, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 мая 2022 г.,
после переработки 25 мая 2022 г.
Принята к публикации 26 мая 2022 г.

Разработана асимптотическая теория переноса примеси на основе адвекции–диффузии в средах с крупномасштабными неоднородностями. Выражение для концентрации сведено к одномерным интегралам вдоль характеристической линии, называемой траекторией концентрационного сигнала. Сама траектория определяется из вариационного принципа — аналога принципа Ферма в геометрической оптике, который приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка для единичного вектора касательной к траектории. Асимптотическая теория применима на расстояниях от источника примеси, значительно превышающих размер основной области ее распределения.

DOI: 10.31857/S0044451022110141
EDN: LAANFN

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно физическая модель переноса примеси зависит от конечного набора параметров. Если они являются постоянными, то концентрация примеси в зависимости от координат и времени, как правило, дается аналитическим выражением [1–3]. Однако на практике помимо мелко- и среднемасштабных неоднородностей, определяющих выбор модели, среда обладает крупномасштабными неоднородностями, так что параметры модели зависят от координат. В таком случае решение задачи о переносе требует проведения трудоемких и времязатратных численных расчетов. Отсюда возникает задача о построении аналитической теории переноса примеси в средах, обладающих крупномасштабными неоднородностями.

В работе [4] предложен новый подход, базирующийся на асимптотическом описании процессов переноса, который учитывает возможность крупномасштабной зависимости структурных характеристик среды от пространственных координат. Суть подхода базируется на двух моментах. Это, во-первых, то, что во всех известных физических мо-

делях асимптотики концентрации на больших расстояниях носят экспоненциальный характер. А во-вторых, согласно анализу, формирование концентрации на далеких расстояниях обусловлено коротковолновой частью механизма переноса. Формально, таким образом, ситуация напоминает ту, которая имеет место в волновой оптике или квантовой механике, когда становится применимым соответственно приближение геометрической оптики [5] или квазиклассическое приближение в квантовой механике [6]. В результате возникают значительные упрощения в задаче о процессах переноса. Задача сводится к уравнению в частных производных первого порядка. Концентрация примеси выражается через интегралы вдоль пространственной линии (квализлуча) — аналога луча в геометрической оптике. Один из интегралов определяет показатель экспоненты — квазиэйконал, устанавливающий главную зависимость концентрации от координат и времени в асимптотической области. Траектория самого квазизлуча определяется из вариационного принципа — аналога принципа Ферма.

В работе [4] действие асимптотического подхода продемонстрировано на модели случайной адвекции (см. [7, 8]), касающейся фрактальных сред с дальнедействующими корреляциями структурных характеристик. Указанный подход получил свое дальнейшее развитие в работах [9–12]. В работах [9, 10] была построена асимптотическая теория в изотропных

^{*} E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

и анизотропных неоднородных средах при переносе примеси посредством классической диффузии. Также в работе [9] при довольно жестком ограничении на параметры задачи была получена асимптотическая формула для концентрации при переносе примеси в неоднородной среде, когда наряду с диффузией действует и механизм адвекции.

В настоящей работе предложена асимптотическая теория переноса примеси посредством диффузии и адвекции без ограничительных условий на параметры задачи. Специфика и вытекающая из нее сложность поставленной задачи состоят в следующем: 1) в самой постановке задачи в каждой точке среды возникает выделенное направление, определяемое вектором скорости адвекции, что усложняет применение вариационного принципа; 2) отсутствие факторизации в квазиэйконеале зависимостей от координат и переменной Лапласа (аналога частоты излучения в геометрической оптике), что значительно усложняет проведение обратного преобразования Лапласа.

Дальнейшая структура статьи такова. В разд. 2 кратко сформулирована постановка задачи. Раздел 3 посвящен выводу формулы для квазиэйконеала. В разд. 4 получено выражение для предэкспоненты в выражении для концентрации в представлении Лапласа. В разд. 5 дан вывод асимптотической формулы для концентрации в пространственно-временном представлении. В Заключение кратко подведены итоги.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Концентрация примеси удовлетворяет известному уравнению

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}c - D\nabla c(\mathbf{r}, t)) = 0, \quad (1)$$

в котором коэффициент диффузии и скорость адвекции являются функциями координат, $D = D(\mathbf{r})$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Предполагаем, что жидкая компонента среды является несжимаемой, так что скорость адвекции удовлетворяют уравнению непрерывности:

$$\text{div} \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

Считаем, что в начальный момент времени вся примесь сосредоточена в одной точке, которая выбрана в качестве начала координат:

$$c(\mathbf{r}, 0) = N\delta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где N — полное число частиц примеси.

В представлении Лапласа

$$c_p(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dt c(\mathbf{r}, t)e^{-pt}$$

уравнение (1) с учетом (3) принимает вид

$$pc_p(\mathbf{r}) + \text{div}\{\mathbf{u}(\mathbf{r})c_p(\mathbf{r}) - D(\mathbf{r})\nabla c_p(\mathbf{r})\} = N\delta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Нас будет интересовать концентрация на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси, когда $r \gg R(t)$, где $R(t)$ — размер основной области ее локализации в момент времени t . Тогда решение уравнения (4) удобно представить в форме [4]

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) \exp(-\Gamma_p(\mathbf{r})), \quad (5)$$

где показатель экспоненты удовлетворяет неравенству $\Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1$. Благодаря ему в задаче возникает малый параметр

$$\xi = (|\nabla\Gamma_p| \min(L, |\mathbf{r}|))^{-1}, \quad \xi \ll 1. \quad (6)$$

Здесь L — характерный линейный масштаб неоднородности среды, определяемой координатной зависимостью величин $D(\mathbf{r})$ и $\mathbf{u}(\mathbf{r})$.

Имея в виду аналогию с геометрической оптикой, величину $\Gamma_p(\mathbf{r})$ назовем квазиэйконеалом. Подставляя (5) в (4), в нулевом порядке по малому параметру ξ приходим к уравнению в частных производных первого порядка для квазиэйконеала:

$$p - (\mathbf{u}(\mathbf{r})\nabla\Gamma_p(\mathbf{r}) - D(\nabla\Gamma_p(\mathbf{r}))^2) = 0. \quad (7)$$

Дальнейшая наша задача состоит в том, чтобы решить уравнение (7), затем, переходя в (4) к следующему порядку по параметру ξ , найти предэкспоненту $A_p(\mathbf{r})$ и, наконец, совершая обратное преобразование Лапласа в (5), определить асимптотическое выражение для концентрации в координатно-временном представлении.

3. КВАЗИЭЙКОНАЛ

Уравнение (7) является уравнением в частных производных первого порядка, как и уравнение эйконеала в геометрической оптике [5], и уравнение Гамильтона–Якоби в классической механике [13].

Из уравнения (7) вытекает формальное равенство

$$\nabla\Gamma_p \Rightarrow \mathbf{F} = -\frac{\mathbf{u}}{2D} + \nu n, \quad (8)$$

в котором

$$n(p, \mathbf{r}) = \sqrt{\left(\frac{\mathbf{u}}{2D}\right)^2 + \frac{p}{D}}, \quad (9)$$

а ν — вещественный безразмерный единичный вектор, $\nu^2 = 1$.

Решение уравнения (7) для функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ сводится линейному интегралу вдоль траектории концентрального сигнала — квазилуча:

$$\Gamma_p = \int_0^{\mathbf{r}} (d\mathbf{l}\mathbf{F}), \tag{10}$$

где \mathbf{r} — точка наблюдения,

$$d\mathbf{l} = \nu dl, \tag{11}$$

dl — дифференциальный элемент длины вдоль квазилуча.

Траектория квазилуча находится из вариационного принципа — аналога принципа Ферма:

$$\delta_l \Gamma_p = 0. \tag{12}$$

Здесь символ δ_l обозначает вариацию квазиэйконала Γ_p относительно возмущения траектории квазилуча. Равенство (12), на самом деле, означает, что в первом порядке по бесконечно малому изменению траектории величина интеграла (10) остается неизменной.

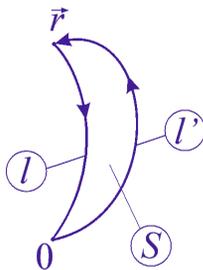


Рис. 1. Контур интегрирования при вычислении вариации $\delta_l \Gamma_p$

Изменение исходной траектории квазилуча состоит в том, что в каждой ее точке $\mathbf{r}(l)$ добавляется бесконечно малое возмущение $\delta\mathbf{r}(l)$. Обозначим исходную траекторию « l », а возмущенную « l' ». Тогда вариация $\delta_l \Gamma_p$ интеграла (10) представляется интегралом по замкнутому контуру, изображенному на рисунке. Применяя к этому интегралу теорему Стокса, имеем

$$\delta_l \Gamma_p = \Gamma_p^{(l')} - \Gamma_p^{(l)} = \oint d\mathbf{S} \text{rot}\mathbf{F}. \tag{13}$$

Здесь

$$d\mathbf{S} = [\delta\mathbf{r}(l) d\mathbf{l}] \tag{14}$$

— элемент площади поверхности, обрамленной контуром, который изображен на рисунке. Подставляя (14) в (13), находим

$$\delta_l \Gamma_p = \int_0^{\mathbf{r}} dl ([\delta\mathbf{r}(l)\nu] \text{rot}\mathbf{F}), \tag{15}$$

или

$$\delta_l \Gamma_p = \int_0^{\mathbf{r}} dl (\delta\mathbf{r}(l)[\nu \text{rot}\mathbf{F}]). \tag{16}$$

Отсюда с учетом (12) получаем уравнение для траектории квазилуча:

$$[\nu \text{rot}\mathbf{F}] = 0. \tag{17}$$

Подставляя сюда равенства (8) и (9), находим уравнение для единичного вектора ν касательной к квазилучу:

$$\frac{d\nu}{dl} = \frac{1}{n} (\nabla n - \nu(\nu \nabla n) - [\nu \text{rot} \frac{\mathbf{u}}{2D}]). \tag{18}$$

Здесь при выводе было использовано соотношение

$$\begin{aligned} [\nu \text{rot}(\nu n)] &= n[\nu \text{rot}\nu] + [\nu[\nabla n \nu]] = \\ &= -n \frac{d\nu}{dl} + \nabla n - \nu(\nu \nabla n). \end{aligned} \tag{19}$$

Таким образом, величина квазиэйконала определяется выражением (10), в котором интегрирование происходит по траектории квазилуча, определяемой уравнением (18) для единичного вектора касательной к этой траектории.

4. ПРЕДЭКСПОНЕНТА

Уравнение для предэкспоненты получается при подстановке выражения (5) в уравнение (4) в первом порядке малости по параметру ξ :

$$\begin{aligned} 2D(\mathbf{r})\nabla_p \nabla A_p(\mathbf{r}) + A_p(\mathbf{r})\nabla_p \nabla D(\mathbf{r}) + \\ + D(\mathbf{r})A_p(\mathbf{r})\Gamma_p = 0. \end{aligned} \tag{20}$$

С учетом равенства (8) оно сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка, которое является линейным:

$$\frac{d}{dl} \ln(A_p^2 D n) + \text{div} \nu = 0, \tag{21}$$

где введено обозначение

$$\frac{d}{dl} \equiv (\nu \nabla). \tag{22}$$

Символ d/dl обозначает линейную производную вдоль траектории квазилуча.

Решение уравнения (21) имеет вид

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{B(p)}{l(\mathbf{r})\sqrt{n(\mathbf{r})D(\mathbf{r})}} \exp\left[-\int_0^{\mathbf{r}} dl\left(\frac{1}{2}\operatorname{div}\boldsymbol{\nu} - \frac{1}{l}\right)\right]. \quad (23)$$

Здесь $B(p)$ — постоянная (в отношении зависимости от координаты) интегрирования, l — длина квазилуча от начала координат до точки интегрирования, $l(\mathbf{r})$ — полная длина квазилуча от начала координат до точки наблюдения \mathbf{r} . При выводе формулы (23) мы воспользовались равенствами

$$\boldsymbol{\nu} = \frac{\mathbf{r}}{r}\Big|_{r \rightarrow 0}, \quad \operatorname{div}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \frac{2}{r}. \quad (24)$$

Постоянную интегрирования $B(p)$ в (23) определим из условия, что при малых значениях координаты \mathbf{r} , когда $r \ll L$, где L — характерный масштаб неоднородности среды, выражение для предэкспоненты (23) должно перейти в соответствующие выражения для однородной среды со значениями коэффициента диффузии и скорости:

$$D(\mathbf{r}) = D(0), \quad \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(0).$$

Вычисленная в Приложении предэкспонента для однородной среды определяется формулой (А.6). Сравнивая ее с (23), приходим к окончательному результату для предэкспоненты в выражении для концентрации в представлении Лапласа:

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{N\sqrt{n(p,0)}}{4\pi l(p,\mathbf{r})\sqrt{n(p,\mathbf{r})D(0)D(\mathbf{r})}}. \quad (25)$$

Здесь было учтено, что при малых значениях координаты $r \ll L$ имеет место приближенное равенство

$$l(p,\mathbf{r}) \cong r. \quad (26)$$

5. КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ

Концентрация примеси в координатно-временном представлении получается из выражения (5) путем обратного преобразования Лапласа:

$$c(\mathbf{r},t) = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} A_p(\mathbf{r}) \exp[-\Gamma_p(\mathbf{r}) + pt], \quad (27)$$

$$\operatorname{Re} a > 0.$$

Интеграл здесь с учетом неравенства $\Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1$ берется методом стационарной фазы. Принимая во внимание равенство (25), из (27) получаем выражение для концентрации:

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N\sqrt{n(p_0,0)}}{4\pi l(p_0,\mathbf{r})\sqrt{2\pi|\Gamma''_{p_0}(\mathbf{r})|n(p_0,\mathbf{r})D(0)D(\mathbf{r})}} \times \exp[-\Gamma_{p_0}(\mathbf{r}) + p_0 t]. \quad (28)$$

Здесь введены следующие обозначения: $p_0 = p_0(\mathbf{r},t)$ — стационарная точка, определяемая из условия

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial p}\Big|_{p=p_0} = t, \quad (29)$$

и

$$\Gamma''_{p_0}(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2 \Gamma_p}{\partial p^2}\Big|_{p=p_0} \quad (30)$$

— вторая производная квазиэйконала по переменной Лапласа в стационарной точке.

При дифференцировании квазиэйконала Γ_p следует учитывать зависимость от переменной Лапласа не только самого подынтегрального выражения в (10), но и траектории квазилуча. Поэтому

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial p} = \int_0^{\mathbf{r}} dl \frac{\partial n}{\partial p} + \int_0^{\mathbf{r}} \left(dl \frac{\delta \Gamma_p}{\delta \mathbf{r}(l)} \frac{d\delta \mathbf{r}(l)}{dp} \right).$$

С учетом условия минимума (12) второе слагаемое справа здесь обращается в нуль, и тогда имеем

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial p} = \int_0^{\mathbf{r}} dl \frac{\partial n}{\partial p}. \quad (31)$$

Соответственно, уравнение (29) для стационарной точки приобретает вид

$$\int_0^{\mathbf{r}} dl \frac{\partial n}{\partial p}\Big|_{p=p_0} = t. \quad (32)$$

Интегрирование здесь происходит по экстремальной траектории, определяемой уравнением (18).

Перейдем к вычислению второй производной по переменной Лапласа от квазиэйконала. С учетом равенства (31) имеем

$$\frac{\partial^2 \Gamma_p}{\partial p^2} = \frac{\partial}{\partial p} \int_0^{\mathbf{r}} dl \frac{\partial n}{\partial p}. \quad (33)$$

Теперь уже при взятии второй производной по переменной p , в отличие от (31), вклад от дифференцирования по возмущению траектории квазилуча

не обращается в нуль, поскольку под знаком интеграла стоит не $(d\mathbf{F})$, а $dl \partial n / \partial p$. И тогда

$$\frac{\partial^2 \Gamma_p}{\partial p^2} = \int_0^{\mathbf{r}} dl \left[\frac{\partial^2 n}{\partial p^2} + \left(\nabla \frac{\partial n}{\partial p} \frac{\partial \delta \mathbf{r}}{\partial p} \right) \right] + \int_0^{\mathbf{r}} dl \left(\frac{\partial n}{\partial p} \boldsymbol{\nu} \frac{d}{dl} \frac{\partial \delta \mathbf{r}}{\partial p} \right). \quad (34)$$

Здесь $\delta \mathbf{r}$ является возмущением экстремальной траектории квазилуча, обусловленное переходом $p \rightarrow p + \delta p$. Учитывая, что невозмущенная траектория определяется выражением

$$\mathbf{r}(l) = \int_0^l dl' \boldsymbol{\nu}(l'), \quad (35)$$

для производной от $\delta \mathbf{r}$ по переменной Лапласа получаем выражение

$$\frac{\partial \delta \mathbf{r}(l)}{\partial p} = \int_0^l dl' \boldsymbol{\mu}(l'), \quad (36)$$

где обозначено

$$\boldsymbol{\mu}(l) \equiv \frac{\partial \boldsymbol{\nu}(l)}{\partial p}. \quad (37)$$

Поэтому второе слагаемое в правой части выражения (34) принимает вид

$$\int_0^{\mathbf{r}} dl \left(\frac{\partial n}{\partial p} \boldsymbol{\nu} \frac{d}{dl} \frac{\partial \delta \mathbf{r}}{\partial p} \right) = \int_0^{\mathbf{r}} dl \frac{\partial n}{\partial p} (\boldsymbol{\nu} \boldsymbol{\mu}). \quad (38)$$

Но из свойства $\boldsymbol{\nu}^2 = 1$ вытекает равенство

$$(\boldsymbol{\nu}(l) \boldsymbol{\mu}(l)) = 0. \quad (39)$$

Отсюда следует

$$\int_0^{\mathbf{r}} dl \left(\frac{\partial n}{\partial p} \boldsymbol{\nu} \frac{d}{dl} \frac{\partial \delta \mathbf{r}}{\partial p} \right) = 0. \quad (40)$$

С учетом равенств (36) и (40) из (30) и (34) получаем

$$\Gamma''_{p_0}(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} dl \left[\frac{\partial^2 n}{\partial p^2} + \nabla \frac{\partial n}{\partial p} \int_0^l dl' \boldsymbol{\mu}(l') \right]_{p=p_0}. \quad (41)$$

Уравнение для вектора $\boldsymbol{\mu}(l)$, определенного равенством (37), получается дифференцированием по переменной Лапласа уравнения (18) для

единичного вектора касательной к оптимальной траектории $\boldsymbol{\nu}$:

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dl} = \frac{1}{n} \left(\nabla_{\perp} \frac{\partial n}{\partial p} - \boldsymbol{\mu} \frac{dn}{dl} - \boldsymbol{\nu} (\boldsymbol{\mu} \nabla n) - \frac{\partial n}{\partial p} \frac{d\boldsymbol{\nu}}{dl} - \left[\boldsymbol{\mu} \text{rot} \frac{\mathbf{u}}{2D} \right] \right). \quad (42)$$

Здесь использовано обозначение

$$\nabla_{\perp} \equiv \nabla - \boldsymbol{\nu} \frac{d}{dl} = \nabla - \boldsymbol{\nu} (\boldsymbol{\nu} \nabla). \quad (43)$$

Дополнительным условием, требуемым для исключения векторной постоянной интегрирования уравнения (42), является равенство

$$\int_0^{\mathbf{r}} dl \boldsymbol{\mu}(l) = 0. \quad (44)$$

Оно вытекает из требования, чтобы при изменении переменной Лапласа конечные точки квазилуча, 0 и \mathbf{r} , оставались неизменными.

Таким образом, выражение (28) вместе с уравнением (32), равенством (41) а также уравнениями (18), (42) и дополнительным условием (44) представляют собой решение задачи об асимптотическом выражении для концентрации примеси при переносе посредством классической адвекции–диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итогом работы является асимптотическая теория переноса примеси посредством адвекции–диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями.

Путем применения асимптотического подхода [4] на расстояниях, значительно превосходящих размер основной области локализации примеси, задача сведена к уравнению в частных производных первого порядка. Это позволило на основе действующего в таких случаях канонического формализма (формализм Гамильтона–Якоби в классической механике) концентрацию примеси, испытывающей адвекцию–диффузию в неоднородной среде, представить в квадратурах – через интегралы вдоль линии, условно названной траекторией квазилуча. Эта последняя определяется из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике или принципа Мопертюи в классической механике.

По сравнению с прямыми численными расчетами на основе уравнения в частных производных второго порядка, в расчетах переноса примеси в неоднородной среде, базирующихся на разработанной здесь асимптотической теории, наряду с их простотой ожидается значительная экономия расчетного времени.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Цель этого раздела состоит в том, чтобы в представлении Лапласа найти концентрацию примеси $c_p(\mathbf{r})$, удовлетворяющую уравнению (1) с начальным условием (3), при не зависящих от координат коэффициентах диффузии и скорости адвекции:

$$D(\mathbf{r}) = D(0), \quad \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(0). \quad (\text{A.1})$$

Дополнительный переход к представлению Фурье

$$c_{p\mathbf{k}} = \int d^3r c_p(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$$

сводит поставленную задачу к алгебраической, решением которой является выражение

$$c_{p\mathbf{k}} = \frac{N}{p + i(\mathbf{u}(0)\mathbf{k}) + D(0)k^2}. \quad (\text{A.2})$$

Применение к нему обратного преобразования Фурье дает

$$c_p(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{N}{p + i(\mathbf{u}(0)\mathbf{k}) + D(0)k^2} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}, \quad (\text{A.3})$$

откуда после перехода к новой переменной интегрирования $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + i\mathbf{u}(0)/2D(0)$ получим

$$c_p(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{N}{p + \left(\frac{\mathbf{u}(0)}{2D(0)}\right)^2 + D(0)k'^2} \times \exp\left[\frac{(\mathbf{u}(0)\mathbf{r})}{2D(0)} + i(\mathbf{k}'\mathbf{r})\right]. \quad (\text{A.4})$$

Выполнение интегрирования сначала по угловым переменным вектора \mathbf{k} а затем, с помощью теории вычетов, по его абсолютной величине приводит к результату

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi D(0)r} \times \exp\left[\frac{(\mathbf{u}(0)\mathbf{r})}{2D(0)} - r\sqrt{\left(\frac{\mathbf{u}(0)}{2D(0)}\right)^2 + \frac{p}{D(0)}}\right]. \quad (\text{A.5})$$

Отсюда находим предэкспоненту в выражении для концентрации при условии (A.1):

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi D(0)r}. \quad (\text{A.6})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
2. M. B. Isichenko, Rev. Mod. Phys. **29**, 961 (1992).
3. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН **189**, 691 (2019).
4. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2004).
7. A. M. Dykhne, I. L. Dranikov, P. S. Kondratenko, and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **72**, 061104 (2005).
8. P. S. Kondratenko and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **75**, 051102 (2007).
9. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, ЖЭТФ **157**, 703 (2021).
10. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, Ю. Н. Обухов, ЖЭТФ **159**, 719 (2021).
11. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, ЖЭТФ **159**, 724 (2021).
12. P. S. Kondratenko, A. L. Matveev, and A. D. Vasiliev, Eur. Phys. J. B **94**, 50 (2021).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Физматлит, Москва (2001).

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВАКАНСИЙ, ОБРАЗОВАННЫХ КАСКАДОМ ВЫБИТЫХ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Е. В. Метелжин^{*}, *М. В. Лебедева*^а

^а *Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,
124047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 мая 2022 г.,
после переработки 25 мая 2022 г.
Принята к публикации 26 мая 2022 г.

На основе решения кинетического уравнения Больцмана получено выражение, описывающее пространственное распределение вакансий, образованных каскадом атомных столкновений в твердом теле. Это выражение представлено в простом безразмерном виде, зависящем от единственного безразмерного параметра $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$ (E_0 — энергия первично выбитых атомов, ε_d — энергия связи атомов в узлах решетки). При решении кинетического уравнения предполагалось, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной.

DOI: 10.31857/S0044451022110153
EDN: LABWVD

1. ВВЕДЕНИЕ

Элементы конструкций ядерных реакторов и термоядерных установок работают в условиях продолжительного радиационного облучения. Это приводит к изменению их физических, упругих и прочностных характеристик. Повреждаемость материалов нейтронным облучением во многом определяет ресурс эксплуатации ядерных установок. Понимание физических основ протекающих процессов необходимо для получения радиационно-стойких конструкционных материалов, удовлетворяющих потребности ядерной техники.

Облучение твердых тел быстрыми нейтронами приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую некоторой пороговой величины (ε_d), вылетают из своих равновесных положений. В дальнейшем обмен энергии между движущимися атомами и атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводит к появлению новых поколений выбитых атомов. В результате возникает так на-

зываемый каскад атомных столкновений. При развитии каскада столкновений в твердом теле образуется целый комплекс дефектов (вакансии и межузельные атомы, кластеры и т. д.), определяющих степень повреждения материала и его дальнейшие физические свойства [1–5]. В связи с этим исследование процессов, протекающих в каскаде атомных столкновений, представляет большой интерес.

Описание развития каскадов в твердом теле и сопровождающих его процессов представляет собой достаточно сложную задачу. В связи с этим для ее решения в подавляющем большинстве случаев используется компьютерное моделирование [2, 6–8]. Аналитические решения соответствующей задачи на основе линейного уравнения Больцмана существуют в исключительных случаях. Тем не менее они также представляют значительный интерес, поскольку дают наглядное представление о протекающем процессе и его особенностях и могут быть использованы для тестирования достаточно сложных численных расчетов.

Исследованию развития каскадов атомных столкновений в твердом теле на основе аналитического решения кинетического уравнения Больцмана было посвящено достаточно большое количество работ [9–22]. В [9, 10] с помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния было получе-

^{*} E-mail: sitech47@mail.ru

но стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов для произвольного потенциала межатомного взаимодействия. В работах [11–13] анализировалась возможность образования субкаскадов — ряда неперекрывающихся между собой областей в процессе развития каскада атомных столкновений. В работе [14] была разработана теоретическая модель для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах, основанная на использовании расширенного толкования понятия первично выбитый атом (ПВА). В [14] был сформулирован критерий для определения пороговой энергии образования субкаскадов в твердом теле и получены формулы для определения средних размеров и их числа в зависимости от энергии ПВА. На основе результатов, представленных в [14], в работе [15] были проведены численные расчеты для конкретных материалов, согласующиеся с экспериментальными данными.

В работе [16] была рассчитана функция распределения по энергиям, описывающая стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов при степенном потенциале взаимодействия ($U \sim 1/r^n$ [17]) с учетом энергии связи атомов в узлах решетки.

В работах [18–20] было получено точное решение кинетического уравнения Больцмана при условии, что материал состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а энергии связи атомов в узлах решетки не учитывалась ($\varepsilon_d = 0$). В [18, 19] было получено решение, описывающее нестационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов. В [18] предполагалось, что сечение рассеяния является постоянной величиной ($\Sigma = \text{const}$), а в [19] оно полагалось обратно пропорциональным скорости ($\Sigma = \Sigma_0/v$; $\Sigma_0 = \text{const}$). В работе [20] с использованием P_1 и диффузионно-транспортного приближений было получено нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада выбитых атомов (при $\Sigma = \text{const}$).

При тех же условиях в работах [21, 22] было получено решение модельного уравнения Больцмана с учетом энергии связи атомов в узлах решетки ($\varepsilon_d \neq 0$). В [21] сечение рассеяния полагалось обратно пропорциональным скорости ($\Sigma = \Sigma_0/v$; $\Sigma_0 = \text{const}$), а в [22] оно считалось постоянной величиной ($\Sigma = \text{const}$).

В настоящей работе на основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана (см. [22])

получено выражение, описывающее пространственное распределение вакансий, образующихся при распространении каскада движущихся атомов в твердом теле. Это выражение представлено в простом безразмерном виде, зависящем от единственного безразмерного параметра $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$ (E_0 — энергия первично выбитых атомов (ПВА)). При решении кинетического уравнения предполагалось, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим распространение каскада выбитых атомов в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее этот процесс, при использовании P_1 и диффузионно-транспортного приближений имеет следующий вид [22, 23]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma(E) \Phi(E, \mathbf{r}, t) = \\ = \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E) \Sigma(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ + \int_{E+\varepsilon_d}^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d) \Sigma(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \quad (1) \end{aligned}$$

где $f(E, \mathbf{r}, t) dE d\mathbf{r}$ — число атомов с энергией E в интервале dE в момент времени t в объеме $d\mathbf{r}$ около точки \mathbf{r} ;

$$\Phi(E, \mathbf{r}, t) = v f(E, \mathbf{r}, t)$$

— поток движущихся атомов; v — их скорость;

$$P(E' \rightarrow E) = \Sigma(E' \rightarrow E) / \Sigma(E')$$

— индикатриса рассеяния (вероятность того, что движущийся атом с энергией E' в результате рассеяния перейдет в единичный интервал энергий вблизи значения E); $\Sigma(E' \rightarrow E)$ и $\Sigma(E')$ — дифференциальное и полное макроскопические сечения рассеяния атомов;

$$\Sigma_{tr}(E) = (1 - \mu_l) \Sigma(E)$$

— транспортное сечение; μ_l — средний косинус угла рассеяния частицы в лабораторной системе координат; Δ_r — оператор Лапласа; $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака; E_0 — начальная энергия первично выбитых

атомов (ПВА); N_0 — их полное число; ε_d — энергия связи атомов в узлах решетки. Источник ПВА считается изотропным, точечным, импульсным и монохроматическим.

Первый интеграл, стоящий в правой части кинетического уравнения (1), описывает переход в результате рассеяния движущегося атома с энергией E' в состояние с энергией E . Второй интеграл описывает образование выбитого атома с энергией E , когда движущийся атом перешел в состояние с энергией $(E' - E - \varepsilon_d)$. Точное решение уравнения (1), как отмечалось выше, было получено в работе [20] для упругого, сферически-симметричного рассеяния в системе центра масс без учета энергии связи атомов в узлах решетки ($\varepsilon_d = 0$).

Из уравнения (1) вытекают следующие законы сохранения полного числа частиц и энергии [22]:

$$\frac{dN}{dt} = \int_{\varepsilon_d}^{E_0} dE p(E) \Sigma(E) \int d\mathbf{r} \Phi(E, \mathbf{r}, t), \quad (2)$$

$$\frac{dE(t)}{dt} = - \int_0^{E_0} dE \Delta_0(E) \Sigma(E) \int d\mathbf{r} \Phi(E, \mathbf{r}, t), \quad (3)$$

где

$$N(t) = \int_0^{E_0} dE \int d\mathbf{r} f(E, \mathbf{r}, t), \quad (4)$$

$$E(t) = \int_0^{E_0} dE E \int d\mathbf{r} f(E, \mathbf{r}, t),$$

$$p(E) = \int_0^{E-\varepsilon_d} P(E \rightarrow E') dE', \quad (5)$$

а функция $\Delta_0(E)$ определяется следующими выражениями:

$$\Delta_0(E) = \Delta(E) = \int_0^E dE' (E - E') P(E \rightarrow E') \quad (6)$$

при $E \leq \varepsilon_d$ и

$$\Delta_0 = p(E) \varepsilon_d + \int_{E-\varepsilon_d}^E dE' (E - E') P(E \rightarrow E') \quad (7)$$

при $E \geq \varepsilon_d$. Величина $p(E)$ представляет собой вероятность, что движущийся атом с энергией E передает атому решетки энергию, большую ε_d . Очевидно, что при $E \leq \varepsilon_d$ величина $p(E)$ обращается

в нуль. Сами законы сохранения (2), (3) подробно обсуждаются в [22].

Следуя работе [22], упростим уравнение (1), потребовав, чтобы из упрощенного уравнения вытекали те же законы сохранения, что и из уравнения (1) (см. (2)–(7)). В таком случае для упрощенного уравнения при $E \geq \varepsilon_d$ получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \\ & + \Sigma(E) \left[\frac{\Delta_0(E)}{\Delta(E)} + p(E) \right] \Phi(E, \mathbf{r}, t) = \\ & = \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E) \Sigma(E') \left[\frac{\Delta_0(E')}{\Delta(E')} + p(E') \right] \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E' - E) \Sigma(E') p(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t). \quad (8) \end{aligned}$$

3. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Далее будем считать, что рассеяние движущихся атомов на покоящихся является сферически-симметричным в системе центра инерции и описывается индикатрисой рассеяния, имеющей следующий вид [23]:

$$P(E' \rightarrow E) = \frac{1}{E'} \Theta(E' - E), \quad (9)$$

где $\Theta(z)$ — единичная функция Хевисайда. В таком случае при $E \geq \varepsilon_d$ уравнение (8) принимает следующий вид (см. (5)–(7), (9)):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v\Sigma} \frac{\partial \Psi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \\ & - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Psi(\mathbf{r}, E, t) + \left[1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right] \Psi(E, \mathbf{r}, t) = \\ & = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'} \right)^2 \right] \Psi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \quad (10) \end{aligned}$$

где $\Psi(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma(E) \Phi(\mathbf{r}, E, t)$ — плотность соударений и $\mu_l = 2/3$ [23].

Применяя к уравнению (10) преобразование Лапласа по времени и преобразование Фурье по пространственным координатам:

$$\tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \int_0^\infty dt \exp(-st) \times \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dx dy dz \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, E, t), \quad (11)$$

получим

$$\left[\frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right] \tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right] \Psi(E', \mathbf{k}, s) + N_0 \delta(E - E_0). \quad (12)$$

Выделим в решении уравнения (12) нерассеянное излучение:

$$\tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{\left[1 + \frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]}. \quad (13)$$

Подставив (13) в (12) и положив $\Sigma = \text{const}$, получим уравнение для определения функции $\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s)$:

$$\frac{d}{dE} \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) = - \frac{\left[2 - \frac{s}{2v\Sigma} - \frac{\varepsilon_d}{E} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]}{E \left[1 + \frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]} \times \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s), \quad (14)$$

решение которого легко найти (см. [21, 22]):

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) = \frac{N_0 \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]}{E_0 \left[1 + \frac{s}{v_0\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E_0} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]^2} \times \exp \left\{ \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \frac{s}{2v'\Sigma} - \frac{\varepsilon_d}{E'} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right] \right\}. \quad (15)$$

Функция (15) представляет собой образ Лапласа-Фурье от нестационарного пространственно-энергетического распределения плотности соударений каскада движущихся атомов в твердом

теле. Найдем образ Фурье от пространственно-энергетического распределения полной плотности соударений, которые испытал каскад движущихся атомов при своем развитии (при $E \geq \varepsilon_d$):

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}) = \int_0^\infty dt \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dx dy dz \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}, E, t). \quad (16)$$

Учитывая (11), найдем (см. (15))

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}) = \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s = 0) = \frac{N_0 \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]}{E_0 \left[1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E_0} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]^2} \times \exp \left\{ \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \frac{\varepsilon_d}{E'} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right] \right\}. \quad (17)$$

Вернувшись к уравнению (12), можно заметить, что выражение (17) представляет собой образ Фурье от пространственно-энергетического распределения плотности соударений каскада движущихся атомов, образующегося от точечного стационарного источника.

Вычисление оригинала по формуле (17) связано с определенными математическими трудностями. В связи с этим функцию $\Psi_0(E, \mathbf{r})$ будем искать в следующем виде:

$$\Psi_0(E, \mathbf{r}) = A(E) \exp[-\alpha(E)r^2]. \quad (18)$$

Параметры $A(E)$ и $\alpha(E)$ найдем из условия, чтобы пространственные моменты от функции (18),

$$\Psi_0(E) = \int d\mathbf{r} \Psi_0(E, \mathbf{r}), \quad (19)$$

$$\langle r^2(E) \rangle = \frac{1}{\Psi_0(E)} \int d\mathbf{r} r^2 \Psi_0(E, \mathbf{r}), \quad (20)$$

совпадали с аналогичными величинами, полученными из выражения (17). Используя (18), найдем

$$A(E) = \left[\frac{3}{2\pi \langle r^2(E) \rangle} \right]^{\frac{3}{2}} \Psi_0(E), \quad (21)$$

$$\alpha^2(E) = \frac{3}{2 \langle r^2(E) \rangle}.$$

Пространственные моменты (19), (20) можно определить с помощью выражения (17) по формулам

$$\Psi_0(E) = \tilde{\Psi}_0(E, k = 0),$$

$$\langle r^2(E) \rangle = - \left\{ \frac{[\Delta_k \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k})]}{\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k})} \right\}_{k=0}, \quad (22)$$

где Δ_k — оператор Лапласа в k -пространстве. Проведя вычисления по формулам (22), получим выражения для пространственных моментов в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \Psi'(\varepsilon) &= \Psi_0(E) \frac{E_0}{N_0} = \\ &= \varepsilon \varepsilon_0 \frac{(2\varepsilon_0^2 - 1)}{(\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1)^2} \left(\frac{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right)^{3/2} \times \\ &\times \left[\left(\frac{2\varepsilon_0 + 1 + \sqrt{5}}{2\varepsilon_0 + 1 - \sqrt{5}} \right) \left(\frac{2\varepsilon + 1 - \sqrt{5}}{2\varepsilon + 1 + \sqrt{5}} \right) \right]^{3/(2\sqrt{5})}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle &= \Sigma \Sigma_{tr} \langle r^2(E) \rangle = \\ &= \frac{4\varepsilon_0^2}{(\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1)} + 2 \ln \left(\frac{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right) + \\ &+ \frac{6}{5} \left(\frac{4\varepsilon_0 - 3}{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1} - \frac{4\varepsilon - 3}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right) - \\ &- \frac{16}{5\sqrt{5}} \ln \left[\left(\frac{2\varepsilon_0 + 1 - \sqrt{5}}{2\varepsilon_0 + 1 + \sqrt{5}} \right) \left(\frac{2\varepsilon + 1 + \sqrt{5}}{2\varepsilon + 1 - \sqrt{5}} \right) \right], \end{aligned} \quad (24)$$

где $\varepsilon = E/\varepsilon_d$ и $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$.

С учетом сказанного выше окончательное выражение для пространственно-энергетического распределения полной плотности столкновений каскада движущихся атомов, испущенных импульсным источником (см. (10), (16)), можно представить в следующем безразмерном виде (см. (18), (21)):

$$\begin{aligned} \Psi'_0(\varepsilon, \rho) &= \Psi_0(E, \mathbf{r}) \frac{E_0}{N_0} \left(\frac{1}{\Sigma \Sigma_{tr}} \right)^{3/2} = \\ &= \Psi'(\varepsilon) \left[\frac{3}{2\pi \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{3\rho^2}{2\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right], \end{aligned} \quad (25)$$

где $\rho = r\sqrt{\Sigma \Sigma_{tr}}$, а функции $\Psi'(\varepsilon)$ и $\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle$ определяются выражениями (23), (24).

Выражение (25) можно трактовать и несколько иначе. Положив в уравнении (12) $s = 0$, получим, что оно описывает пространственно-энергетическое распределение плотности столкновений каскада движущихся атомов, испускаемых стационарным точечным моноэнергетическим источником (в этом случае N_0 — число ПВА, испускаемых в единицу времени).

Пространственное распределение плотности вакансий, образовавшихся при распространении каскада движущихся атомов от импульсного источника, очевидно имеет следующий вид:

$$n_v(r) = \int_{\varepsilon_d}^{E_0} dE p(E) \Psi_0(E, \mathbf{r}). \quad (26)$$

Используя выражение (25), эту величину можно представить в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned} n'_v(\rho) &= n_v(r) \frac{1}{N_0} \left(\frac{1}{\Sigma \Sigma_{tr}} \right)^{3/2} = \varepsilon_0 \int_1^{\varepsilon_0} d\varepsilon \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) \Psi'(\varepsilon) \times \\ &\times \left[\frac{3}{2\pi \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{3\rho^2}{2\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Проанализируем полученные результаты. На рис. 1 приведен график функции $\Psi'(\varepsilon)$, построенный по формуле (23) (см. кривую 1). Кроме того, что она является нормирующим множителем в выражении (25), эта функция представляет самостоятельный интерес. Она описывает энергетическое распределение каскада выбитых атомов, распространяющихся от однородно распределенного в пространстве стационарного моноэнергетического источника ПВА (см. (12) при $s = 0$ и $k = 0$). Кривой 2 на этом рисунке представлен график той же функции при $\varepsilon_d = 0$:

$$[\Psi'(\varepsilon)]_{\varepsilon_d=0} = 2\varepsilon_0^2/\varepsilon^2. \quad (28)$$

Видно, что учет энергии связи приводит к более медленному росту функции при $\varepsilon \rightarrow 1$, что обусловлено учетом потерь энергии на выбивание атомов из узлов решетки. Расчеты, представленные на рис. 1, проводились при $\varepsilon_0 = 10^4$.

На рис. 2 кривой 1 представлен график зависимости от энергии среднего квадрата длины замедления, построенный по формуле (24). Кривой 2 здесь представлена та же зависимость при $\varepsilon_d = 0$:

$$[\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle]_{\varepsilon_d=0} = 4 + 4 \ln(\varepsilon_0/\varepsilon). \quad (29)$$

Видно, что учет энергии связи приводит к меньшим значениям величины $\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle$ при энергиях ε , близких к единице. Здесь так же полагалось, что $\varepsilon_0 = 10^4$.

Проинтегрировав функцию (27) по всему пространству, мы, очевидно, получим выражение для каскадной функции (см. в [22] формулы (29)–(31)):

$$4\pi \int_0^\infty d\rho \rho^2 n'_v(\rho) = \varepsilon_0 \int_1^{\varepsilon_0} d\varepsilon \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) \Psi'(\varepsilon) = \nu(\varepsilon_0). \quad (30)$$

В таком случае функция $\tilde{n}_v(\rho) = n'_v(\rho)/\nu(\varepsilon_0)$ представляет собой относительное распределение в пространстве плотности вакансий. Графики простран-

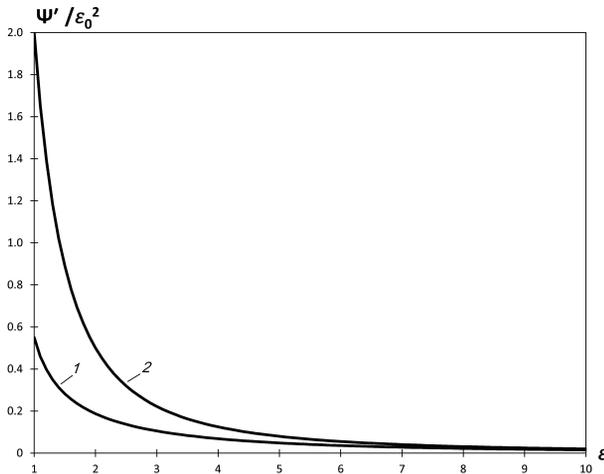


Рис. 1. Зависимость функции $\Psi'(\epsilon)$ от энергии при $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 1 — $\epsilon_d \neq 0$, кривая 2 — $\epsilon_d = 0$)

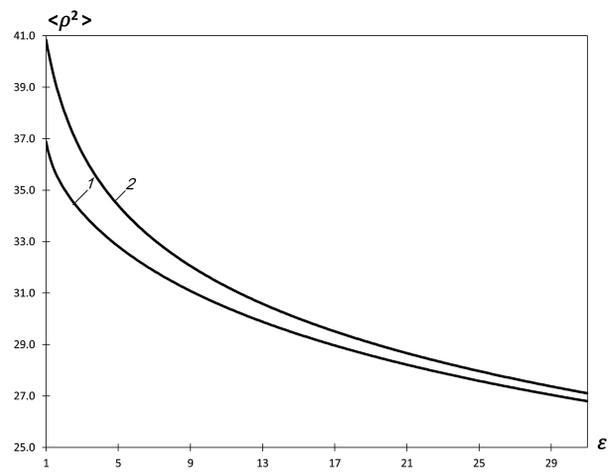


Рис. 2. Зависимость среднего квадрата длины замедления от энергии $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 1 — $\epsilon_d \neq 0$, кривая 2 — $\epsilon_d = 0$)

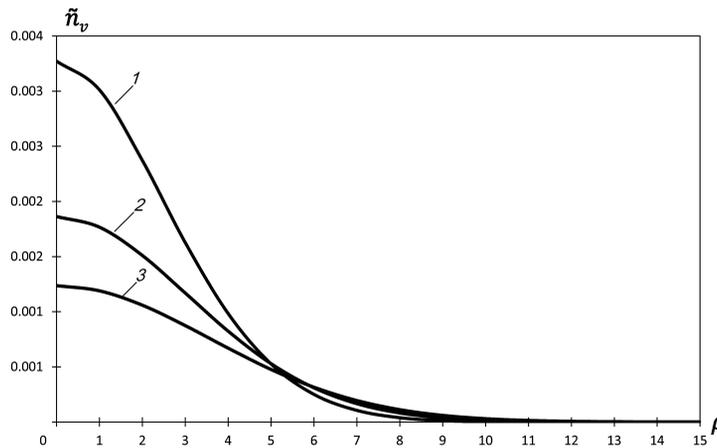


Рис. 3. Пространственное распределение относительной плотности вакансий при $\epsilon_0 = 10^3$ (кривая 1); $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 2); $\epsilon_0 = 10^5$ (кривая 3)

ственного распределения этой функции при различных значениях ϵ_0 представлены на рис. 3. Из приведенных результатов следует, что с увеличением начальной энергии ПВА образование вакансий интенсивнее происходит на больших расстояниях от источника, что обусловлено соответствующим ростом среднего квадрата длины замедления.

5. ВЫВОДЫ

В работе рассматривается развитие каскада выбитых атомов в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Рассеяние атомов предполагается упругим и сферически-симметричным в системе центра

инерции, а сечение рассеяния считается постоянным.

На основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана проанализировано образование вакансий в каскаде движущихся атомов от импульсного, точечного, моноэнергетического источников ПВА. Для пространственного распределения вакансий, образовавшихся при развитии каскада, получено простое безразмерное выражение (27), зависящее от единственного безразмерного параметра ϵ_0 .

Показано, что с ростом этого параметра происходит перемещение относительного числа образующихся вакансий на большие расстояния от

источника (см. рис. 3). Это обстоятельство обусловлено ростом величины среднего квадрата длины замедления с увеличением ε_0 (см. (24), (29)).

Полученное в работе решение кинетического уравнения также позволяет получить выражения для функции распределения движущихся атомов от стационарного, моноэнергетического равномерно распределенного по пространству (см. (23)) и точечного (см. (24)) источников.

ЛИТЕРАТУРА

1. К. Лейман, *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов*, Атомиздат, Москва (1979).
2. С. Вас Гэри, *Основы радиационного материаловедения. Металлы и сплавы*, Техносфера, Москва (2014).
3. И. А. Портных, А. В. Козлов, ФММ **119**, 636 (2018).
4. Л. С. Васильев, С. Л. Ломаев, ФММ **120**, 771 (2019).
5. А. Р. Исинбаев, И. А. Портных, А. В. Козлов, ФММ **121**, 99 (2020).
6. К. Nordlund, A. E. Sand, F. Granberg et al., J. Nucl. Mater. **512**, 450 (2018).
7. К. Nordlund, J. Nucl. Mater. **520**, 273 (2019).
8. К. Arakawa, Z. Bergstrom, B. D. Wirth et al., J. Nucl. Mater. **554**, 153113 (2021).
9. А. И. Рязанов, Е. В. Метелкин, Препринт ИАЭ-3223 (1979).
10. А. I. Ryazanov, and E. V. Metelkin, Rad. Effects **52**, 15 (1980).
11. Y. Sato, S. Kojimo, T. Yoshiie, et al., J. Nucl. Mater., **179-181**, 901 (1991).
12. Y. Sato, T. Yoshiie, and M. Kiritani, J. Nucl. Mater., **191-194**, 1101 (1992).
13. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Атомная энергия **83**, 183 (1997).
14. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов, ЖЭТФ **134**, 469 (2008).
15. А. I. Ryazanov, E. V. Metelkin, E. V. Semenov, J. Nucl. Mater. **386-388**, 132 (2009).
16. А. А. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, n. 1, 27 (2019).
17. J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **36**, 1 (1968).
18. А. А. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, n. 6, 40 (2019).
19. Е. В. Метелкин, А. Н. Манвелов, А. Я. Пономарев и др., ФММ **120**, 892 (2019).
20. Е. В. Метелкин, В. А. Акатьев, В. И. Шмырев и др., ЖЭТФ **156**, 387 (2019).
21. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, ФММ **122**, 446 (2021).
22. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, ЖЭТФ **160**, 167 (2021).
23. А. И. Исаков, М. В. Казарновский, Ю. А. Медведев и др., *Нестационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения*, Наука, Москва (1984).

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ, РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗ И СКРЫТАЯ СИММЕТРИЯ В ОДНОМЕРНОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ

И. М. Суслов*

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

Поступила в редакцию 04 июня 2022 г.,
после переработки 04 июня 2022 г.
Принята к публикации 20 июня 2022 г.

Рассматриваются одномерные неупорядоченные системы со случайным потенциалом малой амплитуды и короткодействующими корреляциями для энергий вблизи края зоны идеального кристалла. Получено уравнение эволюции для совместной функции распределения $P(\rho, \psi)$ ландауэровского сопротивления ρ и фазовой переменной $\psi = \theta - \varphi$ (θ и φ — фазы, входящие в трансфер-матрицу) при изменении длины системы L . В пределе больших L уравнение допускает разделение переменных, что обеспечивает существование стационарного распределения $P(\psi)$, определяющего коэффициенты в уравнении эволюции для $P(\rho)$. Предельное распределение $P(\rho)$ при $L \rightarrow \infty$ является логнормальным и не зависит от граничных условий. Оно определяется “внутренним” распределением фазы ψ , форма которого изучена во всей области энергий, включая запрещенную зону. Приближение случайных фаз справедливо в глубине разрешенной зоны, но сильно нарушается при других энергиях. Фаза ψ оказывается “плохой” переменной, а “правильной” переменной является $\omega = -\text{ctg} \psi/2$. Форма стационарного распределения $P(\omega)$ определяется внутренними свойствами системы и не зависит от граничных условий. Изменение граничных условий приводят к масштабному преобразованию $\omega \rightarrow s\omega$ и трансляциям $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$ и $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$, что определяет “внешнее” распределение фаз, входящее в уравнения эволюции. Независимость предельного распределения $P(\rho)$ от внешнего распределения $P(\psi)$ позволяет говорить о скрытой симметрии, характер которой выявляется ниже.

DOI: 10.31857/S0044451022110165
EDN: LAXMNI

1. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании одномерных неупорядоченных систем удобно использование трансфер-матрицы T , которая связывает амплитуды волн слева ($Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$) и справа ($Ce^{ikx} + De^{-ikx}$) от рассеивателя,

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad (1)$$

и при наличии инвариантности относительно обращения времени допускает параметризацию [1]:

$$T = \begin{pmatrix} 1/t & -r/t \\ -r^*/t^* & 1/t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho+1} e^{i\varphi} \sqrt{\rho} e^{i\theta} \\ \sqrt{\rho} e^{-i\theta} \sqrt{\rho+1} e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где t и r — амплитуды прохождения и отражения и $\rho = |r/t|^2$ — безразмерное сопротивление по Ландауэру [2]. При последовательном расположении рассеивателей их трансфер-матрицы перемножаются. Для слабого рассеивателя матрица T близка к единичной, что позволяет выводить дифференциальные уравнения эволюции для ее параметров и в частности — для ландауэровского сопротивления ρ .

В приближении случайных фаз (когда распределения φ и θ считаются однородными) такое уравнение для распределения $P(\rho)$ имеет вид (параметр D — порядка обратной длины пробега) [3]– [8]

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho(1+\rho) \frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right] \quad (3)$$

и описывает эволюцию начального распределения $P_0(\rho) = \delta(\rho)$ на нулевой длине L к логнормальному распределению при больших L .

Согласно [9], распределение фаз φ и θ перестает быть однородным при введении полунепроницаемых границ, отделяющих систему от присоединенных к

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

ней идеальных контактов, даже если оно было однородным в исходной системе; в последнем случае возникает более общее уравнение

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[-\gamma(1+2\rho)P(\rho) + \rho(1+\rho) \frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right], \quad (4)$$

которое в приближении случайных фаз сводится к (3). Последнее приближение хорошо работает в глубине разрешенной зоны для “естественных” идеальных контактов (изготовленных из того же материала, что изучаемая система, но без примесей), что обычно и предполагается в теоретических работах (см. ссылки в [10–12]); ситуация внутри запрещенной зоны идеального кристалла рассматривается сравнительно редко [13–15] и лишь на уровне волновых функций. Для исследования эволюции $P(\rho)$ при произвольном положении уровня Ферми (включая запрещенную зону) требуется введение “чужеродных” контактов из хорошего металла¹⁾, что автоматически усложняет граничные условия. Это приводит к еще более общему уравнению [16]

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[-\gamma_1(1+2\rho)P(\rho) - 2\gamma_2 \sqrt{\rho(1+\rho)}P(\rho) + \rho(1+\rho) \frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right], \quad (5)$$

коэффициенты которого в пределе больших L определяются стационарным распределением фаз (см. ниже (34)). Для больших L типичные значения ρ велики и уравнение (5) сводится к (4) с $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$. На рис. 1 показана зависимость параметра γ от $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$, где \mathcal{E} — энергия Ферми, отсчитанная от нижнего края исходной зоны, и W — амплитуда случайного потенциала (все энергии измеряются в единицах интеграла перекрытия для одномерной модели Андерсона, см. ниже (13)). Параметр γ близок к нулю в глубине разрешенной зоны в соответствии с приближением случайных фаз, но нарушение последнего во всем энергетическом интервале представляет собой совсем не малый эффект. Такое нарушение происходит по внутренним причинам и введение полупрозрачных границ не является для этого необходимым. Более того, предельное (логнормальное) распределение $P(\rho)$ в области больших L

¹⁾ Нетрудно понять, что для энергий внутри запрещенной зоны идеального кристалла “естественные” идеальные контакты оказываются непроводящими, тогда как в изучаемой неупорядоченной системе имеются флуктуационные состояния.

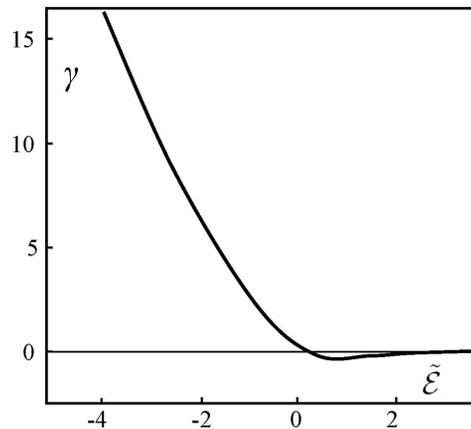


Рис. 1. Зависимость параметра γ в уравнении (4) от приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$. Параметр γ мал в глубине разрешенной зоны в соответствии с приближением случайных фаз.

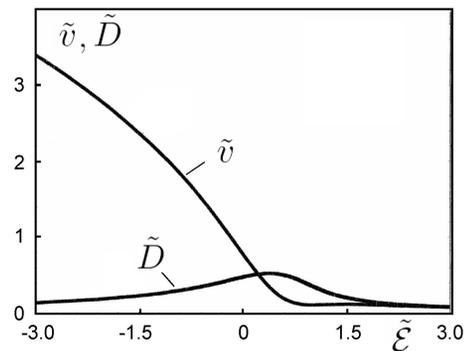


Рис. 2. Зависимость параметров $\tilde{v} = v/W^{2/3}$ и $\tilde{D} = D/W^{2/3}$ от приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$. Равенство $v = D$, справедливое в приближении случайных фаз, реализуется лишь в глубине разрешенной зоны.

$$P(\rho) = \frac{1}{\rho \sqrt{4\pi DL}} \exp \left\{ -\frac{[\ln \rho - vL]^2}{4DL} \right\}, \quad (6)$$

где $v = (2\gamma + 1)D$, определяется внутренними свойствами изучаемой системы (рис. 2) и не зависит от граничных условий.

Зависимость γ от $\tilde{\mathcal{E}}$ (рис. 1) однозначно свидетельствует о нарушении приближения случайных фаз, но получена в [16] на основе анализа моментов распределения (см. ниже), при котором вопрос о распределении фаз полностью обходится. Проявление вопроса о распределении фаз необходимо для логической завершенности теории одномерной лока-

лизации и является целью настоящей работы. Это неразрывно связано с исследованием роли граничных условий и требует разрешения кажущихся противоречий.

Действительно, в работах [9, 16] высказаны два утверждения, которые выглядят трудно совместимыми. С одной стороны, изменение граничных условий существенно влияет на распределение фаз, которое в общем случае меняет параметры уравнений эволюции (3–5) и даже их структуру. С другой стороны, эти изменения не влияют на форму предельного распределения (6) в области больших L . Справедливость этих утверждений означает, что в системе имеется скрытая симметрия, т. е. инвариантность физических параметров относительно некоторого класса преобразований. С теоретической точки зрения, выявление скрытой симметрии представляет безусловный интерес, указывая на возможность существенных упрощений. Практически же, без выяснения характера указанной инвариантности невозможно отделить реальные физические эффекты от фиктивных. Выявление этой инвариантности оказывается очень нетривиальным и требует вывода уравнений эволюции в наиболее общем виде.

Поясним происхождение двух упомянутых утверждений. При изменении граничных условий трансфер-матрица T преобразуется в $\tilde{T} = T_l T T_r$, где T_l и T_r — краевые матрицы, связывающие амплитуды волн слева и справа от границы раздела. Таким образом, изменение граничных условий приводит к линейному преобразованию элементов трансфер-матрицы. Линейное преобразование не меняет показателей экспоненциального роста для вторых и четвертых моментов, которые находятся по известной матрице T и определяются внутренними свойствами системы. Знание этих двух показателей позволяет установить “коэффициент диффузии” D и “скорость дрейфа” v в предельном распределении (6) (рис. 2), которые таким образом не зависят от граничных условий [16]; после этого нетрудно получить поведение параметра γ (рис. 1).

Влияние граничных условий на распределение фаз легко продемонстрировать путем введения точечных рассеивателей на границах системы, когда

$$\tilde{T} = T_l T T_r, \quad T_l = T_r = \begin{pmatrix} 1 - i\chi & -i\chi \\ i\chi & 1 + i\chi \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Принимая для \tilde{T} параметризацию (2), получим в главном приближении при больших χ

$$\sqrt{1 + \rho} e^{i\varphi} = -\chi^2 T', \quad \sqrt{\rho} e^{i\theta} = -\chi^2 T',$$

$$\sqrt{\rho} e^{-i\theta} = \chi^2 T', \quad \sqrt{1 + \rho} e^{-i\varphi} = \chi^2 T', \quad (8)$$

где $T' = T_{11} - T_{12} + T_{21} - T_{22}$ и T_{ij} — элементы матрицы T . При больших χ имеем $\rho \sim \chi^4$, так что $1 + \rho \approx \rho$ и

$$\varphi = \pm\pi/2, \quad \theta = \pm\pi/2 \quad \text{при} \quad \chi \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Таким образом, при больших χ фазы φ и θ локализуются вблизи значений $\pm\pi/2$, независимо от их распределения в исходной системе.

С физической точки зрения ситуация выглядит следующим образом (рис. 3). В глубине достаточно длинной неупорядоченной системы реализуется некоторое “внутреннее” распределение фаз, не зависящее от граничных условий. При рассмотрении системы со стороны идеальных контактов наблюдается “внешнее” распределение фаз, определяемое граничными условиями; именно такие фазы входят в трансфер-матрицу. Влияние границ раздела существенно на масштабе порядка длины локализации ξ , что определяет переходную область, в которой внутреннее распределение фаз постепенно трансформируется к внешнему. В пределе больших L распределение $P(\rho)$ определяется внутренним распределением фаз, что обеспечивает его независимость от граничных условий. Однако, в уравнения эволюции входит именно внешнее распределение фаз²⁾, и нужно понять, почему это не влияет на предельное распределение $P(\rho)$. Второй вопрос, связанный с первым, состоит в следующем: каким образом можно найти внутреннее распределение фаз, если оно не входит в уравнения?

Обсудим характер упомянутой инвариантности. Изменение матрицы T с длиной системы L определяется соотношением

$$T_{L+\Delta L} = T_L T_{\Delta L}, \quad (10)$$

где матрица $T_{\Delta L}$ близка к единичной, что позволяет выводить дифференциальные уравнения эволюции. Для перехода к другим граничным условиям умножим (10) слева и справа на краевые матрицы T_l и T_r , вводя произведение $T_r T_r^{-1} = 1$ между двумя сомножителями:

$$T_l T_{L+\Delta L} T_r = T_l T_L T_r \cdot T_r^{-1} T_{\Delta L} T_r. \quad (11)$$

Тогда для матрицы $\tilde{T}_L = T_l T_L T_r$ справедливо соотношение, аналогичное (10),

²⁾ Это вполне естественно, так как при малых L внутреннее распределение фаз вообще не проявляется, и граничные условия существенно влияют на распределение $P(\rho)$, как это подробно обсуждалось в [16].

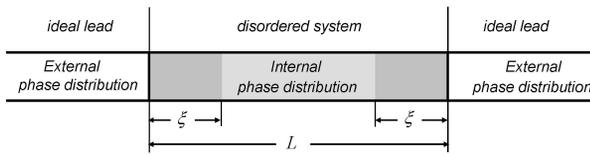


Рис. 3. Внешнее и внутренне распределение фаз

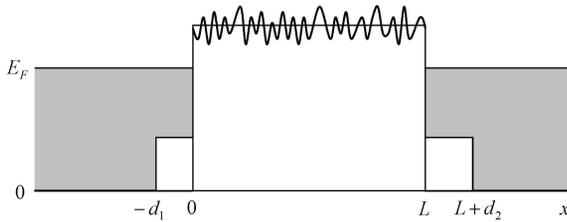


Рис. 4. Модель для учета размытия границ раздела

$$\tilde{T}_{L+\Delta L} = \tilde{T}_L T'_{\Delta L}, \quad (12)$$

где матрица $T'_{\Delta L} = T_r^{-1} T_{\Delta L} T_r$ по-прежнему близка к единичной. Переход от $T_{\Delta L}$ к $T'_{\Delta L}$ изменяет форму уравнений эволюции, определяемую параметрами $\alpha, \beta, \gamma, \Delta, \epsilon^2$ (см. разд. 2,3), а переход от T_L к \tilde{T}_L меняет стационарное распределение фаз, определяющее коэффициенты в уравнении (5) для $P(\rho)$. Эти два фактора должны компенсировать друг друга, чтобы предельное распределение $P(\rho)$ оставалось инвариантным. Однако, уравнения эволюции не обладают никакой очевидной инвариантностью, и ее выявление требует серьезных усилий. Разрешение этих трудностей непосредственно связано с решением вопроса о внутреннем распределении фаз.

2. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ТОЧЕЧНЫХ РАССЕЙВАТЕЛЕЙ

Как ясно из опыта работы [16], анализ удобно проводить для энергий внутри запрещенной зоны идеального кристалла, а описание разрешенной зоны получать как аналитическое продолжение. Для определенности рассматриваем одномерную модель модель Андерсона

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + V_n \Psi_n = E \Psi_n \quad (13)$$

вблизи края исходной зоны, где она соответствует дискретизации обычного уравнения Шредингера (E — энергия, отсчитанная от центра зоны).

Описание рассеивателя внутри запрещенной зоны осуществляется с помощью псевдо-трансфер-матрицы t , связывающей решения слева ($Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$) и справа ($Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$) от рассеивателя. Матрица $t^{(n)}$ для последовательности рассеивателей с амплитудами $V_0, V_1, V_2, \dots, V_n$, находящихся в точках $0, L_1, L_1+L_2, \dots, L_1+L_2+\dots+L_n$, имеет вид

$$t^{(n)} = t_{\epsilon_0} t_{\delta_1} t_{\epsilon_1} t_{\delta_2} t_{\epsilon_2} \dots t_{\delta_n} t_{\epsilon_n}, \quad (14)$$

где

$$t_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 + \bar{\epsilon}_n & \bar{\epsilon}_n \\ -\bar{\epsilon}_n & 1 - \bar{\epsilon}_n \end{pmatrix}, \quad \bar{\epsilon}_n = \frac{V_n}{2\kappa a_0}, \quad (15)$$

$$t_{\delta_n} = \begin{pmatrix} e^{-\delta_n} & 0 \\ 0 & e^{\delta_n} \end{pmatrix}, \quad \delta_n = \kappa L_n$$

и a_0 — межатомное расстояние. Переход к истинной трансфер-матрице $T^{(n)} = T_l t^{(n)} T_r$ осуществляется с помощью краевых матриц, описывающих присоединение к системе идеальных контактов. Вводя произведение $T_r T_l = 1$ между каждыми двумя множителями в (14), имеем³⁾

$$T^{(n)} = T_{\epsilon_0} T_{\delta_1} T_{\epsilon_1} T_{\delta_2} T_{\epsilon_2} \dots T_{\delta_n} T_{\epsilon_n}, \quad (16)$$

где

$$T_{\epsilon_n} = T_l t_{\epsilon_n} T_r, \quad T_{\delta_n} = T_l t_{\delta_n} T_r. \quad (17)$$

В модели Андерсона рассеиватели находятся на каждом узле решетки, поэтому все δ_n одинаковы, $\delta_n = \kappa a_0$. Примеры краевых матриц даны ниже, и в наиболее общем случае приводят к следующей структуре матриц T_{ϵ_n} и T_{δ}

$$T_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 - i\epsilon_n & \epsilon_n e^{i\gamma} \\ \epsilon_n e^{-i\gamma} & 1 + i\epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \epsilon_n = K \bar{\epsilon}_n, \quad (18)$$

$$T_{\delta} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1+\Delta^2} e^{i\alpha} & \Delta e^{i\beta} \\ \Delta e^{-i\beta} & \sqrt{1+\Delta^2} e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

Матрица T_{δ} является трансфер-матрицей общего вида, тогда как для T_{ϵ_n} достаточно указанной формы. В дальнейшем считаем, как обычно, что все V_n статистически независимы, $\langle V_n \rangle = 0, \langle V_n^2 \rangle = W^2$. Тогда уравнения эволюции будут определяться параметрами $\alpha, \beta, \gamma, \Delta$ и величиной

$$\epsilon^2 = \langle \epsilon_n^2 \rangle = \text{const } W^2. \quad (19)$$

³⁾ Условие $T_r T_l = 1$ может быть принято без ограничения общности. Если это не так, то полагаем $T_l = T'_l T''_l$, где $T_r T''_l = 1$, и используем матрицу T'_l в качестве T_l . При этом роль матрицы T'_l сводится к изменению начальных условий в уравнениях эволюции, тогда как их структура не меняется.

Внутри разрешенной зоны для “естественных” идеальных контактов последовательность точечных рассеивателей описывается не произведением (14), а произведением (16), где

$$T_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 - i\epsilon_n & -i\epsilon_n \\ i\epsilon_n & 1 + i\epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \epsilon_n = \frac{V_n}{2ka_0},$$

$$T_{\delta_n} = \begin{pmatrix} e^{-i\delta_n} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_n} \end{pmatrix}, \quad \delta_n = \bar{k}L_n, \quad (20)$$

и \bar{k} — фермиевский импульс в изучаемой системе, что соответствует замене $\kappa \rightarrow i\bar{k}$ в предыдущих соотношениях. Такая замена соответствует гладкому переходу от энергии $\mathcal{E} = -\kappa^2$ в запрещенной зоне к $\mathcal{E} = \bar{k}^2$ в разрешенной. При изменении граничных условий возникают матрицы $\tilde{T}_{\epsilon_n} = T_l T_{\epsilon_n} T_r$ и $\tilde{T}_{\delta_n} = T_l T_{\delta_n} T_r$, имеющие структуру (18).

3. УРАВНЕНИЯ ЭВОЛЮЦИИ

Воспользуемся рекуррентным соотношением

$$T^{(n+1)} = T^{(n)} T_{\delta} T_{\epsilon}, \quad (21)$$

где матрицы $T^{(n)}$ и T_{ϵ} статистически независимы, а T_{δ} постоянна. Принимая для $T^{(n)}$ параметризацию (2) и обозначая параметры матрицы $T^{(n+1)}$ как $\tilde{\rho}$, $\tilde{\varphi}$, $\tilde{\theta}$, имеем

$$\sqrt{1+\tilde{\rho}} e^{i\tilde{\varphi}} = \sqrt{1+\rho} e^{i\varphi} (\mathcal{A} + \epsilon \mathcal{C}) + \sqrt{\rho} e^{i\theta} (\mathcal{B}^* + \epsilon \mathcal{D}^*),$$

$$\sqrt{\tilde{\rho}} e^{i\tilde{\theta}} = \sqrt{1+\rho} e^{i\varphi} (\mathcal{B} + \epsilon \mathcal{D}) + \sqrt{\rho} e^{i\theta} (\mathcal{A}^* + \epsilon \mathcal{C}^*), \quad (22)$$

где мы положили

$$\mathcal{C} = \mathcal{B} e^{-i\gamma} - i\mathcal{A} \quad \mathcal{D} = \mathcal{A} e^{i\gamma} + i\mathcal{B}. \quad (23)$$

В дальнейшем рассматриваем предел

$$\delta \rightarrow 0, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad \delta/\epsilon^2 = const \quad (24)$$

и сохраняем члены первого порядка по δ и второго по ϵ . Возводя по модулю в квадрат одно из уравнений (22), получим

$$\tilde{\rho} = \rho + \mathcal{K} \sqrt{\rho(1+\rho)} + \epsilon^2(1+2\rho), \quad (25)$$

где

$$\mathcal{K} = 2\Delta \cos(\psi-\beta) + 2\epsilon \cos(\psi-\gamma) - 2\epsilon^2 \sin(\psi-\gamma) \quad (26)$$

и введена комбинированная фаза

$$\psi = \theta - \varphi. \quad (27)$$

Теперь возьмем произведение второго уравнения (22) с комплексно сопряженным первым

$$\sqrt{\tilde{\rho}(1+\tilde{\rho})} e^{i\tilde{\psi}} = (1+2\rho) [\Delta e^{i\beta} + \epsilon e^{i\gamma} + i\epsilon^2 e^{i\gamma}] +$$

$$+ \sqrt{\rho(1+\rho)} [(e^{-2i\alpha} + 2i\epsilon - \epsilon^2) e^{i\psi} + \epsilon^2 e^{2i\gamma-i\psi}]. \quad (28)$$

Исключая $\tilde{\rho}$ с помощью уравнения (25), получим связь $\tilde{\psi}$ и ψ

$$\tilde{\psi} = \psi + 2(\epsilon - \alpha) + (R^2/2 - 1)\epsilon^2 \sin 2(\psi - \gamma) -$$

$$- R [\Delta \sin(\psi - \beta) + \epsilon \sin(\psi - \gamma) + \epsilon^2 \cos(\psi - \gamma)], \quad (29)$$

где

$$R = \frac{1+2\rho}{\sqrt{\rho(1+\rho)}}. \quad (30)$$

Используя (25), (29) и следуя схеме работ [9, 16, 17], получим уравнение эволюции для $P(\rho, \psi)$

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \epsilon^2 [1 - 2 \cos^2(\psi - \gamma)] (1 + 2\rho) P - \right.$$

$$- 2 [\Delta \cos(\psi - \beta) + \epsilon^2 \sin(\psi - \gamma)] \sqrt{\rho(1+\rho)} P +$$

$$+ 2\epsilon^2 \cos^2(\psi - \gamma) \rho(1+\rho) P'_{\rho} +$$

$$+ 2\epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) [2 - R \sin(\psi - \gamma)] \sqrt{\rho(1+\rho)} P'_{\psi} \Big\}'_{\rho} +$$

$$+ \left\{ \epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) [2 \sin(\psi - \gamma) - R] P + \right.$$

$$+ [2\alpha + R\Delta \sin(\psi - \beta)] P +$$

$$\left. + \frac{1}{2} \epsilon^2 [2 - R \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_{\psi} \right\}'_{\psi}. \quad (31)$$

Правая часть является суммой полных производных, что обеспечивает сохранение вероятности. Связь распределений ρ и ψ определяется величиной R , которая стремится к 2 в пределе больших L , когда типичные значения ρ велики. Тогда решение уравнения (31) факторизуется, $P(\rho, \psi) = P(\rho)P(\psi)$, хотя ситуация несколько необычна для разделения переменных (см. Приложение 1); уравнение эволюции для $P(\psi)$ отщепляется

$$\frac{\partial P(\psi)}{\partial L} = \left\{ [2\alpha + 2\Delta \sin(\psi - \beta) - 2\epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) + \right.$$

$$+ \epsilon^2 \sin 2(\psi - \gamma)] P(\psi) +$$

$$\left. + 2\epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_{\psi}(\psi) \right\}'_{\psi} \quad (32)$$

и дает условие для стационарного распределения фазы ψ

$$\epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_{\psi} -$$

$$\begin{aligned}
 & -\epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)] \cos(\psi - \gamma) P + \\
 & + [\alpha + \Delta \sin(\psi - \beta)] P = C_0, \quad (33)
 \end{aligned}$$

где константа C_0 определяется из нормировки.⁴⁾

Усреднение по ψ приводит к уравнению (5) с параметрами

$$\begin{aligned}
 D &= 2\epsilon^2 \langle \cos^2(\psi - \gamma) \rangle, \\
 \gamma_1 D &= \epsilon^2 \langle 1 - 2\cos^2(\psi - \gamma) \rangle, \quad (34) \\
 \gamma_2 D &= \Delta \langle \cos(\psi - \beta) \rangle - \epsilon^2 \langle \sin(\psi - \gamma) \rangle,
 \end{aligned}$$

откуда для “скорости дрейфа” в (6) получим

$$\begin{aligned}
 v &= 2\Delta \langle \cos(\psi - \beta) \rangle + \\
 & + 2\epsilon^2 \langle \sin^2(\psi - \gamma) - \sin(\psi - \gamma) \rangle. \quad (35)
 \end{aligned}$$

Входящие в (34, 35) средние определяются стационарным распределением $P(\psi)$.

4. ЗАВИСИМОСТЬ ОТ СВОЙСТВ ИДЕАЛЬНЫХ КОНТАКТОВ

Пусть фермиевский импульс k в идеальных контактах отличен от фермиевского импульса \bar{k} в изучаемой системе, а граница раздела является резкой. Тогда краевые матрицы в запрещенной зоне могут быть выбраны в виде

$$\begin{aligned}
 T_l &= \begin{pmatrix} l & l^* \\ l^* & l \end{pmatrix}, \quad T_r = \begin{pmatrix} r & r^* \\ r^* & r \end{pmatrix}, \quad (36) \\
 l &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa}{ik} \right), \quad r = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right),
 \end{aligned}$$

приводя к результатам (18) для матриц T_{ϵ_n} и T_δ с параметрами

$$\begin{aligned}
 \alpha &= -\frac{1}{2} \left(\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right) \delta = \frac{\kappa^2 - k^2}{2k} a_0, \\
 \beta &= \frac{\pi}{2}, \quad \gamma = -\frac{\pi}{2}, \quad \epsilon^2 = \bar{\epsilon}^2 \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 = \frac{W^2}{4k^2 a_0^2}, \quad (37) \\
 \Delta &= \frac{1}{2} \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right) \delta = \frac{\kappa^2 + k^2}{2k} a_0,
 \end{aligned}$$

которые являются регулярными функциями энергии $\mathcal{E} = -\kappa^2$ и аналитически продолжаются в разрешенную зону. Тогда для параметров D и v имеем

$$D = 2\epsilon^2 \langle \sin^2 \psi \rangle, \quad (38)$$

⁴⁾ Уравнения (31, 32) аналогичны уравнениям (10.27), (10.28) в книге [10], введенным в рамках другого формализма, так что связь входящих в них величин с параметрами трансфер-матрицы не очевидна. То же относится к уравнениям (39, 40) в работе [18].

$$v = 2\Delta \langle \sin \psi \rangle + 2\epsilon^2 \langle 1 - \cos \psi \rangle - 2\epsilon^2 \langle \sin^2 \psi \rangle,$$

а уравнение для стационарного распределения $P(\psi)$ принимает вид

$$\begin{aligned}
 \epsilon^2 (1 - \cos \psi)^2 P'_\psi + \epsilon^2 \sin \psi (1 - \cos \psi) P + \\
 + (\alpha - \Delta \cos \psi) P = C_0. \quad (39)
 \end{aligned}$$

Замена переменных в уравнении (39)

$$\omega = -\text{ctg} \psi / 2 \quad (40)$$

с учетом перенормировки вероятности $P \rightarrow P(1 + \omega^2)/2$, следующей из $P(\psi)d\psi = P(\omega)d\omega$, приводит его к простой форме

$$P'_\omega + P(b + a\omega^2) = C_0, \quad (41)$$

где

$$a = \frac{\alpha - \Delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\alpha + \Delta}{2\epsilon^2} \quad (42)$$

или

$$\alpha = \epsilon^2(b + a), \quad \Delta = \epsilon^2(b - a). \quad (43)$$

Уравнение (41) интегрируется в квадратурах, но эта квадратура практически бесполезна. Более эффективным оказывается исследование трансформационных свойств. Если $P_{a,b}(\omega)$ — решение уравнения (41), то справедливо соотношение

$$P_{a,b}(\omega) = s^{-1} P_{as^3, bs}(\omega/s). \quad (44)$$

Оно устанавливается с помощью замены $\omega = s\tilde{\omega}$ и приведения уравнения к прежнему виду путем переопределения параметров $\tilde{a} = as^3$, $\tilde{b} = bs$, так что $P_{a,b}(\omega)$ совпадает с $P_{\tilde{a}, \tilde{b}}(\tilde{\omega})$ с точностью до коэффициента, который устанавливается из нормировки. Заметим, что

$$ab = \frac{\alpha^2 - \Delta^2}{4\epsilon^4} = -\frac{\delta^2}{4\epsilon^4}, \quad (45)$$

и масштабное преобразование $a \rightarrow as^3$, $b \rightarrow bs$ приводит к перенормировке $\epsilon \rightarrow \tilde{\epsilon}$, где

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon s^{-1} = \bar{\epsilon} \frac{\kappa}{k} s^{-1}. \quad (46)$$

Подставляя (37) в (42), получим исходные значения параметров a и b

$$a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\kappa}{k} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad (47)$$

после чего соотношения (43) позволяют установить перенормировку $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$, $\Delta \rightarrow \tilde{\Delta}$ в результате масштабного преобразования

$$\tilde{\alpha} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} s^{-1} - \frac{k}{\kappa} s \right) \delta, \quad \tilde{\Delta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} s^{-1} + \frac{k}{\kappa} s \right) \delta. \quad (48)$$

Соотношения (46) и (48) показывают, что преобразование всех параметров α , Δ , ϵ^2 , входящих в уравнения эволюции, сводится к замене

$$\frac{k}{\kappa} \rightarrow \frac{k}{\kappa} s, \quad (49)$$

эквивалентной изменению фермиевского импульса в идеальных контактах. И наоборот, изменение свойств идеальных контактов приводит к масштабному преобразованию распределения $P(\omega)$.

5. ВЛИЯНИЕ δ -ОБРАЗНОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ГРАНИЦЕ

Если на границе раздела между изучаемой системой и идеальными проводниками имеется δ -образный потенциал, то краевые матрицы (36) преобразуются к виду

$$T_l = \begin{pmatrix} l & l_1^* \\ l^* & l_1 \end{pmatrix}, \quad l = \frac{ik + \kappa - \kappa_1}{2ik}, \quad l_1 = \frac{ik + \kappa + \kappa_1}{2ik}, \quad (50)$$

$$T_r = \begin{pmatrix} r & r^* \\ r_1^* & r_1 \end{pmatrix}, \quad r = \frac{ik + \kappa - \kappa_2}{2\kappa}, \quad r_1 = \frac{ik + \kappa + \kappa_2}{2\kappa},$$

где κ_1 и κ_2 определяют скачки логарифмической производной волновой функции на левой и правой границах раздела. Условие $T_r T_l = 1$ справедливо при $\kappa_2 = -\kappa_1$, что можно принять без ограничения общности (см. примечание 3). Тогда матрица T_{ϵ_n} остается неизменной, а матрица T_δ принимает вид (18) с параметрами

$$\alpha = -\frac{k^2 - \kappa^2 + \kappa_1^2}{2\kappa k} \delta, \quad \Delta \cos \beta = -\frac{\kappa_1}{\kappa} \delta, \quad (51)$$

$$\Delta \sin \beta = \frac{k^2 + \kappa^2 - \kappa_1^2}{2\kappa k} \delta,$$

которые, как и раньше (ввиду $\delta = \kappa a_0$), регулярны по энергии $\mathcal{E} = -\kappa^2$. Таким образом, по-прежнему имеем $\gamma = -\pi/2$, тогда как параметр β становится отличным от $\pi/2$. Замена (40) приводит уравнение (33) к виду

$$P'_\omega + P(b + c\omega + a\omega^2) = C_0, \quad (52)$$

с параметрами

$$a = \frac{\alpha - \Delta \sin \beta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\alpha + \Delta \sin \beta}{2\epsilon^2}, \quad c = -\frac{\Delta \cos \beta}{\epsilon^2}, \quad (53)$$

что после подстановки физических значений (51) дает

$$a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\kappa^2 - \kappa_1^2}{\kappa k} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad c = \frac{\kappa_1}{\kappa} \frac{\delta}{\epsilon^2}. \quad (54)$$

Решение уравнения (52) удовлетворяет соотношению

$$P_{a,b,c}(\omega) = s^{-1} P_{a s^3, b s, c s^2}(\omega/s), \quad (55)$$

и, как нетрудно проверить, масштабное преобразование $P(\omega)$ по-прежнему соответствует изменению фермиевского импульса k в идеальных контактах.

Нетрудно видеть, что сдвиг $\omega \rightarrow \omega - \omega_0$ переменной ω позволяет привести уравнение (52) к виду (41), что дает соотношение

$$P_{a,b,c}(\omega) = P_{\tilde{a}, \tilde{b}, 0}(\omega + \omega_0), \quad (56)$$

$$\omega_0 = -\frac{\kappa_1}{k}, \quad \tilde{a} = a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad \tilde{b} = \frac{\kappa}{k} \frac{\delta}{2\epsilon^2},$$

где значения параметров \tilde{a} и \tilde{b} соответствуют ситуации $\kappa_1 = 0$. Таким образом, появление δ -образного потенциала на границе приводит к трансляции распределения $P(\omega)$ на величину ω_0 , пропорциональную амплитуде δ -образного потенциала.

6. РАЗМЫТИЕ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА

Если рассматриваются энергии внутри запрещенной зоны, то изучаемая система при отсутствии примесей сводится к потенциальному барьеру. Размытие границ раздела можно моделировать, вводя прослойки металла с фермиевским импульсом k_1 и толщинами d_1 и d_2 на границах системы (рис. 4). Краевые матрицы T_l и T_r для такой модели приведены в Приложении 2. Условие $T_r T_l = 1$ выполняется, если d_1 и d_2 подчинить ограничениям

$$k_1(d_1 + d_2) = 2\pi m, \quad k(d_1 + d_2) = 2\pi n, \quad (57)$$

где m и n — целые числа. Матрица T_δ является трансфер-матрицей общего вида, и ее вычисление не представляет интереса. Для матрицы T_{ϵ_n} получается выражение (18) с параметрами

$$K = \frac{\kappa \mathcal{R}}{k_1}, \quad \gamma = \arcsin \left(\frac{\sin \alpha}{\mathcal{R}} \right) - \frac{k\alpha}{k_1} - \frac{\pi}{2}, \quad (58)$$

где

$$\mathcal{R} = \mathcal{P} + \mathcal{Q} \cos \alpha, \quad \alpha = k_1(d_2 - d_1),$$

$$\mathcal{P} = \frac{k_1^2 + k^2}{2kk_1}, \quad \mathcal{Q} = \frac{k_1^2 - k^2}{2kk_1}. \quad (59)$$

Значение γ , отличное от $-\pi/2$, получается при $d_1 \neq d_2$. Поскольку параметр γ входит как в выражения (34, 35) для D и v , так и в уравнение (33) для стационарного распределения $P(\psi)$, то сдвигом $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$ его можно привести к значению $-\pi/2$, что приводит лишь к переопределению параметра β . После этого замена переменных (40) приводит к уравнению (52) предыдущего раздела.

Если фермиевский импульс k_1 выбран пропорциональным k , то параметры \mathcal{P} и \mathcal{Q} являются постоянными, и масштабное преобразование $P(\omega)$ по-прежнему приводит к перенормировке (49) фермиевского импульса k . В общем случае пропорциональность $k_1 \propto k$ не имеет места, но изменение свойств идеальных контактов по-прежнему приводит к масштабному преобразованию $P(\omega)$, однако с более сложной связью импульса k и масштабного фактора s .

7. ОБЩИЙ ПОДХОД К КРАЕВЫМ МАТРИЦАМ

Обсудим общий подход к исследованию роли граничных условий, не связанный с модельными предположениями. Для этого нужно выяснить степень произвола, допустимого в краевых матрицах

Как указывалось в разд.2, условие $T_r T_l = 1$ может быть принято без ограничения общности. Согласно (16,17), для нас актуальны выражения, содержащие одинаковое число матриц T_r и T_l , а следовательно общие множители можно свободно извлекать из одной матрицы и переносить в другую. Поэтому без ограничения общности матрицы T_r и T_l можно выбрать в виде

$$T_l = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad T_r = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}, \quad (60)$$

$$ad - bc = 1,$$

принимая единичное значение для детерминантов. Роль краевых матриц наиболее существенна в запрещенной зоне — с их помощью псевдо-трансфер-матрица t превращается в истинную трансфер-матрицу $T = T_l t T_r$. Условие того, что матрица T является истинной трансфер-матрицей, выражается соотношениями для матричных элементов T_{ij} [19]⁵⁾

$$T_{11}T_{11}^+ - T_{12}T_{12}^+ = 1,$$

⁵⁾ Мы приводим эти соотношения в виде, пригодном для описания квазиодномерных систем, когда элементы T_{ij} являются матрицами.

$$T_{22}T_{22}^+ - T_{21}T_{21}^+ = 1, \quad (61)$$

$$T_{11}T_{21}^+ - T_{12}T_{22}^+ = 0,$$

которые следуют из условия сохранения потока.

Потребуем, чтобы матрицы T_δ и T_ϵ , входящие в (16,17) были истинными трансфер-матрицами. Тогда (см. Приложение 3) допустимые краевые матрицы образуют трехпараметрическое семейство

$$T_l = \begin{pmatrix} |r_1|e^{i\alpha_1} & |r_2|e^{i\alpha_2} \\ \pm i|r_1|e^{-i\alpha_1} & \pm i|r_2|e^{-i\alpha_2} \end{pmatrix}, \quad (62)$$

$$1 = 2|r_1 r_2| \sin(\alpha_2 - \alpha_1),$$

где верхний знак выбирается при $\sin(\alpha_2 - \alpha_1) > 0$, а нижний — в противоположном случае. Тогда для матриц T_δ и T_ϵ получим выражения (18) с параметрами

$$\alpha = -2\delta|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1),$$

$$\beta = \alpha_1 + \alpha_2,$$

$$\gamma = 2\alpha_1 - 2 \arcsin \frac{|r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1)}{r},$$

$$\Delta = 2\delta|r_1||r_2|, \quad (63)$$

$$K = r^2 = |r_1|^2 + |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1).$$

Аналогичный анализ в разрешенной зоне приводит к физически очевидному результату — краевые матрицы являются истинными трансфер-матрицами общего вида

$$T_l = \begin{pmatrix} |r_1|e^{i\alpha_1} & |r_2|e^{i\alpha_2} \\ |r_2|e^{-i\alpha_2} & |r_1|e^{-i\alpha_1} \end{pmatrix}, \quad (64)$$

$$|r_1|^2 - |r_2|^2 = 1.$$

Для матриц T_δ и T_ϵ получаются выражения (18) с параметрами

$$\alpha = -\delta(|r_1|^2 + |r_2|^2),$$

$$\beta = \pi/2 + \alpha_1 + \alpha_2,$$

$$\gamma = -\frac{\pi}{2} + 2\alpha_1 - 2 \arcsin \frac{|r_2| \cos(\alpha_1 - \alpha_2)}{r},$$

$$\Delta = 2\delta|r_1||r_2|, \quad (65)$$

$$K = r^2 = |r_1|^2 + |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1).$$

Как ясно из предыдущих разделов, весь трехпараметрический произвол краевых матриц может быть реализован физически, а уравнения эволюции, приведенные в разд.3, являются наиболее общими.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ $P(\omega)$

Как ясно из предыдущего, наиболее общие результаты для параметров уравнения эволюции (5) и предельного распределения (6) даются соотношениями (34, 35), где усреднение по ψ производится по стационарному распределению $P(\psi)$, определяемому уравнением (33). Сдвиг $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$ позволяет привести параметр γ к значению $-\pi/2$, после чего замена переменных $\omega = -\text{ctg}\psi/2$ приводит к уравнению (52). Далее трансляция $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$ переводит (52) в уравнение (41), которое масштабным преобразованием $\omega \rightarrow s\omega$ может быть приведено к одной из канонических форм — либо с $|a| = |b|$, либо с $a = -1$, зависящих от одного параметра; этот однопараметрический произвол ассоциируется с зависимостью от приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}}$. Таким образом, форма распределения $P(\omega)$ с $\omega = -\text{ctg}\psi/2$ определяется внутренними свойствами системы, тогда как изменение граничных условий переводит его в распределение $P(\tilde{\omega})$, где переменная

$$\tilde{\omega} = \omega_0 - s \text{ctg} \frac{\psi + \psi_0}{2} \quad (66)$$

связана с ω дробно-линейным преобразованием

$$\tilde{\omega} = \frac{A\omega + B}{C\omega + D}. \quad (67)$$

Согласно [16], ситуация $|a| = |b|$ является выделенной тем, что в глубине разрешенной и запрещенной зон параметры уравнения (5) остаются постоянными до очень малых масштабов⁶⁾ длины L . Случай $a = b$, реализуемый в разрешенной зоне соответствует “естественным” идеальным контактам (разд.1). При $-a = -b \gg 1$ (в глубине разрешенной зоны) в уравнении (41) можно опустить член P'_ω и получить

$$P(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + \omega^2}, \quad (68)$$

что соответствует $P(\psi) = \text{const}$, т.е. приближению случайных фаз. При $-a = b \gg 1$ (в глубине запрещенной зоны) константой C_0 в (41) можно пренебречь вблизи максимума распределения, и полагая $\omega = -1 + \tilde{\omega}$, получим $P'_\omega \approx -2|a|\tilde{\omega}P$, что дает гауссовское распределение

$$P(\omega) = \sqrt{\frac{|a|}{\pi}} \exp\{-|a|\tilde{\omega}^2\}, \quad (69)$$

локализованное вблизи $\omega = -1$; оно соответствует гауссовскому распределению $P(\psi)$, локализованному вблизи $\pi/2$ [16]. При нарушении условия $|a| = |b|$

⁶⁾ Для достаточно больших L они всегда постоянны, так как определяются стационарным распределением $P(\psi)$.

в разрешенной зоне возникают осцилляции распределения $P(\rho, \psi)$, связанные с тем, что матрица T при отсутствии примесей является трансфер-матрицей потенциального барьера, который становится прозрачным, если на его ширине укладывается полуцелое число волн де Бройля (аналогично просветлению в оптике) [16]. При нарушении условия $|a| = |b|$ в запрещенной зоне распределение $P(\rho, \psi)$ локализуется вблизи значения ψ , отличного от $\pi/2$, что приводит к его медленной релаксации к последнему значению.

Вблизи края исходной зоны уравнение (41) удобно приводить к канонической форме с $a = -1$. Его решение при $b = 0$ соответствует “критической” области для размытого перехода Андерсона [16] и может быть представлено в виде (см. Приложение 4)

$$P(\omega) = A_0 \int_0^\infty dt e^{-t} t^{-1/3} \frac{\omega}{\omega^3 + 3t}, \quad (70)$$

где A_0 определяется из нормировки. При больших ω имеем $P(\omega) \sim \omega^{-2}$, что является общим свойством (см. Приложение 4) и соответствует конечным значениям $P(\psi)$ на границах интервала $(0, 2\pi)$.

Если масштабным преобразованием и трансляцией обеспечить максимум $P(\omega)$ при $\omega = 0$ с единичным значением в нем, то распределения (68–70) различаются не очень сильно (рис. 5), свидетельствуя о слабой зависимости $P(\omega)$ от приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}}$.

9. ВНЕШНЕЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗ

Если распределение $P(\omega)$ известно, то его изменение при вариации граничных условий сводится к масштабному преобразованию и трансляциям. При этом изменение внешнего распределения $P(\psi)$ на качественном уровне является легко предсказуемыми и иллюстрируются на рис. 6. Распределение $P(\psi)$ является однородным (рис. 6,а), если $P(\omega)$ имеет вид (68) и соответствует приближению случайных фаз. Уширение распределения $P(\omega)$ приводит к локализации $P(\psi)$ вблизи краев интервала $(0, 2\pi)$, а сужение — к локализации $P(\psi)$ в середине интервала $(0, 2\pi)$ (рис. 6,в). Сдвиг $P(\omega)$ вправо или влево приводит к появлению максимума в правой или левой части интервала $(0, 2\pi)$ (рис. 6,г,д). Если параметр γ отличен от $-\pi/2$, то происходит трансляция по ψ и представленные зависимости справедливы не в интервале $(0, 2\pi)$, а в интервале $(\psi_0, 2\pi + \psi_0)$.

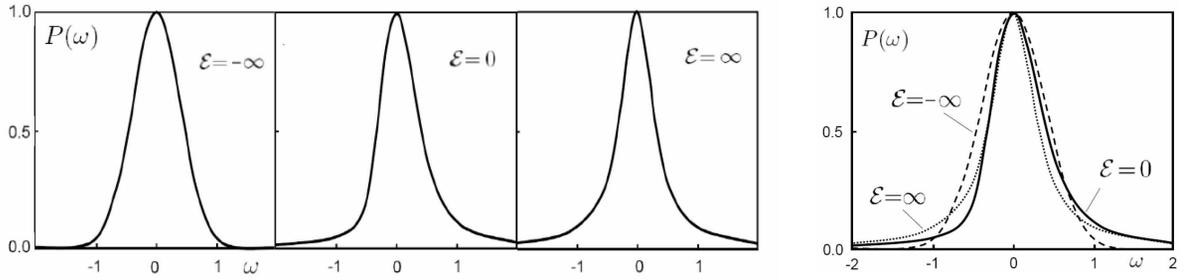


Рис. 5. Распределения $P(\omega)$ для разных энергий мало отличаются друг от друга

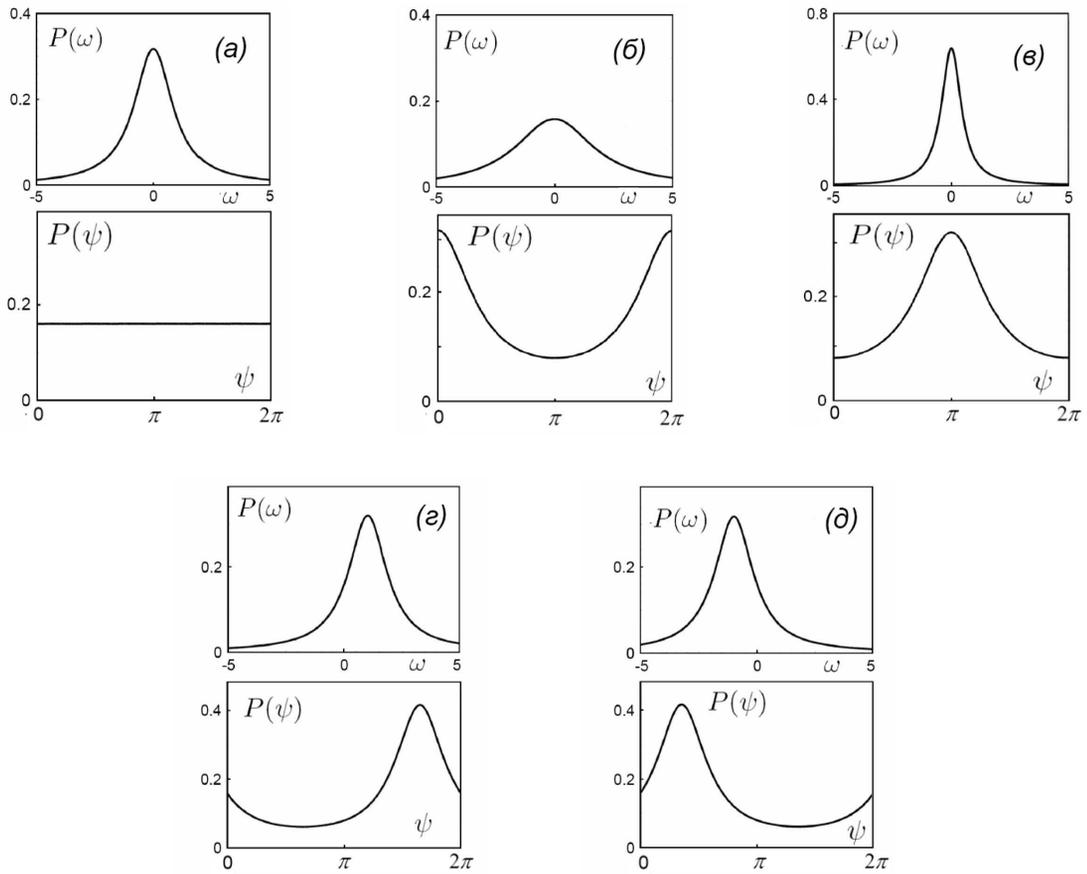


Рис. 6. Изменение распределения $P(\psi)$ при масштабном преобразовании и трансляциях функции $P(\omega)$, если форма последней соответствует приближению случайных фаз

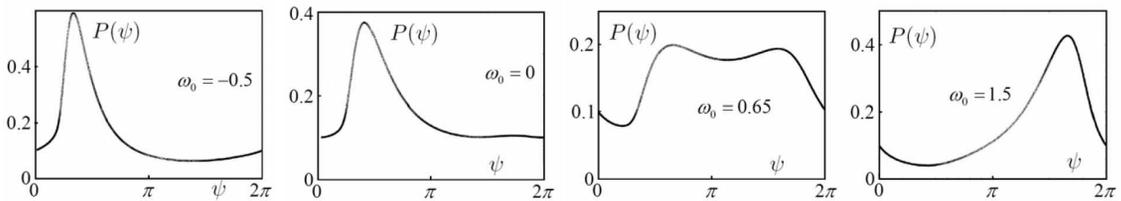


Рис. 7. Изменение распределения $P(\psi)$ при трансляциях критического распределения $P(\omega)$

Если распределение $P(\omega)$ принимается не в виде (68), а в гауссовской форме (69), то рис. 6 качественно сохраняется, но $P(\psi)$ не будет постоянным на рис. 6,а. Асимметрия функции $P(\omega)$ при $\mathcal{E} = 0$, соответствующей критическому распределению (рис. 5), приводит к новому качественному моменту — при ее трансляциях $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$ в некотором интервале значений ω_0 возникает двухгорбое распределение $P(\psi)$ (рис. 7).

10. ВНУТРЕННЕЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗ

Вернемся к случаю $\beta = \pi/2, \gamma = -\pi/2$, рассмотренному в разд.4, и сделаем замену $\omega = -\text{ctg}\psi/2$ в полном уравнении эволюции (31). Если типичные значения ρ достаточно велики, то уравнение эволюции для $P(\rho, \omega)$ принимает вид

$$\frac{\partial P}{2\partial L} = \left\{ \epsilon^2 \frac{4\omega^2}{(1 + \omega^2)^2} \rho^2 P'_\rho - \Delta \frac{2\omega}{1 + \omega^2} \rho P + \right. \\ \left. + \epsilon^2 \frac{2}{1 + \omega^2} \rho P + \dots \right\}'_\rho + \epsilon^2 \left\{ P'_\omega + (b + a\omega^2) P \right\}'_\omega \quad (71)$$

Делая замену $\omega = s\tilde{\omega}$ и переобозначая параметры $\tilde{a} = as^3, \tilde{b} = bs, \tilde{\epsilon}^2 = \epsilon^2 s^{-2}$, имеем

$$\frac{\partial P}{2\partial L} = \left\{ \tilde{\epsilon}^2 s^2 \frac{4s^2 \tilde{\omega}^2}{(1 + s^2 \tilde{\omega}^2)^2} \rho^2 P'_\rho - \tilde{\Delta} \frac{2s\tilde{\omega}}{1 + s^2 \tilde{\omega}^2} \rho P + \right. \\ \left. + \tilde{\epsilon}^2 s^2 \frac{2}{1 + s^2 \tilde{\omega}^2} \rho P + \dots \right\}'_\rho + \tilde{\epsilon}^2 \left\{ P'_\omega + (\tilde{b} + \tilde{a}\tilde{\omega}^2) P \right\}'_{\tilde{\omega}} \quad (72)$$

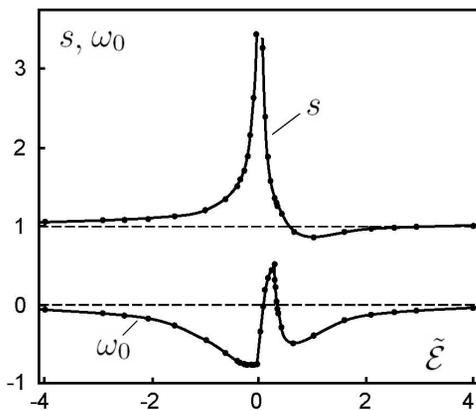


Рис. 8. Зависимость масштабного фактора s и трансляционного сдвига ω_0 от приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}}$

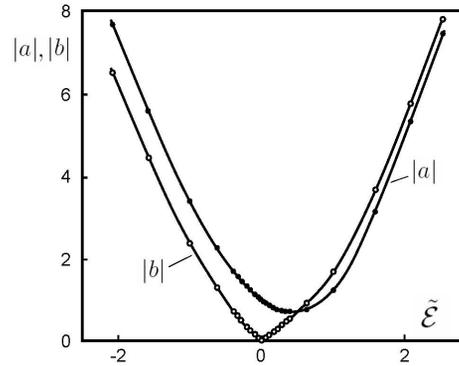


Рис. 9. Параметры a и b для внутреннего распределения фаз как функции приведенной энергии $\tilde{\mathcal{E}}$

Последний член в (72) имеет тот же вид, что в (71), тогда как остальные члены не являются инвариантными. Согласно (5), параметр D определяется коэффициентом при $\rho^2 P'_\rho$ и уравнения (71, 72) приводят к двум выражениям

$$D = 2\epsilon^2 \left\langle \frac{4\omega^2}{(1 + \omega^2)^2} \right\rangle_{a,b} \quad (73)$$

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2 s^2 \left\langle \frac{4s^2 \omega^2}{(1 + s^2 \omega^2)^2} \right\rangle_{\tilde{a},\tilde{b}} \quad (74)$$

которые эквивалентны в силу соотношения (44). Если (74) принято в качестве определения коэффициента диффузии D , то его инвариантность относительно изменения граничных условий выполняется автоматически. Однако, замена a, b, ϵ на $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{\epsilon}$ в (71) приводит к аналогичным заменам в (73), что вместе с (74) дает соотношение

$$\left\langle \frac{4\omega^2}{(1 + \omega^2)^2} \right\rangle_{\tilde{a},\tilde{b}} = s^2 \left\langle \frac{4s^2 \omega^2}{(1 + s^2 \omega^2)^2} \right\rangle_{\tilde{a},\tilde{b}} \quad (75)$$

которое не выполняется при произвольных s , но справедливо лишь при некотором “правильном” выборе масштабного фактора. Нетрудно понять, что этот “правильный” выбор соответствует “внутреннему” распределению фаз. Аналогичные соображения можно привести в отношении параметра v в распределении (6), который определяется коэффициентом при ρP .

Пусть начальные значения a_0, b_0 параметров a и b выбраны из условия $|a_0| = |b_0|$, которое является “естественным” вдали от края исходной зоны. Если $P(\omega)$ — решение уравнения (41) с параметрами a_0, b_0 , то замена $\omega \rightarrow s(\tilde{\omega} + \omega_0)$ при надлежащем выборе

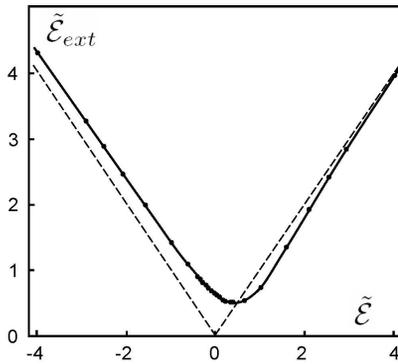


Рис. 10. Зависимость энергии Ферми \tilde{E}_{ext} в идеальных контактах от энергии Ферми в изучаемой системе \tilde{E} для внутреннего распределения фаз. Пунктиром показана зависимость $\tilde{E}_{ext} = |\tilde{E}|$

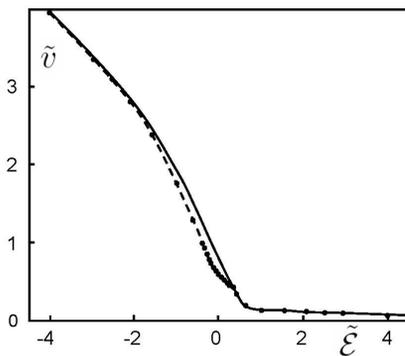


Рис. 11. Наилучшая подгонка параметра ν при действительных значениях трансляционного сдвига ω_0

s и ω_0 позволяет обеспечить правильные значения параметров D и ν , следующие из анализа моментов. Полученное распределение $P(\tilde{\omega})$ после возвращения к переменной ψ будет определять внутреннее распределение фаз. Поведение s и ω_0 как функции приведенной энергии \tilde{E} показано на рис. 8. Масштабный фактор s расходится при $\tilde{E} \rightarrow 0$, в результате чего преобразованные параметры $a = a_0 s^3$ и $b = b_0 s$ уже не связаны соотношением $|a| = |b|$ (рис. 9), которое выполняется лишь при больших $|\tilde{E}|$, т. е. в глубине разрешенной и запрещенной зон. Физический смысл этого обстоятельства более ясен на рис. 10, показывающем зависимость энергии Ферми \tilde{E}_{ext} в идеальных контактах от энергии Ферми \tilde{E} в изучаемой системе. Минимум \tilde{E}_{ext} достигается при значении $\tilde{E} = \tilde{E}_0 = 0.28$, которое нужно интерпретировать как перенормированную границу разрешенной зоны, сдвинутую за счет флуктуаций случай-

ного потенциала. Этот вывод подтверждается тем, что при $\tilde{E} < \tilde{E}_0$ трансляционный сдвиг ω_0 уходит в комплексную плоскость, что имеет простой физический смысл. При $\tilde{E} = \tilde{E}_0$ имеем $\tilde{E}_{ext} = \tilde{E}_0$ (рис. 10) и сдвинутый край зоны оказывается ниже уровня Ферми в идеальных контактах при $\tilde{E} > \tilde{E}_0$ и выше при $\tilde{E} < \tilde{E}_0$. В последнем случае внутренние свойства системы описываются не истинной, а псевдо-трансфер-матрицей, и распределение $P(\psi)$ становится комплексным. Детальное изучение последнего не очень интересно, поэтому при $\tilde{E} < \tilde{E}_0$ в качестве “внутреннего” распределения $P(\psi)$ мы приводим внешнее распределение, наиболее близкое к внутреннему — практически оно близко к модулю комплексного распределения $P(\psi)$. Последнее следует из того, что сдвиг параметра ω_0 в комплексную плоскость сравнительно мал и допускает аналитическое исследование (см. Приложение 5): это иллюстрируется рисунком 11, показывающем наилучшую подгонку параметра ν (при точном воспроизведении D), возможную при действительных ω_0 .

Эволюция внутреннего распределения $P(\psi)$ (с указанной оговоркой) при изменении энергии \tilde{E} показана на рис. 12. Первый ряд рисунков соответствует изменению \tilde{E} от больших положительных значений до значения $\tilde{E} = 0.63$, соответствующего правому минимуму ω_0 на рис. 8; при этом распределение $P(\omega)$ близко к лоренцевской форме (68), а изменение $P(\psi)$ связано в основном с трансляцией $P(\omega)$ в левую сторону (рис. 6,д). Нижний ряд рисунков 12 соответствует изменению \tilde{E} от больших отрицательных значений до значения $\tilde{E} = -0.10$, соответствующего левому минимуму ω_0 на рис. 8; при этом распределение $P(\psi)$ локализовано вблизи $\pi/2$ и постепенно уширяется при росте \tilde{E} , эволюционируя от гауссовской формы (69) к критической форме (70).

Средний ряд рисунков 12 соответствует изменению \tilde{E} между двумя минимумами ω_0 на рис. 8; форма $P(\omega)$ близка к критической, а изменения $P(\psi)$ в основном определяются трансляционным сдвигом ω_0 и соответствуют рис. 7. Заметим, что четвертый и девятый графики на рис. 12 близки друг к другу, так как форма $P(\omega)$ близка к критической, а трансляции по ω примерно одинаковы.

Обсудим механизм реализации внутреннего распределения фаз. Как обсуждалось в [16, 20, 21], распределение ландауэровских сопротивлений $P(\rho)$ испытывает осцилляции аperiодического характера, связанные с тем, что форма распределения $P(\rho)$ существенно зависит от нескольких первых моментов, тогда как моменты $\langle \rho^n \rangle$ являются осциллирующи-

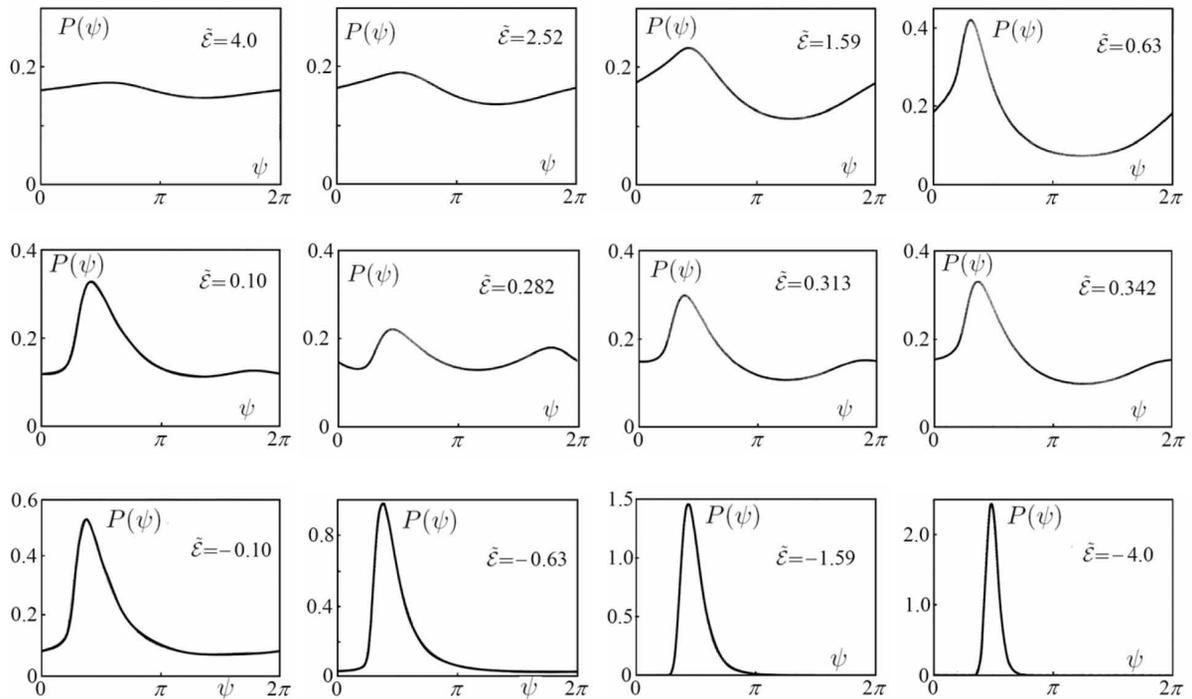


Рис. 12. Эволюция внутреннего распределения фаз при изменении приведенной энергии $\tilde{\epsilon}$

ми функциями L ; при этом n -й момент определяется суперпозицией n дискретных гармоник. Относительная амплитуда осцилляций экспоненциально убывает на масштабе $L \sim \xi$ и при больших L они несущественны. Аналогичная ситуация имеет место для полного распределения $P(\rho, \omega)$; ⁷⁾ при этом осцилляциям подвержены как среднее значение ω , так и ширина его распределения. Поэтому как трансляционный сдвиг ω_0 , так и масштабный фактор s существенно осциллируют на масштабах $L \lesssim \xi$, стремясь при больших L к “правильным” значениям, которые и определяют внутреннее распределение фаз.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы вывели уравнение эволюции для совместного распределения $P(\rho, \psi)$ ландауэровского сопротивления ρ и фазовой переменной ψ . При больших L оно допускает разделение переменных, что обеспечивает существование стационарно-

го распределения $P(\psi)$, определяющего коэффициенты в уравнении эволюции (5) для $P(\rho)$.

В результате проведенного анализа мы приходим к очень простой картине. Фаза ψ оказывается “плохой” переменной, а “правильной” переменной является $\omega = -\text{ctg } \psi/2$. Форма стационарного распределения $P(\omega)$ определяется внутренними свойствами системы и не зависит от граничных условий. Изменение граничных условий приводят к трем эффектам: (а) масштабному преобразованию $\omega \rightarrow s\omega$, в основном связанному с изменением свойств идеальных контактов; (б) трансляции $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$, в основном определяемой наличием δ -образного потенциала на границах системы; (в) трансляции $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$, определяемой размывом границ раздела. Граничные условия существенно влияют на “внешнее” распределение фаз, которое входит в уравнения эволюции, но не влияют на предельное распределение $P(\rho)$ в области больших L , что позволяет говорить о существовании скрытой симметрии в уравнениях эволюции. Предельное распределение $P(\rho)$ является логнормальным, что может быть установлено при

⁷⁾ Распределение $P(\rho)$ определяется четными моментами от элементов T_{ij} трансфер-матрицы T . При анализе $P(\rho, \omega)$ нужно рассматривать и нечетные моменты.

самых общих условиях⁸⁾. Предельное распределение $P(\rho)$ определяется “внутренним” распределением $P(\psi)$, которое получается из стационарного распределения $P(\omega)$ при подходящем выборе масштабного фактора s и трансляционных сдвигов ω_0 и ψ_0 .

Обсуждаемая проблематика не ограничена одномерными системами — аналогичные трудности возникают при анализе ляпуновских экспонент в рамках обобщенной версии [17] уравнения Дорохова–Мелло–Перейра–Кумара [28, 29]. Минимальная ляпуновская экспонента определяет критические свойства для перехода Андерсона (на этом основан известный численный алгоритм, см. ссылки в [17]), и указанная скрытая симметрия может быть существенной при исследовании последнего.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. О РАЗДЕЛЕНИИ ПЕРЕМЕННЫХ В УРАВНЕНИИ (31)

Для разделения переменных в задаче на собственные значения

$$\hat{L}P(\rho, \psi) = \lambda P(\rho, \psi) \tag{A.1}$$

оператор \hat{L} должен представляться в виде суммы двух операторов $\hat{L}_\rho + \hat{M}_\psi$, зависящих только от ρ и ψ соответственно. Условия для разделения переменных в уравнении (31) оказываются более слабыми. В пределе больших L , когда типичные значения ρ достаточно велики, можно положить $R = 2$, после чего уравнение (31) имеет структуру

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}'_\rho + \left\{ \hat{M}_\psi P \right\}'_\psi \tag{A.2}$$

Подставляя $P = P(\rho)P(\psi)$ и разделив на $P(\rho)$, имеем

$$\begin{aligned} -\frac{\partial P(\psi)}{\partial L} + \left\{ \hat{M}_\psi P(\psi) \right\}'_\psi &= \tag{A.3} \\ = \frac{P(\psi)}{P(\rho)} \frac{\partial P(\rho)}{\partial L} - \frac{1}{P(\rho)} \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}'_\rho \end{aligned}$$

Левая часть не зависит от ρ и есть некоторая функция $F(\psi)$. Тогда

$$P(\psi) \frac{\partial P(\rho)}{\partial L} - \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}'_\rho = F(\psi)P(\rho) \tag{A.4}$$

⁸⁾ Более точно, мы рассматривали случайный потенциал малой амплитуды с короткодействующими корреляциями для энергий вблизи края исходной зоны. Если энергия сравнима с шириной зоны, то возникают эффекты соизмеримости фермиевского импульса \bar{k} с постоянной решетки a_0 [22, 23], что может приводить к усложнению ситуации [24, 25].

и интегрируя по ρ получим $F(\psi) \equiv 0$, т.к. левая часть обращается в нуль, а интеграл от $P(\rho)$ равен единице в силу нормировки. В результате правая и левая части уравнения (A.3) обращаются в нуль независимо друг от друга, и уравнение для $P(\psi)$ отщепляется. При этом средние от тригонометрических функций ψ , входящие в (34), (35), определяются стационарным распределением $P(\psi)$, удовлетворяющим уравнению (33).

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. КРАЕВЫЕ МАТРИЦЫ ДЛЯ РАЗМЫТОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА

Краевые матрицы для модели, представленной на рис. 4, могут быть выбраны в виде

$$\begin{aligned} T_l &= \begin{pmatrix} e^{ikd_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikd_1} \end{pmatrix} T_a \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} T_c \tag{A.5} \\ T_r &= T_{\bar{c}} \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_2} \end{pmatrix} T_{\bar{a}} \begin{pmatrix} e^{ikd_2} & 0 \\ 0 & e^{-ikd_2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} T_a &= \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix}, \quad a_1 = \frac{k + k_1}{2k}, \quad a_2 = \frac{k - k_1}{2k}, \\ T_c &= \begin{pmatrix} c & c^* \\ c^* & c \end{pmatrix}, \quad c = \frac{ik_1 + \kappa}{2ik_1}, \tag{A.6} \\ T_{\bar{a}} &= \begin{pmatrix} \bar{a}_1 & \bar{a}_2 \\ \bar{a}_2 & \bar{a}_1 \end{pmatrix}, \quad \bar{a}_1 = \frac{k_1 + k}{2k_1}, \quad \bar{a}_2 = \frac{k_1 - k}{2k_1}, \\ T_{\bar{c}} &= \begin{pmatrix} \bar{c} & \bar{c}^* \\ \bar{c}^* & \bar{c} \end{pmatrix}, \quad \bar{c} = \frac{\kappa + ik_1}{2\kappa}, \end{aligned}$$

Сравнение с [16] показывает, что T_a и $T_{\bar{a}}$ — это краевые матрицы для границы раздела двух металлов, а T_c и $T_{\bar{c}}$ — краевые матрицы для границы раздела металл–диэлектрик.

Сотавляя произведение $T_l T_r$, заметим, что соотношения $T_c T_{\bar{c}} = 1$ и $T_a T_{\bar{a}} = 1$ приводят к существенным упрощениям и при условии (57) произведение сводится к единичной матрице.

Для вычисления T_ϵ запишем

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \epsilon T_l \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} T_r \tag{A.7}$$

и воспользуемся тем, что

$$T_c \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} T_{\bar{c}} = \frac{\kappa}{ik_1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & -1 \end{pmatrix}, \quad (A.8)$$

$$T_a \begin{pmatrix} 1 & e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & -1 \end{pmatrix} T_{\bar{a}} = \begin{pmatrix} P + Q \cos \alpha & Q + P \cos \alpha + i \sin \alpha \\ -Q - P \cos \alpha + i \sin \alpha & -P - Q \cos \alpha \end{pmatrix},$$

после чего соотношение $P^2 = Q^2 + 1$ позволяет привести T_ϵ к виду (18).

ПРИЛОЖЕНИЕ 3. СТЕПЕНЬ ПРОИЗВОЛА ДЛЯ КРАЕВЫХ МАТРИЦ

Принимая краевые матрицы T_l и T_r в виде (60), потребуем, чтобы матрица $T_\delta = T_l t_\delta T_r$ была истинной трансфер-матрицей, удовлетворяющей соотношениям (61); последние достаточно наложить при малых δ , что приводит к условиям

$$ad + bc + a^* d^* + b^* c^* = 0, \quad ab + c^* d^* = 0. \quad (A.9)$$

Первое из них вместе с условием на детерминант (60) приводит к более простым соотношениям

$$2\operatorname{Re} ad = 1, \quad 2\operatorname{Re} bc = -1. \quad (A.10)$$

Полагая

$$a = |a|e^{i\alpha}, \quad b = |b|e^{i\beta}, \quad c = |c|e^{i\gamma}, \quad d = |d|e^{i\delta}, \quad (A.11)$$

получим полный набор условий

$$\begin{aligned} 2|b||c| \cos(\beta + \gamma) &= -1, \\ 2|a||d| \cos(\alpha + \delta) &= 1, \\ |a||b| &= |c||d|, \\ e^{i\alpha + i\beta + i\gamma + i\delta} &= -1, \end{aligned} \quad (A.12)$$

$$|a||d| \sin(\alpha + \delta) - |b||c| \sin(\beta + \gamma) = 0.$$

Нетрудно видеть, что $\sin(\alpha + \delta) = \sin(\beta + \gamma)$, $\cos(\alpha + \delta) = -\cos(\beta + \gamma)$; тогда из последнего соотношения в (A.11) имеем $|a||d| = |b||c|$, что вместе с третьим соотношением дает $|a| = |c|$, $|b| = |d|$. В результате, условие того, что T_δ является истинной трансфер-матрицей, определяет 4-параметрический произвол для матрицы T_l

$$T_l = \begin{pmatrix} |a|e^{i\alpha} & |b|e^{i\beta} \\ |a|e^{i\gamma} & |b|e^{i\delta} \end{pmatrix},$$

$$e^{i\alpha + i\beta + i\gamma + i\delta} = -1, \quad 1 = -2|a||b| \cos(\beta + \gamma). \quad (A.13)$$

Вычисляя матрицу T_ϵ

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 - \bar{\epsilon}(a-b)(c-d) & \bar{\epsilon}(a-b)^2 \\ -\bar{\epsilon}(c-d)^2 & 1 + \bar{\epsilon}(a-b)(c-d) \end{pmatrix}, \quad (A.14)$$

и требуя, чтобы она была истинной трансфер-матрицей, получим

$$\begin{aligned} (a-b)(c-d) + (a^* - b^*)(c^* - d^*) &= 0, \\ (a-b)^2 + (c^* - d^*)^2 &= 0, \end{aligned} \quad (A.15)$$

Полагая

$$(a-b) = re^{i\theta/2}, \quad (c-d) = r_1 e^{i\varphi/2}, \quad (A.16)$$

получим $r = r_1$, $\varphi = \pi - \theta + 2\pi n$, так что

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 - i\bar{\epsilon}r^2(-1)^n & \bar{\epsilon}r^2 e^{i\theta} \\ \bar{\epsilon}r^2 e^{-i\theta} & 1 + i\bar{\epsilon}r^2(-1)^n \end{pmatrix}, \quad (A.17)$$

где n — целое. Замечая, что

$$\begin{aligned} r^2 &= |a-b|^2 = |a|^2 + |b|^2 - 2|a||b| \cos(\alpha - \beta), \\ r^2 &= |c-d|^2 = |a|^2 + |b|^2 - 2|a||b| \cos(\gamma - \delta), \end{aligned} \quad (A.18)$$

имеем $(\alpha - \beta) = \pm(\gamma - \delta) + 2\pi k$. При верхнем знаке получим противоречие, так как $\beta + \gamma = \pi/2 + \pi k$ и левая часть первого соотношения (A.12) обращается в нуль. При нижнем знаке имеем $\gamma = \pi/2 - \alpha + \pi k$, $\delta = \pi/2 - \beta + \pi k'$, где k и k' выбираются четными при $\sin(\beta - \alpha) > 0$ и нечетными в обратном случае. В результате для матрицы T_l приходим к представлению (62) с трехпараметрическим произволом. При четных k, k' имеем четное n в выражении (A.17) для T_ϵ , в результате чего оно сводится к (18) с параметрами K и γ , определенными в (63). При нечетных k, k' имеем нечетное n в (A.17), и приведение к форме (18) производится путем несущественного изменения знака $\bar{\epsilon}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ $P(\omega)$ ПРИ $\epsilon = 0$

Дифференцируя (41) и предполагая при $\omega \rightarrow \infty$ степенную асимптотику $P(\omega) \sim \omega^{-\alpha}$, получим $\alpha = 2$. Вычисляя поправки к асимптотике в виде ряда по обратным степеням ω ,

$$P(\omega) = \omega^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} A_n \omega^{-n}, \quad (A.19)$$

имеем рекуррентную

$$A_0 = 1, \quad A_1 = 0, \quad A_2 = -b/a,$$

$$aA_{n+1} = -bA_{n-1} + nA_{n-2}, \quad n \geq 2. \quad (A.20)$$

Для критического распределения ($\mathcal{E} = 0$) имеем $b = 0$, и коэффициенты ряда находятся в явном виде

$$P(\omega) = \frac{1}{\omega^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+2/3)}{\Gamma(2/3)} \left(\frac{3}{a\omega^3}\right)^k. \quad (A.21)$$

Расходящийся ряд можно просуммировать по Борелю [26], записывая гамма-функцию $\Gamma(k+2/3)$ в виде представляющего ее интеграла и суммируя возникающую геометрическую прогрессию. Полагая $a = -1$ и вводя нормировочный множитель, получим (70).

Выражения (A.19), (A.20) полезны при численном интегрировании уравнения (41) при произвольных b . При $|\omega| > 5$ функция $P(\omega)$ хорошо аппроксимируется рядом (A.19), понимаемом в асимптотическом смысле и суммируемом до минимального члена. Таковую аппроксимацию можно использовать в качестве начального условия при больших положительных ω и интегрировать в сторону уменьшения ω .⁹⁾ При использовании стандартных программ с контролем точности [27] решение автоматически выходит на правильную асимптотику при $\omega \rightarrow -\infty$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 5. ПОВЕДЕНИЕ s И ω_0 В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ

В глубине запрещенной зоны константа C_0 в (41) экспоненциально мала и распределение $P(\omega)$ можно принять в виде

$$P(\omega) = \text{const} \exp\{-b\omega - a\omega^3/3\}. \quad (A.22)$$

При $-a = b \gg 1$ распределение имеет максимум при $\omega = -1$, в окрестности которого оно сводится к гауссовой форме (69). Вычисление средних в (38) дает

$$\begin{aligned} \langle \sin \psi \rangle &= \left\langle -\frac{2\omega}{1+\omega^2} \right\rangle \approx \left\langle 1 - \frac{\tilde{\omega}^2}{2} \right\rangle = 1 - \frac{1}{4|a|}, \\ \langle \sin^2 \psi \rangle &= \left\langle \frac{4\omega^2}{(1+\omega^2)^2} \right\rangle \approx \langle 1 - \tilde{\omega}^2 \rangle \approx 1, \\ \langle \cos \psi \rangle &= \left\langle \frac{\omega^2 - 1}{1 + \omega^2} \right\rangle \approx \langle -\tilde{\omega} \rangle \approx 0, \end{aligned} \quad (A.23)$$

так что для параметров D и v имеем

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2, \quad v = 2\delta - \tilde{\epsilon}^2, \quad (A.24)$$

что в пределах точности согласуется с результатами из анализа моментов [16]; здесь $\tilde{\omega}$ — отклонение от максимума и учтено, что при $|a| = |b|$ параметр ϵ сводится к $\tilde{\epsilon}$.

Чтобы воспроизвести D и v с более высокой точностью, произведем масштабное преобразование и трансляцию распределения (A.22) с $-a = b$; тогда для $s = 1 - \tilde{s}$, $\omega_0 = \tilde{s} + \tilde{\omega}_0$ и $\tilde{s}, \tilde{\omega}_0 \ll 1$ получим

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2 (1 + 2\tilde{s} - \tilde{\epsilon}^2/\delta), \quad (A.25)$$

$$v = 2\delta - \tilde{\epsilon}^2 + (\tilde{s}^2 - \tilde{\omega}_0^2)\delta - \tilde{\epsilon}^2 (2\tilde{\omega}_0 + 2\tilde{s} + 9\tilde{\epsilon}^2/(4\delta)),$$

где учтены сдвиг максимума распределения и слабое отклонение от гауссовской формы. Сопоставляя с результатами из анализа моментов [16]

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2 - \frac{15\tilde{\epsilon}^2}{2\delta}, \quad v = 2\delta - \tilde{\epsilon}^2 + \frac{27\tilde{\epsilon}^2}{4\delta}, \quad (A.26)$$

и учитывая, что $\delta/\tilde{\epsilon}^2 = 4|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}$, получим

$$s = 1 + \frac{11}{32} \frac{1}{|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}}, \quad \omega_0 = \frac{-19 \pm i\sqrt{215}}{32|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}}, \quad (A.27)$$

что объясняет поведение кривых в левой части рис. 8. Трансляционный сдвиг ω_0 оказывается комплексным; для гауссовского распределения легко проверить, что при $|\omega_0| \ll 1$ пренебрежение мнимой частью ω_0 соответствует переходу к модулю комплексного распределения $P(\omega)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, D. S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
2. R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
3. В. И. Мельников, ФТТ **23**, 782 (1981).
4. А. А. Abrikosov, Sol. St. Comm. **37**, 997 (1981).
5. N. Kumar, Phys. Rev. B **31**, 5513 (1985).
6. B. Shapiro, Phys. Rev. B **34**, 4394 (1986).
7. P. Mello, Phys. Rev. B **35**, 1082 (1987).
8. B. Shapiro, Phil. Mag. **56**, 1031 (1987).
9. И. М. Суслов, ЖЭТФ **151**, 897 (2017).

⁹⁾ При интегрировании в сторону увеличения ω возникают неустойчивости, связанные с наличием растущей экспоненты, являющейся решением (41) при $C_0 = 0$.

10. И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, Москва, Наука, 1982.
11. C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
12. X. Chang, X. Ma, M. Yezpez, A. Z. Genack, P. A. Mello, Phys. Rev. B **96**, 180203 (2017).
13. L. I. Deych, D. Zaslavsky, A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **81**, 5390 (1998).
14. L. I. Deych, A. A. Lisyansky, B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **84**, 2678 (2000); Phys. Rev. B **64**, 224202 (2001).
15. L. I. Deych, M. V. Erementchouk, A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **90**, 126601 (2001).
16. И. М. Суслов, ЖЭТФ **156**, 950 (2019).
17. И. М. Суслов, ЖЭТФ **154**, 152 (2018).
18. В. Л. Березинский, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **77**, 2498 (1979).
19. P. Markos, Acta Physica Slovaca **56**, 561 (2006).
20. V. V. Brazhkin, I. M. Suslov, J. Phys.: Cond. Matt. **32** (35), 35LT02 (2020).
21. И. М. Суслов, ЖЭТФ **158**, 911 (2020).
22. M. Kappus, F. Wegner, Z. Phys. B **45**, 15 (1981).
23. V. E. Kravtsov, V. I. Yudson, Ann. Phys. (NY) **326**, 1672 (2011).
24. H. Schomerus and M. Titov, Phys. Rev. B **67**, 100201(R) (2003).
25. L. I. Deych, M. V. Erementchouk, A. A. Lisyansky, B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **91**, 096601 (2003).
26. И. Харди, Расходящиеся ряды, Москва, ИИЛ, 1951.
27. W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Wetterling, Numerical Recipes in Fortran, Cambridge University Press, 1992.
28. О. Н. Дорохов, Письма в ЖЭТФ **36**, 259 (1982).
29. P. A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar, Ann. Phys. (N.Y.) **181**, 290 (1988).

СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ФРУСТРИРОВАННЫХ КОБАЛЬТИТАХ $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ ПРИ РАЗБАВЛЕНИИ Co-ПОДСИСТЕМЫ

З. А. Казей*, В. В. Снегирев, М. С. Столяренко, П. Е. Редчиц^а

^а Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119992, Москва, Россия

Поступила в редакцию 05 июня 2022 г.,
после переработки 05 июня 2022 г.
Принята к публикации 06 июня 2022 г.

Проведены экспериментальные исследования структурных (метрики решетки) и упругих характеристик в области структурного фазового перехода в серии кобальтитов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ при диамагнитном разбавлении кобальтовой подсистемы. Обнаружено, что для отожженных в вакууме стехиометрических образцов при структурном переходе параметр $\Delta a/a$ особенности не обнаруживает, параметры $\Delta b/b$ и $\Delta c/c$ испытывают близкие по величине скачки разного знака. Это приводит к скачку анизотропной (ромбической) $\varepsilon_o \approx -4 \cdot 10^{-3}$ и изотропной (объемной) $\Delta V/V \approx -1 \cdot 10^{-3}$ деформаций. При замещении ионами Zn характер искажения структуры меняется незначительно, а температура перехода T_S линейно падает. Искажение структуры в стехиометрических образцах сопровождается характерными аномалиями модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$ и внутреннего трения в области T_S , тогда как для нестехиометрических закаленных образцов аномалии полностью пропадают. Диамагнитное замещение ионами Zn приводит к резкому уменьшению и затем полному исчезновению скачка на кривой $\Delta E(T)/E_0$. Это может быть связано с изменением соотношения изотропной и анизотропной деформации при структурном переходе при замещении в кобальтовой подсистеме.

DOI: 10.31857/S0044451022110177
EDN: LBCBMR

1. ВВЕДЕНИЕ

Геометрически фрустрированные системы остаются предметом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований последних лет [1, 2]. Наиболее изученными системами являются антиферромагнетики с сеткой Кагоме и структурой пирохлора, которые имеют неупорядоченные основные состояния как для классических [3], так и для квантовых спинов [4]. Основное состояние решетки Кагоме для классических спинов с обменом между ближайшими соседями сильно вырождено, так как любое состояние, удовлетворяющее условию $S_1 + S_2 + S_3 = 0$ для отдельного треугольника, является основным, в то время как в треугольной решетке при этих условиях возникает состояние с дальним магнитным порядком. Было показано, что в этих

системах различные слабые возмущения, такие как небольшие искажения структуры, взаимодействие со вторыми соседями, локальная анизотропия, биполярные взаимодействия, тепловые флуктуации и др. могут оказывать сильное влияние на вырождение основного состояния и приводить к состоянию с дальним магнитным порядком.

Редкоземельные (РЗ) кобальтиты $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ интересны тем, что в их структуре имеются одновременно чередующиеся треугольные слои и слои Кагоме. Редкоземельные кобальтиты сложного состава демонстрируют необычное магнитное поведение, обусловленное фрустрацией обменных взаимодействий и переменной валентностью в кобальтовой подсистеме [5–10]. Подобные соединения позволяют изучать фундаментальные проблемы физики твердого тела и магнетизма, такие как нетривиальные основные состояния, эффекты ближнего порядка, а также сложные магнитные структуры, спонтанные и индуцированные фазовые переходы различной природы.

* E-mail: kazei@plms.phys.msu.ru

Слоистые кобальтиты $\text{R}(\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x})$ образуются с ионами Y, Ca и тяжелыми РЗ-ионами, начиная с Tb. Стехиометрические соединения с трехвалентным ионом R^{3+} содержат ионы кобальта смешанной валентности Co^{2+} и Co^{3+} в соотношении 3:1, которые распределены в структуре неупорядоченно по тетраэдрическим позициям двух типов. Соотношение разновалентных ионов $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ в кобальтовой подсистеме можно варьировать с помощью неизовалентного замещения $\text{R}^{3+} \rightarrow \text{Ca}^{2+}$ или $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+} \rightarrow \text{Zn}^{2+}/\text{Al}^{3+}$, а также изменением содержания кислорода $(7+x)$.

Кристаллическая структура РЗ-кобальтитов при высоких температурах описывается гексагональной $P6_3mc$ (или тригональной $P31c$) пространственной группой [11–15]. В каркасной кристаллической структуре тетраэдры CoO_4 , объединенные общими углами, образуют упакованные поочередно вдоль оси c треугольные слои и слои Кагоме. Более крупные октаэдрические и кубооктаэдрические позиции в трехмерной тетраэдрической сетке занимают соответственно катионы R^{3+} и Ba^{2+} . В бесконечной плоской сетке из связанных треугольников фрустрации в магнитной системе приводят к вырожденному основному состоянию и отсутствию дальнего магнитного порядка даже при значительных константах обменного взаимодействия [16].

Небольшое искажение структуры в стехиометрических РЗ-кобальтитах снимает фрустрацию обменных взаимодействий, что благоприятствует развитию дальнего магнитного порядка в Со-подсистеме ниже температуры T_S структурного перехода [17–19]. Структуры нестехиометрических соединений остаются неискаженными, фрустрации в системе сохраняются, и в системе развивается только ближний магнитный порядок.

Y-кобальтит, содержащий один тип магнитных ионов, испытывает структурный переход при $T_S = 313$ К, приводящий к понижению симметрии от гексагональной до орторомбической (пространственная группа $Pbn2_1$, $a_o \approx a_h$, $b_o \approx \sqrt{3}a_h$) и сопровождается аномалиями упругих, магнитных и транспортных свойств. Для кобальтитов с магнитными РЗ-ионами критическая температура структурного перехода T_S монотонно понижается при уменьшении радиуса РЗ-иона [20–23]. Ниже структурного перехода в YBaCo_4O_7 наблюдается появление трехмерного антиферромагнитного упорядочения в Со-подсистеме при $T_N \approx 110$ К [5] с понижением симметрии до моноклинной $P112_1$ [16, 24]. При дальнейшем понижении температуры наблюдается еще один магнитный фазовый переход при $T_{N2} \sim 70$ К

[25], который обусловлен спиновой переориентацией в Со-подсистеме [16]. Из-за фрустрированности обменных взаимодействий дальний магнитный порядок устанавливается при температуре существенно ниже парамагнитной температуры $\theta_{CW} = -508$ К и характеризуется сложной неколлинеарной магнитной структурой [5, 16].

Кристаллическая структура слоистого кобальтита изучена достаточно подробно в гексагональной фазе и значительно меньше в искаженной орторомбической фазе. В настоящее время вопрос о природе и механизме структурного перехода остается еще открытым. Обсуждаются различные модели, такие как зарядовое упорядочение в Со-подсистеме [20], оптимизация ненасыщенных связей Ba координационного многогранника [14], спин-решеточная нестабильность и даже возникновение ближнего антиферромагнитного порядка/корреляций в Со-подсистеме [22].

Ни одна из предложенных структур искаженной фазы, $Pbn2_1$ или $Cmc2_1$, не подтверждает представления о зарядовом упорядочении. Уточнение структурных параметров обнаружило больший размер позиции Co1 по сравнению с Co2, $\langle d \rangle_{\text{Co1-O}} < \langle d \rangle_{\text{Co2-O}}$, в рамках обеих принятых моделей $Pbn2_1$ и $Cmc2_1$ искаженной фазы. Это является аргументом против большей валентности Co1, чем у Co2 и не подтверждает представления о зарядовом упорядочении при фазовом переходе [26]. Авторы работы [14] предполагают, что переход в $\text{YbBaCo}_4\text{O}_7$ является следствием ненасыщенных связей ионов Ba^{2+} в высокотемпературной фазе. В работе [26] переход при T_S относят к переходам типа смещения в тетраэдрической сетке и приписывают к конденсации либрационной фононной моды, связанной с вращением тетраэдров как целых внутри звездобразных тетраэдрических единиц, являющихся строительными блоками сетки Кагоме.

Характер изменения параметров решетки (метрика решетки) при структурном переходе, а также изменение температуры перехода и величины искажения при различных замещениях в Со- и РЗ-подрешетках или отклонении от стехиометрии изучены недостаточно. Влияние искажения структуры на поведение фрустрированной Со-подсистемы исследовалось для серии Y-кобальтитов с небольшим отклонением от стехиометрии [27]. В частности, было обнаружено, что упругие свойства слоистых кобальтитов $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ в очень сильной степени зависят от избытка кислорода. В настоящей работе исследуется влияние диамагнитного разбавления в фрустрированной кобальтовой подсистеме на структурные

фазовые переходы, а также на структурные и упругие характеристики в серии слоистых кобальтитов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ близких к стехиометрическому.

2. ОБРАЗЦЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ТЕХНИКА

Исследования структурных и упругих свойств проводились на поликристаллических образцах $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$), синтезированных по керамической технологии. Для твердофазного синтеза на воздухе использовались оксиды Y_2O_3 (ИтО-МГр.), Co_3O_4 (99.7 %, Alfa-Aesar) и карбонат $BaCO_3$ (ос. ч.), предварительно отожженные при температурах соответственно $800^\circ C$, $700^\circ C$ и $400^\circ C$. Синтез проводился в три стадии при температурах 900, 1000 и $1100^\circ C$ (время отжига при каждой температуре 20 часов) с закалкой в конце отжига и промежуточным перетирированием. Перед последним отжигом при температуре $1100^\circ C$ порошок прессовался в таблетки диаметром 15 мм и толщиной 3 мм (см. детали в [28]).

После синтеза и закалки от температуры 900– $950^\circ C$ керамики $RBaCo_4O_{7+x}$ с ионами от Ду до Ер имеют, как правило, небольшой избыток кислорода, а с более тяжелыми ионами Тм–Лу, близки к стехиометрическому. Для получения требуемого содержания кислорода (в том числе стехиометрического с $x = 0$) и его однородного распределения по объему образцы керамики подвергались дополнительной термообработке [29].

В случае системы $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ закаленные образцы Q имели небольшой избыток кислорода $x \leq 0.07$, а для получения образцов A с $x \approx 0$ проводился отжиг в вакууме при $500^\circ C$ [28]. После отжига величина отклонения от стехиометрии по кислороду становилась отрицательной (дефицит) и заметно уменьшалась по модулю для всех изучаемых образцов. Таким образом, несмотря на то, что образцы после отжига в вакууме были слабо нестехиометрическими, величина отклонения x заметно уменьшилась. Структурные и магнитные переходы на таких образцах, как показывают исследования, являются более резкими.

Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводились на дифрактометре Stoe Stadi P с монохроматором на первичном пучке ($CoK_{\alpha 1}$ -излучение). Температурные рентгеновские измерения проводились на дифрактометре Rigaku «Гейгерфлекс» на излучении $CoK_{\alpha 1, \alpha 2}$ (а также на $FeK_{\alpha 1, \alpha 2}$) без монохроматора с низкотемпературной

камерой “Oxford Instruments” (Англия), позволяющей получать и поддерживать температуру с точностью 0.5 К в интервале (77–350) К. При комнатной температуре все линии на рентгенограммах исследуемых образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$) до и после отжига индицировались в рамках гексагональной структуры (образцы содержали небольшое количество, около 1–3%, оксида иттрия). Анализ рентгенограммы в интервале углов (18 – 120°) при температурах 300 и 80 К проводился по методу Ритвельда с использованием программы Full Prof. Это позволило определить значения параметров a , b и c гексагональной или слабо искаженной гексагональной (орторомбической) элементарной ячейки (далее используются обозначения a , b и c для параметров орторомбической ячейки). Качество описания рентгенограммы определялось величиной интегральной разностной функции χ^2 . Для температурных измерений трех параметров решетки ромбической структуры использовались два близко расположенных (расщепленных) рефлекса ((260) + (400)) и рефлекс (004) с углами соответственно $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ и $2\theta_3 \approx 41^\circ$.

Модуль Юнга E и коэффициент внутреннего трения q^{-1} измерялись методом составного резонатора на частоте около 100 кГц в интервале температур (80–300) К на оригинальной автоматизированной установке (более подробное описание см. в [23]). Температурные измерения проводились в режиме стационарного состояния, а температурный шаг (точность измерения ± 0.03 К) и выдержка в области фазового перехода варьировались в широких пределах. Из сглаженной экспериментальной амплитудно-частотной характеристики $A_{sm}(f)$ в области резонанса определялись амплитуды и частоты резонанса и антирезонанса. Температурные зависимости амплитуд и частот резонанса и антирезонанса позволяли определять изменение модуля Юнга $E(T)$ и поглощения (коэффициента внутреннего трения) $q^{-1}(T)$ в широком диапазоне температур.

Содержание кислорода в образцах определялось йодометрическим титрованием [30] на оригинальной автоматизированной установке, управляемой компьютерной программой (более подробное описание см. в [23]). Для каждого образца было проведено два-три последовательных эксперимента, при которых около 30 мг исследуемого образца растворялись в 2 М-растворе HCl, содержащем избыток KI. Восстановление высоковалентных ионов Co^{3+} до ионов Co^{2+} приводило к образованию в растворе стехиометрического количества йода, который титровался 0.02 М-раствором $Na_2S_2O_3$, дозируемым

электронной поршневой бюреткой. Конечная точка титрования (точка эквивалентности) определялась по скачку потенциала в процессе химической реакции при измерении ЭДС обратимого гальванического элемента. Относительная ошибка определения отклонения x кислорода от стехиометрии составляет примерно 1.5 %.

Рентгенограммы образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$), снятые при комнатной температуре до и после отжига, обнаруживают заметное изменение параметров решетки (рис. 1) при термообработке, особенно сильное для параметра c ($\Delta c/c = 2.5 \cdot 10^{-3}$). Замещение атомов Co^{2+} атомами Zn^{2+} в тетраэдрах (ионные радиусы равны соответственно 0.74 Å и 0.72 Å) приводит к систематическому увеличению параметров a и c кристаллической решетки отожженных образцов при увеличении y (рис. 1; параметры для состава с $y = 0$ выпадают из зависимости, так как этот образец при комнатной температуре является уже искаженным). Относительные изменения параметров для отожженных составов A при изменении от $y = 0.1$ до $y = 0.3$ составляют $\Delta c/c = 0.41 \cdot 10^{-3}$ и $\Delta a/a = 0.59 \cdot 10^{-3}$. Эти изменения примерно в 1.5 раза меньше, чем для закаленных образцов Q . Для серии закаленных образцов отметим аномальное уменьшение параметра a при увеличении концентрации y ионов Zn^{2+} . Отожженные образцы являются, на наш взгляд, более равновесными по распределению ионов Zn^{2+} и нестехиометрического кислорода.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1 Рентгеноструктурный анализ

Структурные исследования системы образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ представляют интерес с точки зрения выявления особенностей фазового перехода – зависимости его температуры и величины искажения от замещения. Для серии образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_7$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$) все линии на рентгенограмме при комнатной температуре индицируются в рамках гексагональной структуры. На рентгенограмме при $T = 80$ К наблюдается заметное различие для ряда рефлексов (наиболее сильно для рефлексов с углами $2\theta \approx 63$ и 69°), чувствительных к ромбическому искажению) и структура описывается с учетом небольшого ромбического искажения.

Измерение полной рентгенограммы с хорошей статистикой при различных температурах требует

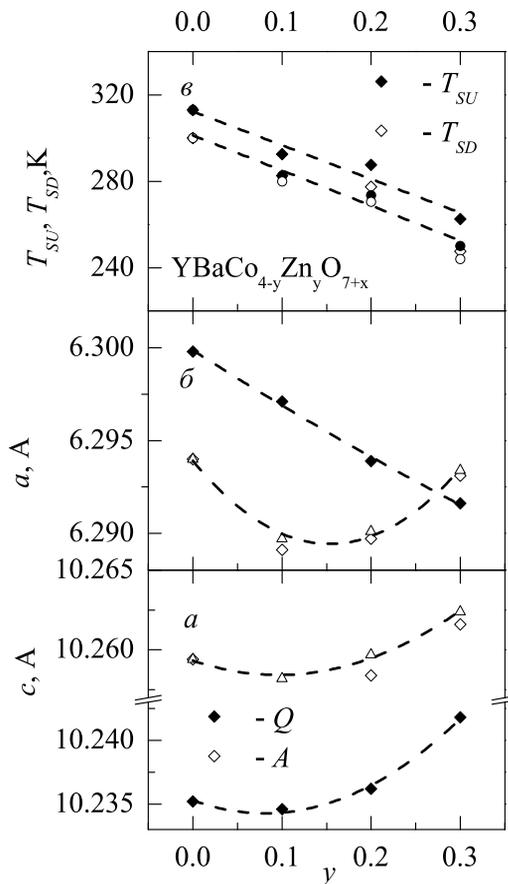


Рис. 1. Зависимости параметров a и c элементарной ячейки от концентрации ионов Zn для закаленных (Q , темные символы) и отожженных (A , светлые символы) образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ при комнатной температуре ($a, б$). Зависимости температур структурного перехода при нагреве T_{SU} (темные символы) и при охлаждении T_{SD} (светлые символы) от концентрации ионов Zn для отожженных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ ($в$)

значительного времени. Однако, если характер искажения структуры установлен при $T = 80$ К и с повышением температуры не меняется, для исследования параметров искаженной ромбической решетки достаточно измерения по температуре положения трех пиков. Сильный пик, чувствительный к ромбическому искажению ((260) + (400)) с брэгговским углом $2\theta = 69^\circ$, дает информацию о наличии искажений в образце. Для всех замещенных образцов пик при угле 69° является одиночным при комнатной температуре, что свидетельствует об отсутствии искажений. При понижении температуры возникает небольшое ромбическое искажение структуры, для изучения которого снимался этот пик в интервале (80–305) К. Обработка пика проводилась с помощью одной из утилит программы Stoe WinXPow Profile

Fitting. Экспериментальные пики аппроксимировались функцией псевдо-Войта, а оптимальное описание профиля расщепленного пика определялось по минимальному значению разностной функции χ^2 .

Рассмотрим подробнее искажение структуры на примере $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с величиной разбавления $y = 0.1$. Расщепление рефлекса ((260) + (400)), чувствительного к ромбическому искажению, напрямую дает величину искажения

$$\varepsilon = (a - b/\sqrt{3})/a = 2(d_1^2 - d_2^2)/(4d_1^2 - d_2^2),$$

$$d_{1,2}^{-1} = 2 \sin(\theta_{1,2})/\lambda,$$

где $\theta_1 = \theta_{400}$, $\theta_2 = \theta_{260}$ — брэгговские углы соответствующих рефлексов. При $T = 300$ К на $\text{K}_{\alpha 1, \alpha 2}$ -излучении Co наблюдается нерасщепленный дублетный рефлекс для $d_1 = d_2$ при $b = a\sqrt{3}$, тогда как при температуре ниже 280 К этот рефлекс обнаруживает расщепление на две линии. При этом высокоугловая компонента расщепленного рефлекса с $2\theta_2$ остается на месте и возникает дополнительная линия, смещенная на $\Delta(2\theta_1) \approx 0.25^\circ$. Расщепление рефлекса с углом $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ возникает скачком при температуре фазового перехода $T_S \approx 280$ К и уменьшается при понижении температуры до 80 К. Сложный профиль расщепленной линии описывается двумя дублетами с соотношением интенсивностей расщепленных компонент 2 : 1, соответствующим статистической величине для этого типа искажения.

Рефлекс (004) позволяет определить изменение параметра c с температурой. Брэгговский угол $2\theta_3 \approx 41^\circ$ скачком возрастает на $\Delta(2\theta_3) \approx 0.2^\circ$ при T_S и продолжает увеличиваться при понижении температуры до 80 К. Этот рефлекс при ромбическом искажении решетки остается нерасщепленным, и его двойная структура в области T_S отражает двухфазное состояние образца, когда в диапазоне около 10 К сосуществуют две фазы. Наличие двухфазного состояния вблизи T_S на рефлексе с углом $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ проявляется как увеличение интенсивности I_2 высокоугловой компоненты, на которую накладывается рефлекс гексагональной фазы с тем же брэгговским углом. В области двухфазного состояния интенсивность $I_1/(I_1 + I_2)$ низкоугловой компоненты рефлекса уменьшается, а интенсивность $I_2/(I_1 + I_2)$ высокоугловой растет, так что соотношение интенсивностей не соответствует статистическому 2 : 1 (вставка на рис. 2а).

Более подробно двухфазное состояние исследовалось для образца с $y = 0.3$. Интенсивность низкоугловой компоненты рефлекса с углом $2\theta_1 \approx 69^\circ$ при нагреве начинает падать выше $T = 245$ К и пропадает полностью при 265 К (вставка на рис. 2б, левая

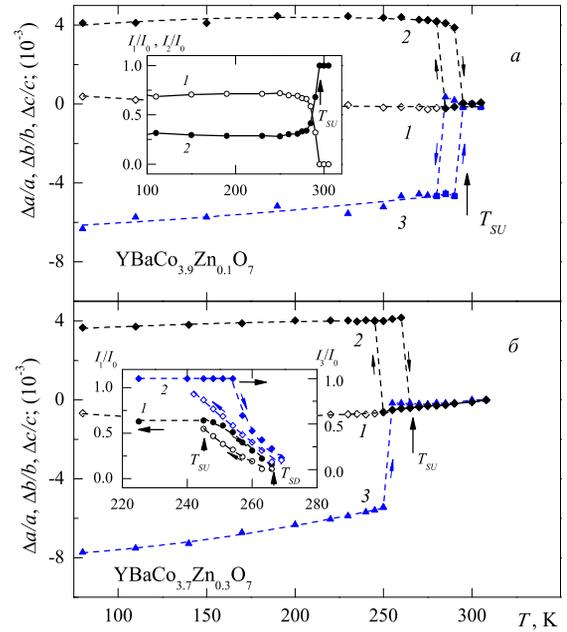


Рис. 2. Относительные изменения параметров решетки (кривая 1 — $\Delta a/a$, 2 — $\Delta b/b$, 3 — $\Delta c/c$) с температурой стехиометрических замещенных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с разбавлением $y = 0.1$ (а) и 0.3 (б). Все зависимости нормированы на значение параметров при $T_S = 300$ К: $\Delta a_i/a_i = (a_i(T) - a_{i0})/a_{i0}$, $a_{i0} = a_i(T = 300\text{K})$; $a_i = a, b, c$. На вставке к панели а показаны зависимости относительной интенсивности компонент (400) (I_1/I_0 , 1) и (260) (I_2/I_0 , 2) расщепленного пика при фазовом переходе. На вставке к панели б показаны зависимости относительной интенсивности пиков (400) (I_1/I_0 , 1), (004) (I_3/I_0 , 2) образца с $y = 0.3$ в области двухфазного состояния при нагреве и охлаждении

шкала). При охлаждении, наоборот, эта компонента появляется ниже $T = 250$ К, но при $T = 245$ К еще не достигает максимального значения. Интенсивность высокоугловой компоненты для пика с углом $2\theta_3 \approx 41^\circ$ заметно уменьшается (а низкоугловой начинает появляться) только выше $T = 255$ К и полностью пропадает выше $T = 270$ К (вставка на рис. 2б, правая шкала). Такое различие областей двухфазного состояния по двум рефлексам разного типа не совсем понятно и может свидетельствовать о сложном характере искажения структуры при фазовом переходе.

Значения параметров ячейки для образцов с $y = 0.1$ и 0.3, полученные обработкой пиков при различных температурах в области (80–305) К, приведены на рис. 2. Для удобства сравнения всех параметров решетки $\Delta a/a$, $\Delta b/b$, $\Delta c/c$, объема $\Delta V/V$ и величины ромбического искажения ($\varepsilon_o = \Delta a/a - \Delta b/b$) далее на рисунках показаны их

относительные изменения, нормированные на значения соответствующего параметра при T немного выше T_S , например

$$\begin{aligned}\Delta a/a &= \Delta a(T)/a_0, \\ \Delta a(T) &= a(T) - a_0, \\ a_0 &= a(T = 300 \text{ К}).\end{aligned}$$

Рассмотрим характер изменения метрики решетки при фазовом переходе для образца с $y = 0.1$ (рис. 2а). Интересно, что при фазовом переходе параметр a не испытывает никаких скачков и практически не меняется по величине. Параметры b и c обнаруживают скачки разного знака и разной величины $\Delta b/b \approx -4 \cdot 10^{-3}$ и $\Delta c/c \approx 5 \cdot 10^{-3}$, что приводит к скачку объема $\Delta V/V \sim 1 \cdot 10^{-3}$. Ниже температуры перехода параметры b и a слабо меняются, параметр c уменьшается при уменьшении температуры. Диапазон двухфазного состояния, определенный по параметру c , составляет примерно (280–295) К. Выше T_S (в гексагональной фазе) параметры a и $b' = b/\sqrt{3}$ совпадают. Для образца с $y = 0.3$ температура T_S уменьшается, а максимальное изменение параметра $\Delta c/c$ в диапазоне (80– T_S) К и скачок при T_S несколько увеличиваются (рис. 2б; для удобства сравнения масштабы на рис. а и б по оси ординат выбраны одинаковыми).

В образцах с различным замещением y полуширина всех рефлексов на рентгенограмме в неискаженной фазе несколько увеличивается, что типично для замещенных и разбавленных систем и отражает неоднородность параметров структуры по объему образца. Характер расщепления и изменения рефлексов при структурном переходе в целом остается таким же, меняются только величины искажения решетки и скачков параметров. Отметим, что для всех замещенных образцов отношение интенсивностей компонент расщепленного рефлекса с $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ при ромбическом искажении структуры соответствует статистическому 2 : 1. Это свидетельствует о сохранении знака ромбического искажения. Элементарная ячейка растягивается вдоль одной из осей второго порядка, перпендикулярных гексагональной оси, тогда как вдоль двух других эквивалентных осей размер ячейки не меняется.

Небольшую деформацию решетки при структурном переходе принято описывать в терминах анизотропной (изменение степени ромбического искажения) $\varepsilon_o = (\Delta a/a - \Delta b/b)$ и изотропной (изменение объема) $\Delta V/V = \Delta a/a + \Delta b/b + \Delta c/c$ деформаций. Анизотропная деформация, как уже говорилось, однозначно определяется расщеплением ре-

флекса ((400) + (260)) и измеряется достаточно точно, так как связанная с деюстировкой образца систематическая ошибка не сказывается на точности измерений. Изменение объема при условии $\Delta a/a \approx 0$ определяется, как следует из формулы, близкими по величине и имеющими разные знаки изменениями параметров $\Delta b/b$ и $\Delta c/c$. Поэтому скачок объема $\Delta V/V$ при фазовом переходе невелик, а ошибка его определения значительная (за счет систематических ошибок). Поэтому для анализа изменения деформации решетки при фазовом переходе в зависимости от замещения y ионами Zn мы используем далее величины ε_o и $\Delta c/c$.

Для незамещенного образца с $y = 0$ фазовый переход сопровождается скачками степени ромбического искажения $\varepsilon_o \approx -4 \cdot 10^{-3}$ (рис. 3) и параметра $\Delta c/c$ (рис. 3), а также объема $\Delta V/V \sim -1 \cdot 10^{-3}$. С понижением температуры от $T \leq T_S$ параметр c уменьшается, параметр b практически не меняется, а параметр a , наоборот, немного растет (отрицательное тепловое расширение), что приводит к уменьшению степени ромбического искажения $\varepsilon_o(T)$ в два раза при $T = 80$ К (кривая на нижней части рис. 3). Похожее поведение наблюдалось ранее для близкого соединения – стехиометрического Er-кобальтита [31, 32].

При увеличении замещения y ионами Zn величина скачка ромбической деформации при T_S немного растет, а монотонное изменение при более низких температурах уменьшается. Таким образом, для образца с $y = 0.3$ величина ромбической деформации при $T = 80$ К максимальна и составляет $\varepsilon_o \approx -5 \cdot 10^{-3}$. Изменение параметра $\Delta c/c$ в зависимости от замещения y ионами Zn обнаруживает аналогичные закономерности. Величина скачка $\Delta c/c$ при T_S немного растет, а монотонное изменение при более низких температурах уменьшается (рис. 4). Скачки параметров $\Delta b/b$ и $\Delta c/c$ при фазовом переходе обуславливают небольшой скачок объема $\Delta V/V$, который недостаточно надежно регистрируется на фоне разброса экспериментальных данных. Отметим, что диамагнитное разбавление ионами Zn в серии кобальтитов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ иначе сказывается на объемной деформации, чем отклонение от стехиометрии по кислороду, исследуемое в Er-кобальтите [32, 36].

Фазовые переходы в тетраэдрических и октаэдрических сетках подразделяются на переходы типа смещения и типа порядок-беспорядок. Фазовые переходы смещения в тетраэдрических сетках описаны в работе [33] и часто вызываются мягкими оптическими фононами. Эти моды могут распро-

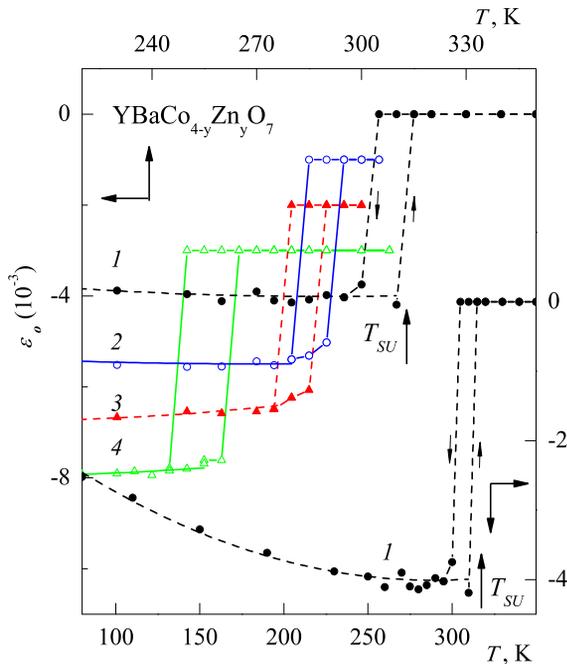


Рис. 3. Изменения степени ромбического искажения $\varepsilon_o = (\Delta a/a - \Delta b/b)$ с температурой стехиометрических замещенных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с различным разбавлением Zn (кривая 1 — $y = 0$, 2 — $y = 0.1$, 3 — $y = 0.2$, 4 — $y = 0.3$). В нижней части рисунка показана зависимость $\varepsilon_o(T)$ для образца с $y = 0$ в более широком диапазоне температур

страняться в виде поворота тетраэдров без их искажений [34] (жесткие моды/rigid-unit modes или RUM [35]) и наиболее характерны для систем, содержащих цепочки тетраэдров. В пределе смещения между температурой перехода T_S и углом φ_0 поворота тетраэдров при $T = 0$ К установлена связь $k_B T_S = K \varphi_0^2$. Таким образом, при понижении температуры T_S угол φ_0 поворота и связанная с ним ромбическая деформация уменьшаются. Для системы $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ эксперимент обнаруживает, наоборот, увеличение анизотропной деформации при понижении температуры по РЗ-ряду или при разбавлении кобальтовой подсистемы.

3.2 Упругие свойства системы $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$

Для исследования влияния разбавления в Со-подсистеме ионами Zn^{2+} на структурные переходы проводились также измерения упругих свойств серии соединений $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$). Для удобства сравнения на рисунках приведены относительные изменения модуля

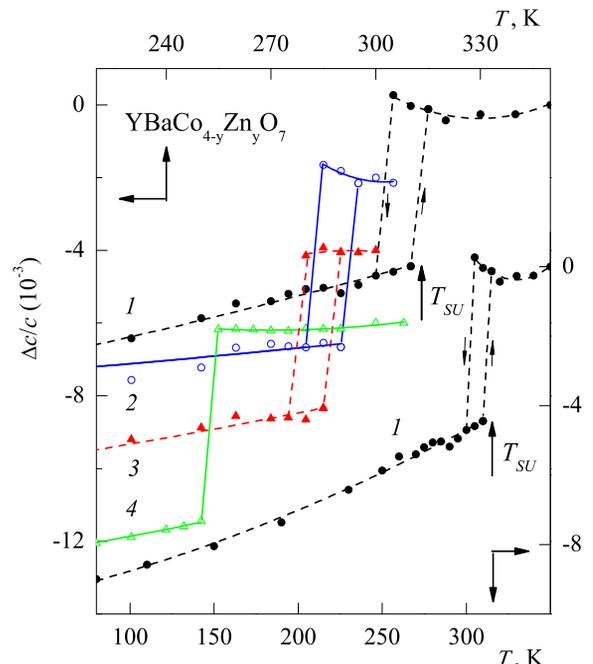


Рис. 4. Изменения параметра $\Delta c(T)/c$ с температурой стехиометрических замещенных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с различным разбавлением Zn (кривая 1 — $y = 0$, 2 — $y = 0.1$, 3 — $y = 0.2$, 4 — $y = 0.3$). В нижней части рисунка показана зависимость $\Delta c/c(T)$ для образца с $y = 0$ в более широком диапазоне температур

$\Delta E(T)/E_0$, $\Delta E(T) = E(T) - E_0$, $E_0 = E(T = 300\text{K})$, нормированные на значение E_0 при $T = 300$ К.

Кривые $\Delta E(T)/E_0$, полученные при медленном охлаждении (темные точки) и медленном нагреве (светлые точки), обнаруживают различие, которое постепенно уменьшается при последующих термоциклированиях (гистерезис, рис. 5). Последовательное термоциклирование приводит к стабильным кривым с петлями гистерезиса, которые приводятся далее на рисунках. Одной из причин гистерезиса на кривой $\Delta E(T)/E_0$ может быть различное доменное состояние образца ниже T_S при термоциклировании.

Структурный фазовый переход в $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ обуславливает смягчение модуля Юнга при понижении температуры, которое начинается значительно выше температуры фазового перехода. Таким образом, наличие смягчения и выраженного минимума на кривой $\Delta E(T)/E_0$ при понижении температуры свидетельствуют о фазовом переходе. Кроме того, структурный переход сопровождается значительным гистерезисом, при котором вблизи T_S кривая, соответствующая охлаждению образца, проходит выше кривой, соответствующей нагреванию.

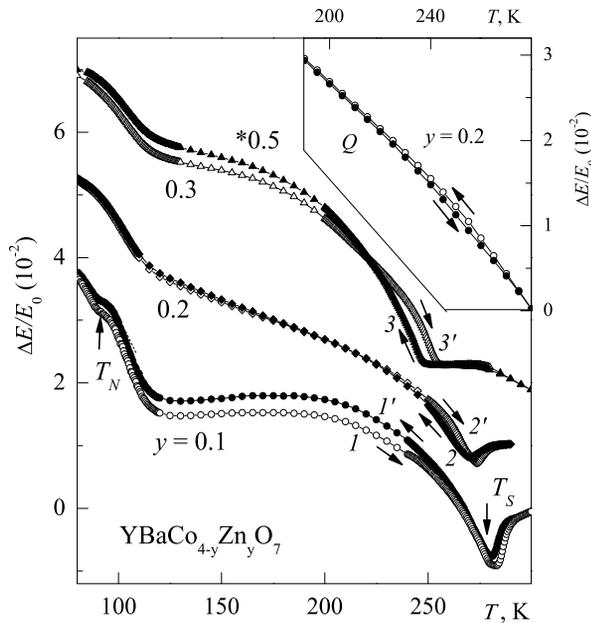


Рис. 5. Зависимости относительной величины модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$ от температуры для стехиометрических замещенных образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ с различным разбавлением Zn (кривая 1 — $y = 0.1$, 2 — $y = 0.2$, 3 — $y = 0.3$) при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки; кривые для различных образцов смещены по вертикальной оси на произвольную величину). На вставке показана зависимость от температуры модуля Юнга в области структурного перехода для закаленного образца Q с $y = 0.2$

При увеличении разбавления кобальтовой подсистемы на кривых $\Delta E(T)/E_0$ наблюдается уменьшение минимумов и смещение их в область более низких температур (рис. 5). Температуры локальных минимумов, обусловленных структурными переходами, для образцов с $y = 0.1, 0.2, 0.3$ при нагреве T_{SU} и охлаждении T_{SD} лежат ниже 300 К, т. е. искажение структуры при комнатной температуре отсутствует. Это поведение упругих модулей для образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ согласуются с рентгеновскими данными о температурах структурных переходов для этих соединений.

Полезно сравнить зависимости $\Delta E(T)/E_0$ модуля Юнга от температуры для отожженного и закаленного образцов (см. вставку на рис. 5 для образца Q с $y = 0.2$). До отжига выраженных минимумов и аномалий в области температур (200–280) К не наблюдалось ни для одного из образцов. В области перехода присутствовали только небольшие петли гистерезиса у разбавленных образцов. После отжига для всех образцов видны выраженные минимумы и петли гистерезиса.

Изменение температуры перехода образцов при разбавлении кобальтовой подсистемы ионами Zn^{2+} можно также обнаружить на температурных зависимостях коэффициента внутреннего трения $q^{-1}(T)$ (рис. 6). Для образца с $y = 0.1$ на кривой $q^{-1}(T)$ наблюдается λ -аномалия в области температур (275–285) К, что указывает на наличие фазового перехода. Для образцов с $y = 0.2, 0.3$ эта аномалия размывается и превращается в ступеньку. Для закаленных образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ в области перехода аномалий на кривой $q^{-1}(T)$, так же как и на кривых $\Delta E(T)/E_0$, не наблюдается (ср. кривые для образцов A и Q на рис. 6 и вставке).

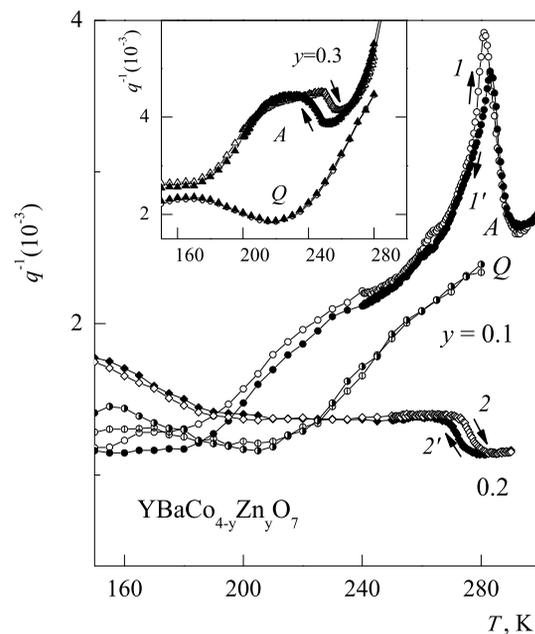


Рис. 6. Температурная зависимость коэффициента внутреннего трения $q^{-1}(T)$ для стехиометрических замещенных образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ с различным разбавлением Zn (кривая 1 — $y = 0.1$, 2 — $y = 0.2$, 3 — $y = 0.3$) при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки) в области структурного перехода. На вставке показано сравнение температурных зависимостей $q^{-1}(T)$ для закаленного и отожженного образцов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ с разбавлением $y = 0.3$

В замещенных и неоднородных образцах встает вопрос об определении температуры фазового перехода по кривым $\Delta E(T)/E_0$. В чистых однородных образцах переход, согласно термодинамике, сопровождается скачком на кривой $\Delta E(T)/E_0$, который очень близок к минимуму кривой. На производной $(1/E_0)dE(T)/dT$ эти точки соответствуют максимуму кривой и нулю ее производной. Температура λ -аномалии на кривой $q^{-1}(T)$ для образца с

$y = 0.1$ ближе всего к минимуму на зависимости модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$ (или производной этой кривой, равной нулю).

Для нестехиометрических или разбавленных образцов из-за неоднородности состава по объему аномалии размываются (в частности, скачок уменьшается) и указанные характерные температуры на кривых $\Delta E(T)/E_0$ и $(1/E_0)dE(T)/dT$ могут заметно различаться. Для образца с $y = 0.2$ верх ступеньки на зависимости $q^{-1}(T)$ («размытая» λ -аномалия) также совпадает с минимумом на зависимости модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$. Однако для образца с $y = 0.3$ эта аномалия ближе к минимуму на кривой $(1/E_0)dE(T)/dT$, соответствующей наиболее выраженной точке на кривой $\Delta E(T)/E_0$. Для определения температуры структурного фазового перехода и величины гистерезиса мы использовали температурные зависимости производной $(1/E_0)dE(T)/dT$, где температура перехода соответствовала нулю (образцы с $y = 0.1$ и 0.2) или минимуму производной (образец с $y = 0.3$) (рис. 7).

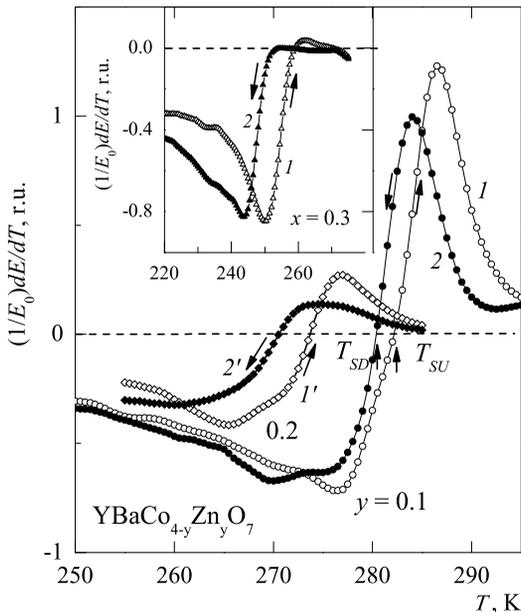


Рис. 7. Зависимость производной модуля Юнга $(1/E_0)dE(T)/dT$ от температуры для стехиометрических замещенных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с различным разбавлением Zn (кривые 1, 1' — $y = 0.1$, 2, 2' — $y = 0.2$) при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки) в области структурного перехода. На вставке показана температурная зависимость $(1/E_0)dE(T)/dT$ для отожженного образца с разбавлением Zn $y = 0.3$

Таким образом, из упругих данных следует наличие структурного перехода в отожженных стехиометрических образцах $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$, что подтверждают рентгеновские исследования структуры образцов. Отметим, что T_{SU} и T_{SD} , определенные по рентгеновским данным и измерениям упругих свойств, несколько различаются. Рентгеновские данные определяют границы устойчивости симметричной и искаженной фаз, тогда как соответствующие аномалии на кривых $\Delta E(T)/E_0$ и $q^{-1}(T)$ задают температуры, при которых низкотемпературная/высокотемпературная фаза имеют наибольший объем. Искажение кристаллической структуры в стехиометрических разбавленных образцах $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ приводит к снятию фрустраций и, как уже говорилось, способствует последующему установлению дальнего магнитного порядка в кобальтовой подсистеме ниже T_S . В этом случае можно ожидать появление явно выраженного магнитного фазового перехода и аномалий упругих свойств системы при T_N .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследовано изменение характеристик структурного фазового перехода при замещении ионов Co ионами Zn в серии кобальтитов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ ($y = 0.1, 0.2, 0.3$). Согласно рентгеновским исследованиям для чистого образца YBaCo_4O_7 при структурном переходе параметр $\Delta a/a$ особенности не обнаруживает, параметры b и c испытывают скачки разного знака и разной величины, что приводит к изменению отношения c/a_{av} для структуры и отрицательному скачку объема $\Delta V/V \approx -1 \cdot 10^{-3}$. Аналогичные аномалии испытывают параметры структуры и y замещенных образцов $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ с разбавлением $y = 0.1, 0.2, 0.3$. Температура структурного перехода T_{SU} и T_{SD} монотонно и почти линейно падает при увеличении замещения y (рис. 1). Таким образом, температуры T_{SU} и T_{SD} в системе $\text{YBaCo}_{4-y}\text{Zn}_y\text{O}_{7+x}$ падают при увеличении параметров a и c решетки. Хорошо известно, что при замещении в редкоземельной подсистеме $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ температура структурного перехода, наоборот, растет при увеличении параметров a и c решетки.

Искажение структуры сопровождается выраженными аномалиями модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$ и внутреннего трения $q^{-1}(T)$ в замещенных отожженных образцах, тогда как в закаленных образцах аномалии упругих свойств практически не наблю-

даются. Отличие упругих свойств закаленных и отожженных образцов обусловлено, по-видимому, небольшим отклонением $x < 0.05$ от стехиометрии и неравновесным распределением нестехиометрического кислорода при закалке. Замещение ионами Zn приводит к качественному изменению характера аномалии модуля Юнга в области T_S , а именно, к резкому уменьшению и далее полному исчезновению скачка на кривой $\Delta E(T)/E_0$. Это может быть связано с изменением соотношения изотропной и анизотропной деформации при структурном переходе при небольшом замещении в кобальтовой подсистеме, так как вклады этих деформаций в модуль Юнга различаются [36, 37].

Разбавление кобальтовой подсистемы и отклонение от стехиометрии по-разному сказываются на искажении структуры и упругих свойствах. Согласно нашим рентгеновским данным при небольшом отклонении от стехиометрии ($x < 0.05$ для закаленных образцов Q) величина ромбического искажения меняется незначительно, а наибольшее изменение испытывает объемная аномалия, которая меняет знак.

В настоящее время отсутствует общепринятое мнение о механизме структурного перехода в РЗ-кобальтатах и обсуждаются различные модели. Полученные данные об искажении структуры при фазовом переходе свидетельствуют об уменьшении отношения параметров решетки c/a_{av} , которое может быть важным фактором для устойчивости структуры.

Искажение структуры при фазовом переходе в серии кобальтитов $YBaCo_{4-y}Zn_yO_{7+x}$ снимает фрустрацию обменных взаимодействий и должно способствовать последующему установлению дальнего магнитного порядка в кобальтовой подсистеме при $T_N < T_S$ [17, 18]. Этот вопрос заслуживает дальнейшего отдельного исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Schiffer and A. P. Ramirez, *Comments Condens. Matter Phys.* **18**, 21 (1996).
2. M. J. Harris and M. P. Zinkin, *Mod. Phys. Lett. B* **10**, 417 (1996).
3. J. N. Reimers and A. J. Berlinsky, *Phys. Rev. B* **48**, 9539 (1993).
4. P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier et al., *Phys. Rev. B* **56**, 2521 (1997).
5. L.C. Chapon, P.G. Radaelli, H. Zheng et al., *Phys. Rev. B* **74**, 172401 (2006).
6. P. Manuel, L.C. Chapon, P.G. Radaelli et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 037202 (2009).
7. W. Schweika, M. Valldor, and P. Lemmens, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 067201 (2007).
8. V. Caignaert, V. Pralong, A. Maignan et al., *Solid State Commun.* **149**, 453 (2009).
9. V. Caignaert, V. Pralong, V. Hardy et al., *Phys. Rev. B* **81**, 094417 (2010).
10. K. Singh, V. Caignaert, L. C. Chapon et al., *Phys. Rev. B* **86**, 024410 (2012).
11. E.A. Juarez-Arellano, A. Friedrich, D.J. Wilson et al., *Phys. Rev. B* **79**, 064109 (2009).
12. E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, M. Avdeev et al., *J. Sol. St. Chem.* **182**, 640 (2009).
13. Л.П. Козеева, М.Ю. Каменева, А.И. Смоленцев и др., *ЖСХ* **6**, 1108 (2008).
14. A. Huq, J.F. Mitchell, H. Zheng et al., *J. Sol. St. Chem.* **179**, 1136 (2006).
15. D.D. Khalyavin, L.C. Chapon, P.G. Radaelli et al., *Phys. Rev. B* **80**, 144107 (2009).
16. D.D. Khalyavin, P. Manuel, B. Ouladdiaf et al., *Phys. Rev. B* **83**, 094412 (2011).
17. M. Markina, A.N. Vasiliev, N. Nakayama et al., *J. Magn. Magn. Mat.* **322**, 1249 (2010).
18. M. Valldor, Y. Sanders, and W. Schweika, *J. Phys.: Confer. Ser.* **145**, 012076 (2009).
19. Z.A. Kazei, V.V. Snegirev, A.A. Andreenko et al., *Solid State Phenomena* **233-234**, 145 (2015).
20. N. Nakayama, T. Mizota, Y. Ueda et al., *J. Magn. Magn. Mat.* **300**, 98 (2006).
21. V. Caignaert, A. Maignan, K. Singh et al., *Phys. Rev. B* **88**, 174403, (2013).
22. A. Maignan, V. Caignaert, D. Pelloquin et al., *Phys. Rev. B* **74**, 165110 (2006).
23. З.А. Казей, В.В. Снегирев, А.С. Андреевко и др., *ЖЭТФ* **140**, 282 (2011).
24. M. J. R. Hoch, P. L. Kuhns, S. Yuan et al., *Phys. Rev. B* **87**, 064419 (2013).
25. M. Soda, Y. Yasui, T. Moyoshi et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 054707 (2006).
26. A. I. Rykov, Y. Ueda, M. Isobe, N. Nakayama et al., *New J. Phys.* **12** 043035 (2010).
27. З.А. Казей, В.В. Снегирев, Л.П. Козеева и др., *ЖЭТФ* **153**, 782 (2018).

- 28.** Л. П. Козеева, М. Ю. Каменева, А. Н. Лавров и др., Неорганические материалы **49**, 668 (2013).
- 29.** А. В. Алексеев, М. Ю. Каменева, Л. П. Козеева и др., Известия РАН. Сер. физическая **77**, 173 (2013).
- 30.** М. Karppinen, M. Matvejeff, K. Salomaki et al., J. Mater. Chem. **12**, 1761 (2002).
- 31.** З.А. Казей, В.В. Снегирев, М.С. Столяренко, Письма в ЖЭТФ **112**, 189 (2020).
- 32.** З.А. Казей, В.В. Снегирев, М.С. Столяренко, ЖЭТФ **160**, 689 (2021).
- 33.** M. T. Dove, M. Gambhir, K. D. Hammonds et al., Phase Transit. **58**, 121 (1996)
- 34.** A. Rykov, K. Nomura, T. Mitsui et al., Physica B **350**, 287 (2004)
- 35.** H. Boysen, B. Dorner, F. Frey et al., J. Phys. Chem. **13**, 6127 (1980)
- 36.** M. Fukuhara, M. Yagi, and A. Matsuo. Phys. Rev. B **65**, 224210 (2002).
- 37.** L. R. Testardi. Phys. Rev. B **12**, 3849 (1975).

МНОГОКВАНТОВАЯ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ И УПРАВЛЕНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕМ КВАНТОВОЙ ИНФОРМАЦИИ В СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В. Е. Зобов^{a}, А. А. Лундин^{b**}*

*^a Институт физики им. Л. В. Киренского, Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Красноярск, Россия*

*^b Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
117977, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 апреля 2022 г.,
после переработки 15 мая 2022 г.
Принята к публикации 16 мая 2022 г.

Многоквантовая (МК) спектроскопия ЯМР твердого тела позволяет наблюдать за ростом многоспиновых корреляций и тем самым за распространением квантовой информации в исследуемом объекте. Недавно в работе [11] было предложено управлять этим процессом с помощью привносимого в эффективный гамильтониан контролируемого возмущения, вызывающего деградацию кластеров коррелированных спинов со скоростью, определяемой числом спинов K в кластере. Однако это возмущение может приводить также и к деградации, скорость которой определяется порядком когерентности M . В предлагаемой работе для исследования влияния малого привнесенного возмущения было использовано разложение по ортогональным операторам, позволившее учесть распределение кластеров по размерам. При расчетах была реализована простая модель с известными амплитудами разложения по полному набору ортогональных операторов при отсутствии возмущения. Выполнены численные расчеты зависимостей от «времени приготовления» МК-спектров, их вторых моментов и значений порядков когерентностей, при которых МК-спектры уменьшаются в e раз, а также средних размеров \bar{K} кластера коррелированных спинов. Показано, что зависящий от порядка когерентности вклад в деградацию изменяет форму МК-спектра. В частности, при увеличении времени приготовления может происходить стабилизация МК-спектра при сохранении роста \bar{K} . Вследствие изменения формы МК-спектра изменяются соотношения его характеристик с числом \bar{K} по сравнению с таковыми для функции Гаусса (традиционно используемой для обработки экспериментов). Эти изменения необходимо учитывать при изучении с помощью МК-спектроскопии распространения квантовой информации.

DOI: 10.31857/S0044451022110189
EDN: LBFTIB

1. ВВЕДЕНИЕ

Активное развитие многоквантовой (МК) спектроскопии ЯМР, появившейся как следствие интенсивного развития многоимпульсного ЯМР [1], началось в конце 70-х–начале 80-х годов в качестве мощного, а часто и фактически незаменимого средства для практического исследования структуры макро-

молекул (например, белков), кластеров и локальных структур, размещенных на поверхностях [2] жидких кристаллов [3], полостей наноразмеров [4] и т.п. В основе МК-спектроскопии лежит наблюдение за поведением многоспиновых/многоквантовых когерентных состояний. Эти состояния возникают под действием внутренних взаимодействий в условиях облучения ядерной спиновой подсистемы вещества, находящегося в конденсированном состоянии, определенной последовательностью радиочастотных импульсов [1, 5, 6].

Появившаяся возможность экспериментального изучения с помощью МК-спектроскопии ЯМР развития с течением времени многоспиновых корреля-

* E-mail: rsa@iph.krasn.ru

** E-mail: yaandyun2012@yandex.ru

ций оказалась востребована в статистической физике необратимых процессов [7] и при изучении физических процессов, необходимых для развития квантовой информатики (создания квантовых регистров) [8]. Дело в том, что система ядерных магнитных моментов (спинов) твердого тела, наблюдаемая методами ЯМР, служит хорошим примером замкнутой системы, а, как известно, в замкнутой системе квантовая информация сохраняется со временем [8]. При этом изначально локализованная в одночастичных (односпиновых) состояниях эта информация перераспределяется по множеству степеней свободы, что может быть отображено появлением временных корреляционных функций (ВКФ) весьма сложной структуры.

Распространение («растекание») квантовой информации по многочастичной системе называется скремблингом (scrambling) (см., например, [9–11]). Для теоретического описания указанных процессов (скремблинга), как правило, используются четырехоператорные ВКФ, относящиеся к классу ВКФ с английской аббревиатурой ОТОС (out-of-time-order correlator) (см., например, [12–15]):

$$C(t) = \langle W^+(t)V^+(0)W(t)V(0) \rangle_\beta.$$

Здесь $V(0)$ и $W(0)$ — два коммутирующих оператора, а зависимость от времени определяется обычным унитарным оператором с гамильтонианом системы в показателе. Угловые скобки $\langle \dots \rangle_\beta$ означают статистическое среднее. ОТОС ВКФ, связанные с информационной энтропией, содержат конкретную информацию о наиболее интимных процессах, происходящих в многочастичной системе: о многочастичном запутывании, локализации в системе многих тел, развитии квантового хаоса и так далее, вплоть до некоторых аспектов физики черных дыр [12, 13, 15] (например, излучении Хоукинга). Следует отметить, что при экспериментальных исследованиях МК ЯМР многоспиновых систем имеет ряд заметных преимуществ по сравнению с другими многочастичными системами, такими как ультрахолодные нейтральные атомы [12] или ионы, захваченные в ловушки [13]. Дело в том, что используемые (возникающие естественным путем при экспериментах) в МК-спектроскопии ВКФ принадлежат к классу ОТОС, т. е. это четырехчастичные ВКФ, содержащие (по определению) этап эволюции, обращенный во времени [16, 17]. Следует сказать, что среди набора различных четырехчастичных ВКФ типа ОТОС, возникающих в МК ЯМР, весьма существенную роль играет второй момент МК-спектра [18, 19], что обуславливается двумя обстоятельствами.

Его величина определяет нижнюю границу критерия Фишера [20–22] для квантовой информации, представляющего меру запутанности. Кроме того, второй момент МК-спектра — величина, непосредственно измеряемая в эксперименте и, следовательно, позволяющая экспериментально определять соответствующую ему ВКФ ОТОС [23].

Построение последовательной теории формы МК-спектра ЯМР твердых тел и скольконнибудь строгий расчет соответствующих ВКФ представляет собой чрезвычайно сложную многочастичную и до сих пор очень мало исследованную задачу. В традиционной статистической модели [5, 6] при помощи простейшей алгебраической оценки числа переходов между уровнями больших кластеров для распределения когерентностей различного порядка M в МК-спектре было получено распределение Гаусса

$$G_M(T) = \frac{1}{\sqrt{\pi \overline{K}(T)}} \exp\left(-\frac{M^2}{\overline{K}(T)}\right). \quad (1)$$

Второй момент (дисперсия) распределения в этой модели $\overline{K}(T)/2$ определяется средним числом спинов $\overline{K}(T)$, между которыми за время приготовления T установилась динамическая корреляция. Это число, получившее название числа коррелированных спинов или эффективного (среднего) размера кластера, растет с увеличением времени приготовления T .

В работе [19] нами было показано, что для трехмерных ядерных спиновых систем с секулярным диполь-дипольным взаимодействием (или с эффективным двухспиновым/двухквантовым взаимодействием (см. ниже)) второй момент МК ЯМР, определяющий число коррелированных спинов, растет в идеальном случае (при отсутствии каких-либо возмущений) экспоненциально со временем T . Полученные в [19] результаты позволили, в частности, объяснить экспериментальные данные работ [24–28] по наблюдению возникновения кластеров коррелированных спинов, содержащих примерно 10^5 частиц.

В реальной ситуации рост кластеров коррелированных спинов ограничивается вследствие различных процессов, вызывающих деградацию кластеров. Для их исследования в работах [11, 27, 29, 30] в эффективный гамильтониан на подготовительном периоде добавлялось возмущение, величина которого задавалась самими экспериментаторами. Было обнаружено, что при увеличении возмущения рост числа \overline{K} с ростом времени T замедляется и может вообще останавливаться. На этой основе ав-

торы [11] предложили метод управления ростом числа \bar{K} и, тем самым, развили способ управления распространением квантовой информации с помощью контролируемого возмущения. Для описания указанных процессов, сопровождающих развитие кластеров, была предложена модель [31], в основу которой положены уравнения для амплитуд кластеров разного размера, заимствованные из работы [32]. В рамках модели предполагался диффузионный рост кластера (что, вообще говоря, не является корректным, см. [19]), а скорость его деградации определялась исключительно размером кластера.

Следует указать, что обычно в экспериментах среднее число коррелированных спинов \bar{K} извлекается из ширины наблюдаемого МК-спектра при предположении, что вследствие слабости внешних возмущений это можно сделать в соответствии с соотношениями, полученными для идеального случая. Описанная методика использовалась и для обработки экспериментальных результатов авторами [11, 27, 29]. Необходимо отметить, что сделанное предположение, тем не менее, нуждается в обосновании, поскольку возмущение может изменять саму форму МК-спектра. Так, например, в работе [24] было экспериментально установлено, что скорость деградации кластера зависит не только от его размера, но и от порядка когерентности. Проведенные нами ранее в работах [33–35] вычисления и оценки показали, что быстрое затухание спектральных компонент с большими порядками когерентностей может привести при увеличении времени T к стабилизации МК-спектра, несмотря на продолжающийся рост числа коррелированных спинов \bar{K} . Таким образом, этот опущенный в работах [11, 31] физический механизм деградации существенно влияет на наблюдаемый размер кластера и его надлежит исследовать в процессе совершенствования развиваемых методов управления распространением квантовой информации.

В настоящей работе с помощью разложения искомого ВКФ по бесконечному набору ортогональных операторов и использования некоторых известных фактов для традиционных модельных систем [19, 35–37] получены ряды по растущему числу спинов в кластере для \bar{K} , для МК-спектра и различных его характеристик. Учтены оба физических механизма деградации кластера: как зависящий от числа спинов в кластере, так и зависящий от его порядка когерентности. Для различных значений параметров, входящих в окончательные выражения, выполнены численные расчеты.

Статья имеет следующую структуру: в разд. 2 приведены общие формулы и ряды для идеального случая, когда возмущения, приводящие к деградации кластера, отсутствуют. В разд. 3 получены выражения, в которых учтены процессы деградации кластеров. В разд. 4 приведены результаты численных расчетов и их обсуждение. Раздел 5 — краткое заключение. Наконец, в Приложении рассмотрены особенности расчета для кластеров с малым числом спинов.

2. ГАМИЛЬТониАН И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Секулярная часть межъядерных диполь-дипольных взаимодействий в немагнитных диамагнитных твердых телах, единственно ответственная за динамику спиновой системы, состоящей из легких ядер, например, таких как протоны или ядра ^{19}F , в условиях ЯМР имеет вид [38]

$$H_{dd} = \sum_{i \neq j} b_{ij} S_{zi} S_{zj} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} b_{ij} S_{+i} S_{-j}, \quad (2)$$

где $b_{ij} = \gamma^2 \hbar (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}) / 2r_{ij}^3$, \mathbf{r}_{ij} — вектор, соединяющий спины i и j , θ_{ij} — угол, образуемый вектором \mathbf{r}_{ij} с постоянным внешним магнитным полем, γ — гиромагнитное отношение, $S_{\alpha i}$ — α -компонента ($\alpha = x, y, z$) векторного оператора спина в узле i , $S_{+i} = S_{xi} + iS_{yi}$, $S_{-i} = S_{xi} - iS_{yi}$. Здесь и ниже энергия выражается в частотных единицах.

При традиционных экспериментах, использующих магнитный резонанс, спиновая температура обычно существенно превышает энергию зеemanовского и других взаимодействий в спиновой системе. В связи с этим мы, как обычно, ограничимся исследованием временных корреляционных функций (ВКФ) в высокотемпературном приближении. Равновесная высокотемпературная матрица плотности в сильном постоянном магнитном поле H_0 описывается выражением [38]

$$\rho_{eq} \propto 1 + \frac{\gamma \hbar H_0}{kT} \sum_{j=1}^N S_{zj},$$

где k — постоянная Больцмана, T — температура и N — полное число спинов в образце.

Гамильтониан (2) является базовым для «спиновой алхимии», преобразуясь под влиянием радиочастотных импульсов в другие гамильтонианы,

представляющие интерес для исследователя [1]. Например, в традиционном МК ЯМР [1–6] гамильтониан (2), как правило, превращается в двухспиновый/двухквантовый гамильтониан H_{DQ} вида

$$H_{DQ} = -\frac{1}{4} \sum_{i \neq j} b_{ij} (S_{+i} S_{+j} + S_{-i} S_{-j}). \quad (3)$$

Под действием несекулярного (по отношению к равновесной намагниченности) гамильтониана (3) первоначальная намагниченность передается в различные ВКФ довольно сложной структуры, зависящие от произведения различного числа (K) спиновых операторов (многоспиновые корреляции). Иными словами, равновесная матрица плотности в сильном магнитном поле ρ_{eq} превращается в неравновесную матрицу плотности, которую удобно представить в виде суммы недиагональных элементов ρ_M с определенной разностью M магнитных квантовых чисел, получивших название многоквантовых когерентностей (M — порядок когерентности):

$$\rho(t) = \exp\{iHt\} \rho_{eq} \exp\{-iHt\} = \sum_M \rho_M(t),$$

$$\rho_M(t) = \sum_{K=|M|}^{K=N} \sum_{\{i\}} \sum_q g_{KMq\{i\}}(t) |KMq\{i\}\rangle,$$

где $|KMq\{i\}\rangle$ — базисный оператор, в котором K односпиновых операторов формируют произведение, связывающие различающиеся на M единиц земаповские состояния. Индекс q нумерует разные базисные состояния с одинаковыми значениями K и M . В момент времени $t = T$ появившиеся когерентности метаются с помощью фазового сдвига φ . Возникающий фазовый сдвиг пропорционален $M\varphi$, где M — целое число. Таким образом, K спиновые корреляции в зависимости от M различают еще и по числу квантов ($M \leq K$) [1, 3, 5, 6]. Затем к системе прикладывается новая импульсная последовательность, изменяющая знак упомянутого несекулярного гамильтониана (3) и, тем самым, проводится «обращение времени» [39, 40], вследствие которого система развивается «вспять». В момент времени $t = 2T$ наблюдается эхо Лашмидта, амплитуда которого $\Gamma(\varphi, T)$ зависит от φ и может быть записана в следующем виде:

$$\Gamma(\varphi, T) = \frac{\text{Tr}\{U_2^+(T) U_\varphi U_1(T) S_z U_1^+(T) U_\varphi^+ U_2(T) S_z\}}{\text{Tr}\{S_z^2\}}, \quad (4)$$

где $U_{1(2)}(t)$ — оператор эволюции с «работающим гамильтонианом (например, H_{DQ} из формулы (3))».

Индекс 1 означает прямое эволюционное развитие со временем, 2 — обратное, $U_\varphi = \exp(i\varphi S_z)$ — оператор поворота на угол φ вокруг оси z , S_z — z -компонента полного спина ядерной системы. Амплитуда эха $\Gamma(\varphi, T)$ измеряется с помощью $\pi/2$ -импульса, поворачивающего намагниченность в плоскость, перпендикулярную внешнему магнитному полю. Проводится многократное повторение эксперимента с разными значениями фазовых сдвигов φ облучающих импульсов для каждой длительности T подготовительного периода. Двумерный спектр МК ЯМР $G_M(T)$, являющийся функцией двух переменных: M и T , может быть получен с помощью преобразования Фурье от ВКФ $\Gamma(\varphi, T)$ по переменной φ .

Существенной характеристикой МК-спектра является его второй момент [11, 18, 19, 21, 23, 31], для которого посредством соотношения (4) находим:

$$\langle M^2 \rangle = \sum_M M^2 G_M(T) = -d^2 \Gamma(\varphi, T) d\varphi^2 \Big|_{\varphi=0} = \frac{\text{Tr}\{[S_z, U_1(T) S_z U_1^+(T)] [U_2(T) S_z U_2^+(T), S_z]\}}{\text{Tr}\{S_z^2\}}. \quad (5)$$

Как ВКФ (4), так и (5) принадлежат к классу ОТОС, рассмотренному во Введении.

Для решения сформулированной задачи по расчету формы МК-спектра и среднего размера кластера коррелированных спинов целесообразно, как показано в работе [35], воспользоваться разложением зависящих от времени спиновых операторов по полной системе ортонормированных операторов [41]:

$$S_z(t) = \sum_{j=0}^{\infty} A_j(t) |j\rangle \quad (6)$$

и исследовать изменения амплитуд этого разложения

$$A_j(t) = \frac{\langle j | S_z(t) \rangle}{\langle j | j \rangle} \quad (7)$$

вследствие возмущения. Подобные разложения неоднократно использовались в неравновесной статистической механике и ранее (см., например, [19, 42–46]) для описания разнообразных ВКФ. Угловые скобки отражают взятие скалярного произведения [41], т. е. фактически — вычисление статистического среднего. Последнее в условиях высокотемпературного приближения означает просто вычисление следа от соответствующего произведения операторов. При ортогонализации обычно

используется процедура Грама–Шмидта [19, 37, 41, 47]. Приведем несколько векторов:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= S_z, \quad |1\rangle = i[H, |0\rangle], \\ |j+1\rangle &= i[H, |j\rangle] + \nu_{j-1}^2 |j-1\rangle \text{ при } j \geq 1, \quad (8) \\ \nu_j^2 &= \langle j+1|j+1\rangle / \langle j|j\rangle. \end{aligned}$$

Поскольку каждая коммутация с гамильтонианом двухспинового взаимодействия добавляет максимум один спиновый оператор в произведение спиновых операторов, из которых состоит вектор $|j\rangle$, будем рассматривать ортогональный оператор $|j\rangle$ в качестве оператора, представляющего кластер из $K = j + 1$ спинов. Такое представление (см., например, [35, 37, 45, 48]) обосновано при наличии большого числа соседей, окружающих каждый (любой) спин в решетке, адекватного для большинства обычных твердых тел (адамантан, флюорит и пр.). В этом приближении МК-спектр в отсутствие возмущений запишем в виде суммы МК-спектров g_{KM} (см. Приложение) от кластеров разного размера [35, 37]:

$$G_M(T) = \sum_{K=|M|}^{\infty} g_{KM} P(K, T), \quad (9)$$

где

$$P(K, T) = A_{K-1}^2(T) \langle K-1|K-1\rangle / \text{Tr}(S_z^2) \quad (10)$$

фактически представляет собой распределение по числу кластеров с $K = j + 1$ спинами, поскольку для него выполняется условие

$$\Gamma(\varphi = 0, T) = \sum_{K=1}^{\infty} P(K, T) = 1.$$

В принятом представлении средний размер кластера, равный удвоенному второму моменту МК-спектра (9), описывается рядом

$$\overline{K}(T) = \sum_{K=1}^{\infty} KP(K, T). \quad (11)$$

Для плотных спиновых систем, таких как адамантан или флюорит, для которых характерен экспоненциальный рост \overline{K} , воспользуемся хорошо известным выражением для искомым амплитуд [19, 35, 36]:

$$\begin{aligned} A_0(t) &= \frac{1}{\text{ch}^2(t/\sqrt{2})}, \\ A_j(t) &= \frac{1}{\text{ch}^2(t/\sqrt{2})} \frac{\text{th}^j(t/\sqrt{2})}{j!}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь и ниже время выражено в единицах обратного второго момента $(1/\sqrt{m_2})$ функции $A_0(t)$. Для указанных амплитуд имеем

$$P(K, T) = \frac{(\text{th}^2(T/\sqrt{2}))^{K-1} K}{\text{ch}^4(T/\sqrt{2})}, \quad (13)$$

$$\overline{K}(T) = 1 + 2 \text{sh}^2(T/\sqrt{2}). \quad (14)$$

3. ПОТЕРИ КОГЕРЕНТНОСТИ В СИСТЕМЕ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА МК-СПЕКТР

Как уже отмечалось выше, при отсутствии каких-либо внешних возмущений следует ожидать неограниченный рост \overline{K} с временной зависимостью весьма близкой к экспоненциальной [19]:

$$\overline{K}(t) = \exp(at). \quad (15)$$

Неидеальность радиочастотных импульсов, разбросы полей, примешивание к основному гамильтониану других возмущающих гамильтонианов [10, 11, 27, 29] приводят к неполному обращению времени и вызывают деградацию кластеров вследствие появления потери когерентности (релаксации). Отмеченные процессы тормозят рост величины \overline{K} . На этом основании в работе [11] было предложено управлять ростом числа коррелированных спинов \overline{K} с помощью контролируемого малого возмущения, добавляемого к H_{DQ} на этапе приготовления:

$$H_1 = (1-p)H_{DQ} + pH_{dd}. \quad (16)$$

Здесь H_{dd} и H_{DQ} — гамильтонианы, заданные формулами (2) и (3), $|p| \ll 1$.

В [11] число \overline{K} извлекали из ширины экспериментального МК-спектра, полагая, что при наличии возмущения можно воспользоваться соотношениями, полученными в идеальном случае. Последнее, однако, требует (как мы отмечали во введении) обоснования, поскольку возмущение может изменять форму МК-спектра.

Так, в статье [24] было экспериментально установлено, что взаимодействие H_{dd} вызывает релаксацию компонент МК-спектра, скорость которой зависит как от \overline{K} , так и от M . В работе [49] мы показали, что эта релаксация обусловлена локальными дипольными полями и представима произведением двух сомножителей от двух вкладов в локальное поле:

$$\exp(-\overline{K}B^2t_d^2/2) \exp(-A^2M^2t_d^2). \quad (17)$$

Здесь t_d — длительность интервала эволюции, расположенного между подготовительным интервалом

и интервалом смешивания. Параметр B^2 характеризует некоррелированный вклад в локальное поле на каждом из спинов кластера, не зависящий от локального поля на других спинах. Параметр же A^2 характеризует среднее по кластеру поле, коррелированно действующее на все спины кластера. Отметим, что величины констант A и B и их соотношение может изменяться в широких пределах, поскольку это зависит от вида возмущения и свойств спиновой системы. Первый из сомножителей действительно может привести к ограничению размеров растущих кластеров. Его проявление рассматривалось в работах [29, 31]. Влияние второго сомножителя проявилось, в частности, в наблюдавшемся в [26] сужении МК-спектра. Результат воздействия второй компоненты формулы (17) реализуется более сложным путем. Ниже рассмотрим ее влияние на спектр и размер кластера.

Поскольку возмущение в (16) предполагается малым ($p \ll 1$), будем учитывать его действие феноменологически, добавляя релаксационный множитель к распределению $P(K, T)$ в соотношении (9) и полагая, что возмущение не повлияет непосредственно на ВКФ $\{A_j(t)\}$ и вектора $\{j\}$. Этот множитель в соответствии с результатами работ [33–35, 49] возьмем в виде произведения двух сомножителей:

$$\Gamma_{KM}(T) = \exp(-Kp^2B^2t_T^2/2) \exp(-p^2A^2M^2t_T^2) = F_K(t)F_M(t), \quad (18)$$

$$t_T^2 = \langle (T-t)^2 \rangle = \int_0^T (T-t)^2 R(t) dt. \quad (19)$$

Здесь символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по моменту «возникновения» когерентности, t_T — среднее время возникновения когерентности на промежутке $[0, T]$, $R(t)$ — некоторая плотность вероятности, характеризующая процесс возникновения когерентностей:

$$R(t) = (dK(t)/dt)/K(T), \quad K(T) = K.$$

Релаксационный множитель формулы (18) отличен от формулы (17) вследствие разницы схем соответствующих экспериментов. В ситуации, описываемой соотношением (17), рост кластера среднего размера \bar{K} под действием H_{DQ} и его затухание под действием H_{dd} происходят последовательно. Тогда как в случае, задаваемом соотношением (18), на подготовительном периоде оба процесса происходят параллельно. При этом учитывается, что растут кластеры разного размера K и у каждого такого класте-

ра свой релаксационный множитель (18). При экспоненциальном росте числа коррелированных спинов в кластере с $K(T) = K$, найдем для него:

$$K(t) = \exp(a_K t), \quad a_K = \frac{1}{T} \ln K, \quad (20)$$

$$\langle (T-t)^2 \rangle = \frac{2}{a_K^2} - \frac{2T}{a_K K(T)} - \frac{T^2}{K(T)}. \quad (21)$$

Соотношения (18)–(21) получены при пренебрежении вкладом от начального значения числа спинов в кластере. Затухание с учетом начального значения $K(0) = 1$ рассмотрено в Приложении.

Таким образом, с учетом протекания процессов деградации кластеров форма МК-спектра может быть записана в виде следующего ряда [35]:

$$G_M(T) = \sum_{K=|M|}^{\infty} g_{KM} F_M(T) F_K(T) P(K, T) / N_1(T). \quad (22)$$

Здесь $N_1(t)$ — нормировочный множитель,

$$N_1(T) = \sum_M \sum_{K=|M|}^{\infty} g_{KM} F_M(T) F_K(T) P(K, T). \quad (23)$$

Для среднего размера кластера $\bar{K}(T)$ с учетом затухания вместо ряда (11) получаем ряд

$$\bar{K}(T) = \sum_{K=1}^{\infty} K F_K(T) F_{\langle M \rangle}(K, T) P(K, T) / N_2(T), \quad (24)$$

где

$$N_2(T) = \sum_{K=1}^{\infty} F_K(T) F_{\langle M \rangle}(K, T) P(K, T) \quad (25)$$

— нормировочный множитель, а

$$F_{\langle M \rangle}(K, T) = \sum_{M=-K}^{M=K} g_{KM} F_M(T) \quad (26)$$

— затухание кластера из K спинов, усредненное по M .

Выбирая для больших кластеров g_{KM} в виде функции Гаусса

$$g_{KM} = \frac{1}{\sqrt{\pi K}} \exp\left(-\frac{M^2}{K}\right) \quad (27)$$

и заменяя в (26) суммирование на интегрирование, найдем среднее по M затухание кластера из K спинов (мы пренебрегаем граничными эффектами):

$$F_{\langle M \rangle}(K, T) = \int_{-\infty}^{\infty} g_{KM} F_M(T) dM = [1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]^{-1/2}, \quad (28)$$

и второй момент МК-спектра для кластера из K спинов:

$$\langle M^2 \rangle_K = \int_{-\infty}^{\infty} M^2 g_{KM} F_M(T) dM = K [1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]^{-3/2}. \quad (29)$$

После корректного учета затухания малых кластеров (см. Приложение) и соотношения (28) для среднего размера кластера $\bar{K}(T)$ приходим к выражению

$$\bar{K}(T) = \exp(-p^2 A^2 T^2) \frac{P(1, T)}{N_3(T)} + \sum_{K=2}^{\infty} K F_K(T) [1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]^{-1/2} \times \frac{P(K, T)}{N_3(T)}, \quad (30)$$

$$N_3(T) = \exp(-p^2 A^2 T^2) P(1, T) + \sum_{K=2}^{\infty} F_K(T) [1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]^{-1/2} \times P(K, T), \quad (31)$$

где $N_3(t)$ — нормировка.

В то же время для второго момента МК-спектра $G_M(T)$ (22) в принятом выше приближении и при учете соотношения (29) ряд получается другим:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{2} \exp(-p^2 A^2 T^2) \frac{P(1, T)}{N_3(T)} + \frac{1}{2} \sum_{K=2}^{\infty} K F_K(T) [1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]^{-3/2} \times \frac{P(K, T)}{N_3(T)}. \quad (32)$$

Следовательно, при наличии процессов деградации, зависящих от M , ряды для среднего числа спинов $\bar{K}(T)$ (30) и второго момента $\langle M^2 \rangle$ (32) не совпадают. Они различаются показателями степеней

умножителя $[1 + Kp^2 A^2 \langle (T-t)^2 \rangle]$ во вкладе в сумму кластера из K спинов. В первом случае этот показатель равен $-1/2$ (от средней деградации кластера), а во втором случае равен $-3/2$ (от второго момента кластера).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

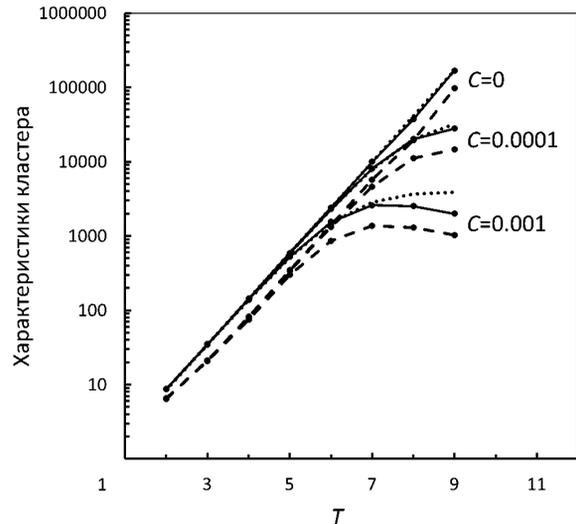


Рис. 1. Зависимости характеристик среднего кластера коррелированных спинов от «времени приготовления» T . Время приведено в единицах $1/\sqrt{m_2}$. $\bar{K} = 2\langle M^2 \rangle$ — сплошные линии, M_e^2 (формула (34)) — штриховые линии. Пунктирными линиями показаны зависимости \bar{K} , рассчитанные по формуле (35). На рисунке представлены результаты расчетов для параметра $\alpha = 0$ и трех значений параметра C

Полученные в предыдущем разделе соотношения представляют собой решение поставленной задачи об изменении формы МК-спектра и среднего размера кластера коррелированных спинов вследствие присутствующего возмущения. Поскольку в общем виде ряды просуммировать не удастся, нами были проведены численные расчеты. Рассчитывались МК-спектры (22), их вторые моменты $\langle M^2 \rangle$ (32) и средние размеры кластеров $\bar{K}(T)$ (30) для различных значений времени приготовления T и параметров, характеризующих затухание:

$$C = p^2 B^2 / m_2, \quad \alpha = A^2 / B^2. \quad (33)$$

Суммирование рядов по числу вовлекаемых спинов K заменялось интегрированием по K от $K = 2$ до $K = 10^5 - 10^6$. По рассчитанным

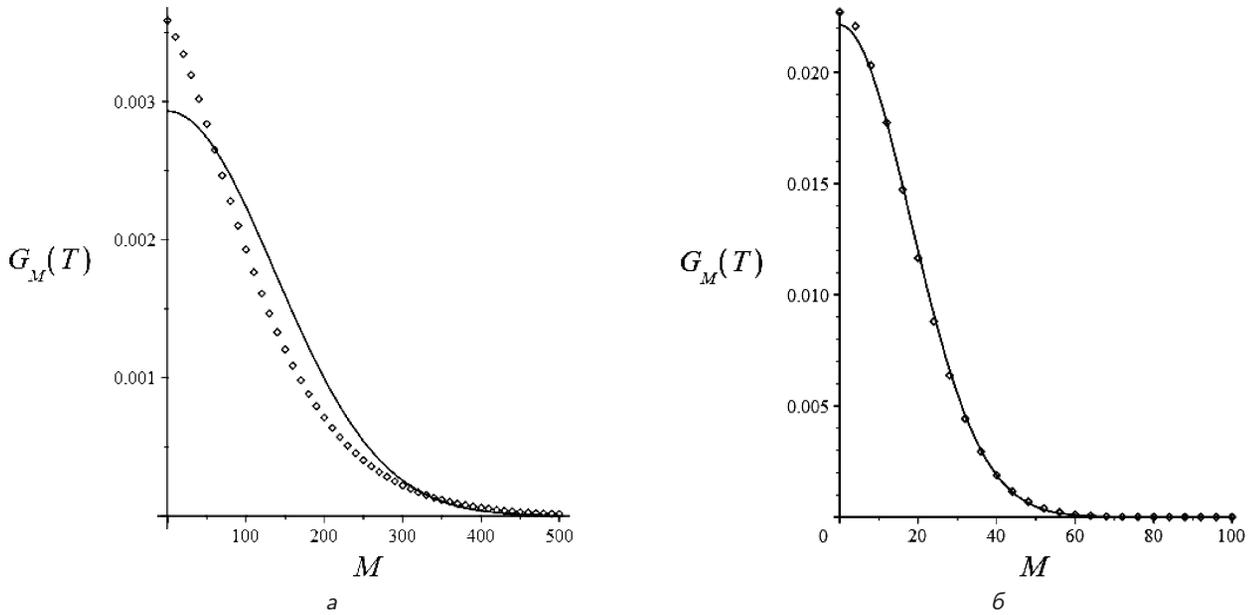


Рис. 2. а) Спектр МК ЯМР при времени приготовления $T = 8/\sqrt{m_2}$ и при значении параметра $C = 0$. Приведена только правая половина. Спектр симметричен относительно вертикальной оси. Точки — результаты расчета по формуле (22). Сплошная линия — функция Гаусса $G_M(T) = (2\pi\langle M^2 \rangle)^{-1/2} \exp(-M^2(2\langle M^2 \rangle))$, построенная при значении $2\langle M^2 \rangle = 37093.7m_2$, рассчитанном по формуле (32). б) То же, что на рис. 2а, при $C = 0.0001$, $\alpha = 10$ и $2\langle M^2 \rangle = 650.16m_2$

МК-спектрам (22) были найдены значения когерентностей M_e , при которых МК-спектр уменьшается в e раз. Дело в том, что обычно при экспериментах предполагается гауссовский характер МК-спектра (1), для которого именно посредством этой величины определяют средний размер кластера:

$$\bar{K}_e = M_e^2. \tag{34}$$

Результаты расчетов приведены на рис. 1–3.

На рис. 1 приведены результаты расчета для ситуации, когда деградация кластера, зависящая от порядка когерентности M , отсутствует. Этому соответствует значение $\alpha = 0$. В указанном случае ряды (30) и (32) совпадают, а значит, и $\bar{K} = 2\langle M^2 \rangle$. Зависимости M_e^2 от времени приготовления T повторяют зависимости \bar{K} от T , но с некоторым смещением (в логарифмических координатах). Смещение произошло из-за того, что форма МК-спектра (22), являющаяся суммой гауссовских функций, отличается от простой гауссовской функции, как это видно на рис. 2а. Отметим, что форма МК-спектра при полном отсутствии процессов деградации (идеальная ситуация, при которой $C = 0$) была исследована нами в работе [37]. Было показано, что спектр хорошо описывается простой экспонентой, наблюдавшейся ранее в экспериментах [29].

На рис. 1 видно, что при $C = 0$ наблюдается экспоненциальный рост \bar{K} в зависимости от T , описываемый формулой (14). Включение сторонних возмущений, вызывающих деградацию кластера, зависящую от вовлекаемого числа спинов K , приводит к замедлению роста числа \bar{K} при больших временах T и влечет остановку роста. В работе [35] при условии $\langle (T - t)^2 \rangle = 2/a^2$ мы получили для этого случая формулу (переписанную здесь при условии $a^2 = 2m_2$ и в используемых сейчас обозначениях):

$$\bar{K}(T) = 1 + 2 \frac{\text{sh}^2(T/\sqrt{2}) \exp(-C/2)}{1 + \text{sh}^2(T/\sqrt{2})(1 - \exp(-C/2))}. \tag{35}$$

Соответствующие зависимости показаны на рис. 1 пунктирными линиями при трех значениях параметра C , и они качественно правильно описывают замедление роста числа \bar{K} при больших временах T . Расчеты с более полным (детализированным) учетом всех слагаемых соотношения (21) для $\langle (T - t)^2 \rangle$, учитывающем его зависимость от K и T , приводят к большему ограничению величины \bar{K} при больших временах T .

При наличии деградации (затухания), зависящей от порядка когерентности M и изменяющей форму МК-спектра, вид характеристик кластеров в зависимости от времени T существенно изменяется, как это следует из рис. 3а, 3б, 3в. А именно: с ростом

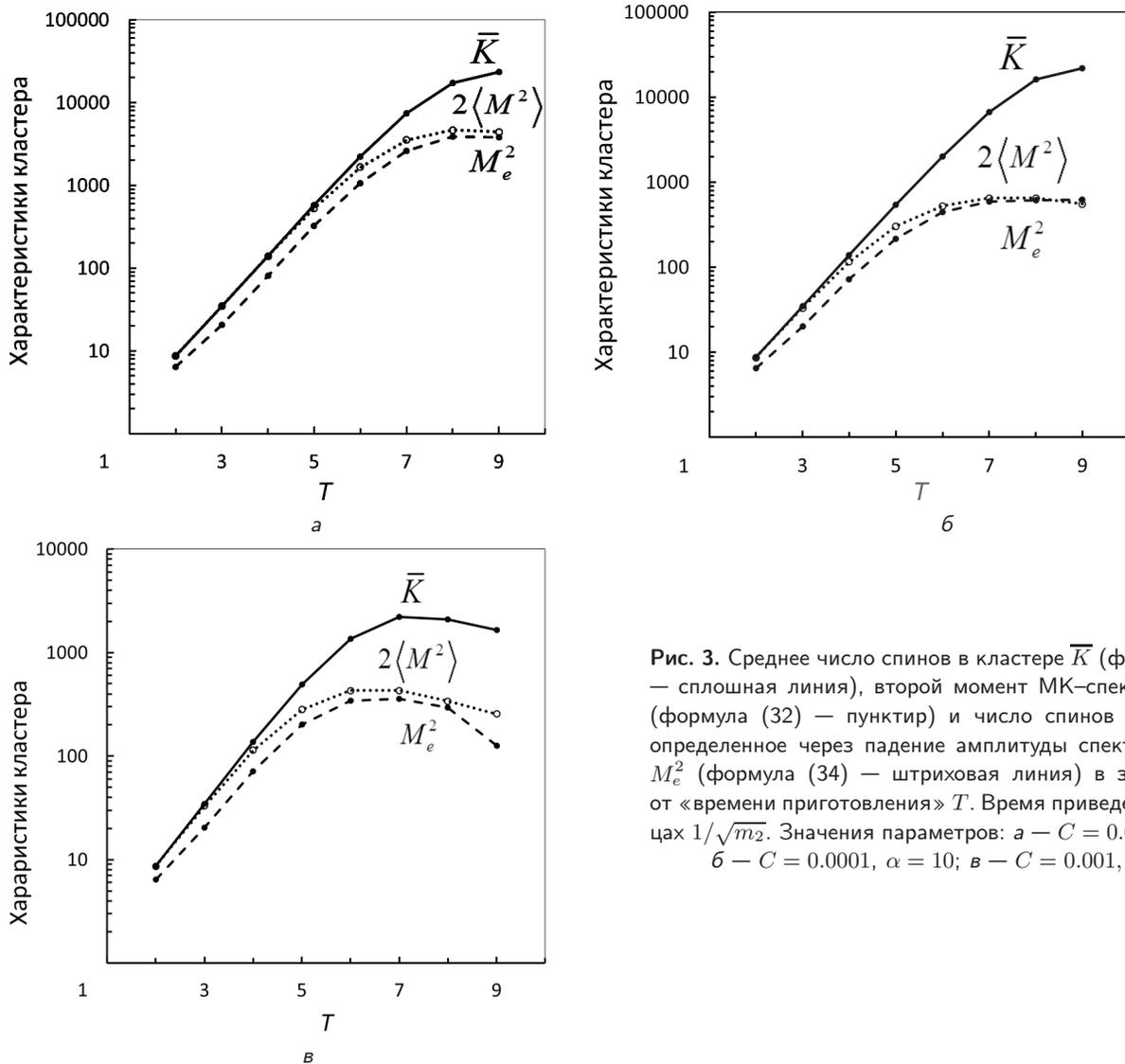


Рис. 3. Среднее число спинов в кластере \bar{K} (формула (30) — сплошная линия), второй момент МК-спектра $2\langle M^2 \rangle$, (формула (32) — пунктир) и число спинов в кластере, определенное через падение амплитуды спектра в e раз M_e^2 (формула (34) — штриховая линия) в зависимости от «времени приготовления» T . Время приведено в единицах $1/\sqrt{m_2}$. Значения параметров: а — $C = 0.0001, \alpha = 1$; б — $C = 0.0001, \alpha = 10$; в — $C = 0.001, \alpha = 1$

времени T расходятся кривые для среднего размера кластера, определенного двумя способами:

1. по формуле (30) как среднее по изменяющемуся со временем T распределению кластеров по их величине $K(\bar{K})$;

2. по формуле (34) через суммарный (средний) МК-спектр (22) кластеров разного размера $K(M_e^2)$.

Кроме того, удвоенный второй момент МК-спектра при малых временах T равен \bar{K} , тогда как при больших временах его значение приближается к M_e^2 . Подобное поведение второго момента связано с изменением формы МК-спектра. Как следует из рис. 2б, при $\alpha = 10, c = 10^{-4}$ форма МК-спектра приближается к гауссовой форме, ширина которой отличается от \bar{K} и близка к M_e^2 . Наконец, приведенные на рис. 3а, 3б, 3в зависимости демонстрируют существование интервала времен приготовления T ,

при которых МК-спектр стабилизируется, а его характеристики M_e^2 и $\langle M^2 \rangle$ перестают расти, тогда как рост среднего размера кластера \bar{K} продолжается.

Таким образом, выполненные расчеты демонстрируют информацию о декогеренции и скремблинге, получаемую из МК-спектров ЯМР в рамках развитой теории. Так, в отсутствие декогеренции в результате процессов скремблинга происходит неограниченный экспоненциальный рост, пропорциональный $\text{sh}^2(aT)$, ширины МК-спектра с увеличением времени приготовления T . Процессы декогеренции ограничивают этот рост при $T \rightarrow \infty$ некоторой предельной шириной МК-спектра, качественная зависимость которой от величин параметров может быть представлена приближенной формулой [35]: $1/(p^2 B^2/2a^2 + 2p^2 A^2/a^2)$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развиваемая модель позволила исследовать влияние деградации кластеров, вызванной контролируемым возмущением на подготовительном периоде, на средний размер кластера коррелированных спинов, форму МК-спектра и его второй момент. Каждая из рассчитываемых величин была представлена в виде суммы взвешенных вкладов от кластеров разного размера. Веса представляют собой произведения вероятности появления кластера с когерентностью M и числом спинов K на функцию, описывающую деградацию. Учтены оба определенных нами ранее физических механизма деградации кластера: скорость первого определяется числом спинов в кластере, а второго — порядком когерентности. Первый из механизмов приводит к непосредственному замедлению роста числа \bar{K} с ростом времени T и даже остановки роста числа коррелированных спинов \bar{K} (локализации), как это обсуждалось в работах [11, 29–31] при обосновании способа управления распространением квантовой информации посредством контролируемого возмущения. Второй механизм изменяет форму МК-спектра и может приводить к стабилизации последнего. Результаты проведенных расчетов подтвердили предсказываемый нами ранее [33–35] эффект, состоящий в том, что при стабилизации МК-спектра рост \bar{K} может продолжиться. Таким образом, при применении МК-спектроскопии к изучению распространения квантовой информации недостаточно измерить ширину МК-спектра. Необходимо выяснить соотношение скоростей двух механизмов деградации кластеров, вызванных возмущением в исследуемом объекте.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (регистрационный номер 1021051201992–1).

ПРИЛОЖЕНИЕ

В настоящем приложении более детально рассмотрим вклад от кластеров небольших размеров.

1) Затухание с учетом начального значения $K(0) = 1$.

$$F_K(T) = \exp\left\{-\frac{p^2 B^2}{2} \left[K(0)T^2 + \int_0^T \frac{dK(t)}{dt} (T-t)^2 dt \right]\right\} = \exp(K(0)p^2 B^2 T^2 / 2 - K(T)p^2 B^2 t_T^2 / 2). \quad (A.1)$$

Поскольку начальный вклад $\exp(K(0)p^2 B^2 T^2 / 2)$ входит общим множителем для каждого слагаемого из рядов (22) и (24) (и соответствующих рядов для нормировочных множителей (23) и (25)), после нормировки он сокращается. Для первых членов рядов (22) и (24) с $K = 1 = K(0)$ не происходит роста кластера в процессе эволюции. Для них $dK(t)/dt = 0$ и деградация (затухание) отсутствует, т. е. $F_{K=1}(T) = 1$.

2) В статистической модели МК-спектра для величины g_{KM} была получена простая формула [6]:

$$g_{KM} = \begin{cases} \frac{1}{N_g} \binom{2K}{K-M}, & M \neq 0, \\ \frac{1}{2N_g} \left[\binom{2K}{K} - 2^K \right], & M = 0, \end{cases} \quad (A.2)$$

где

$$N_g = 4^K - \frac{1}{2} \left[\binom{2K}{K} + 2^K \right]$$

— нормировочный множитель. Здесь $\binom{n}{k}$ означает комбинаторный множитель: число сочетаний C_n^k . При $K = 1$ соотношение (A.2) приводит к дублету. При $K = 2$ величина g_{KM} состоит из пяти линий. Для больших кластеров биномиальную форму МК-спектра, задаваемую соотношением (A.2), заменяют функцией Гаусса

$$g_{KM} = \frac{1}{\sqrt{\pi K}} \exp\left(-\frac{M^2}{K}\right). \quad (A.3)$$

3) Рассмотрим ряд (22) для формы МК-спектра при разных значениях M . При $M = 0$ согласно (A.2) $g_{10} = 0$ и ряд начинается со слагаемого, для которого $K = 2$:

$$G_{M=0}(T) = \sum_{K=2}^{\infty} g_{K0} F_K(T) P(K, T) / N_1(T).$$

Здесь учтено, что $F_{M=0}(T) = 1$.

При $M = \pm 1$ ряд начинается с значения $K = 1$:

$$G_{M=1}(T) = \frac{1}{2} F_{M=1}(T) F_{K=1}(T) P(1, T) / N_1(T) + \sum_{K=2}^{\infty} g_{K1} F_{M=1}(T) F_K(T) P(K, T) / N_1(T).$$

Здесь $F_{K=1}(T) = \exp(-p^2 B^2 T^2 / 2)$ — начальный вклад, $F_{M=1}(T) = \exp(-p^2 A^2 T^2)$. В соответствии

с предположением нашей статьи [49] это вклады от ближайших и дальних спинов на единственном спине кластера.

При $M \geq 2$ ряд начинается с $K = M \geq 2$.

С учетом сказанного выше в рядах (22), (30) и (32) мы выделяем первое слагаемое, а при $K \geq 2$ выбираем g_{KM} в виде функции Гаусса. В функции $F_K(T)$ из формулы (A.1) начальный вклад исключается, поскольку он входит общим множителем для каждого члена ряда и сокращается при нормировке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, Москва (1990).
2. P.K. Wang, J.P. Ansermet, S. L. Rudaz, Z. Wang, S. Shore, Ch. P. Slichter, and J. M. Sinfelt, *Science* **234**, 35 (1986).
3. J. Baum and A. Pines, *J. A. Chem. Soc.* **108**, 7447 (1986).
4. S. I. Doronin, A. V. Fedorova, E. B. Fel'dman, and A. I. Zenchuk, *J. Chem. Phys.* **131**, 104109 (2009).
5. J. Baum, M. Munovitz, A. N. Garroway, and A. Pines, *J. Chem. Phys.* **83**, 2015 (1985).
6. M. Munovitz, A. Pines, *Adv. Chem. Phys.* **6**, 1 (1987).
7. Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика*, Т. 2, Мир, Москва (1978).
8. Д. Прескилл, *Квантовая информация и квантовые вычисления*, Т. 1. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», М. Ижевск (2008).
9. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **158**, 300 (2020).
10. C. M. Sanchez, A. K. Chattah, and H. M. Pastawski, *Phys. Rev. A* **105**, 052232 (2022).
11. F. D. Domínguez, M. C. Rodríguez, R. Kaiser, D. Suter, and G. A. Álvarez, *Phys. Rev. A* **104**, 012402 (2021).
12. S. H. Shenker and D. Stanford, *J. High Energy Phys.* **3**, 067 (2014).
13. D. E. Parker, X. Cao, A. Avdoshkin, T. Scaffidi, and E. Altman, *Phys. Rev. X* **9**, 041017 (2019).
14. Q. Wang and F. PerezBernal, *Phys. Rev. A* **100**, 062113 (2019).
15. Y. Gu, A. Kitaev, and P. Zhang, *J. High Energy Phys.* **2022**, 133 (2022).
16. C. Gross and I. Bloch, *Science* **357**, 995 (2017).
17. R. Blatt and C. F. Roos, *Nature Phys.* **8**, 277 (2012).
18. A. K. Khitrin, *Chem. Phys. Lett.* **274**, 217 (1997).
19. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **130**, 1047 (2006).
20. M. Gattner, Ph. Hauke, and A. M. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 040402 (2018).
21. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and I. D. Lazarev, *Phys. Rev. A* **100**, 022330 (2019).
22. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and I. D. Lazarev, *Phys. Lett. A* **406**, 127458 (2021).
23. K. X. Wei, P. Peng, O. Shtanko, I. Marvian, S. Lloyd, C. Ramanathan, and P. Cappelaro, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 090605 (2019).
24. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090501 (2004).
25. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 150503 (2006).
26. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. A* **74**, 062319 (2006).
27. G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230403 (2010).
28. G. Cho, P. Cappelaro, D. G. Cory, and C. Ramanathan, *Phys. Rev. B* **74**, 224434 (2006).
29. G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. A* **84**, 012320 (2011).
30. G. A. Alvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* **349**, 846 (2015).
31. F. D. Domínguez and G. A. Álvarez, *Phys. Rev. A* **104**, 062406 (2021).
32. D. Levy and K. Gleason, *J. Phys. Chem.* **96**, 8125 (1992).
33. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **140**, 1150 (2011).
34. А. А. Лундин and В. Е. Зобов, *Appl. Magn. Res.* **47**, 701 (2016).
35. В. Е. Зобов and А. А. Лундин, *Appl. Magn. Res.* **52**, 879 (2021).
36. M. H. Lee, I. M. Kim, W. P. Cummings, and R. Dekeyser, *J. Phys.: Condens. Matt.* **7**, 3187 (1995).
37. А. А. Лундин, В. Е. Зобов, *ЖЭТФ* **147**, 885 (2015).
38. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, ИИЛ, Москва, (1963), гл. 4, 10.

39. R. H. Schneder and H. Schmiedel, *Phys. Lett. A* **30**, 298 (1969).
40. W. K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh, *Phys. Rev. B* **3**, 684 (1971).
41. F. Lado, J. D. Memory, and G. W. Parker, *Phys. Rev. B* **4**, 1406 (1971).
42. M. H. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1579 (1984).
43. M. H. Lee and J. Hong, *Phys. Rev. B* **32**, 7734 (1985).
44. J. M. Liu and G. Müller, *Phys. Rev. A* **42**, 5854 (1990).
45. В. Л. Боднева, А. А. Лундин, А. А. Милютин, *ТМФ* **106**, 370 (1996).
46. M. Böhm, H. Leschke, M. Henneke, et al., *Phys. Rev. B* **49**, 5854 (1994).
47. В. А. Ильин, Г. Д. Ким, *Линейная алгебра и аналитическая геометрия*, Издательство МГУ, Москва (2008), гл. XIII.
48. А. А. Лундин, В. Е. Зобов, *Химическая физика* **40**, 41 (2021).
49. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **139**, 519 (2011).

ПРОВОДИМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ И КУЛОНОВСКИЙ ЛОГАРИФМ

А. Л. Хомкин, **А. С. Шумихин***

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

Поступила в редакцию 21 апреля 2022 г.,
после переработки 09 июня 2022 г.
Принята к публикации 13 июня 2022 г.

На основе предложенной методики выполнена обработка экспериментальных данных, полученных в разное время для проводимости неидеальной плазмы инертных газов. Однозначно выявить характерные эффекты неидеальности по результатам обработки не удалось. На основе извлеченного из эксперимента кулоновского логарифма выполнен анализ его поведения в области развитой кулоновской неидеальности. Предложено расчетное выражение для кулоновского логарифма. Указано на недостаточную точность методики измерений плазменных параметров в рассмотренных экспериментах.

DOI: 10.31857/S0044451022110190
EDN: LBGZCN

1. ВВЕДЕНИЕ

В 60-е годы широким фронтом развернулись исследования различных свойств неидеальной плазмы, в том числе и проводимости. Сформировалось направление «Физика неидеальной плазмы». К настоящему времени опубликовано несколько монографий (см., например, [1–5]), в которых приводятся основные экспериментальные и теоретические работы, выполненные в этой области, что позволяет нам не рассматривать подробно итоги этой работы.

Практически все ранние эксперименты, посвященные измерению проводимости неидеальной плазмы, были нацелены на исследование влияния эффектов неидеальности на проводимость полностью ионизованной плазмы, при расчете которой возникал кулоновский логарифм, да и на первом месте традиционно рассматривались эффекты неидеальности, связанные с взаимодействием между зарядами. Однако получить полностью ионизованную плазму с развитой кулоновской неидеальностью сразу, да и впоследствии оказалось непросто. Измеряли проводимость плазмы частично ионизованной. «Извлекаемая» из нее проводимость

«полностью ионизованной» плазмы содержала неконтролируемые погрешности, связанные с рядом факторов: неаддитивностью сопротивлений атомарной и заряженной компонент, отсутствием общепринятой методики расчета состава атомарной плазмы и «кулоновского логарифма» и т. д. Тем не менее «кулоновская» составляющая проводимости тем или иным способом оценивалась и сравнивалась с имеющимися аналитическими результатами [6–8]. С результатами обработки ранних экспериментов можно ознакомиться в работе [9]. Мы ограничимся одним единственным выводом — установить ярко выраженные эффекты неидеальности при сравнении теории с экспериментом не удалось, кроме одного — проводимость была конечной.

Процедура извлечения кулоновской составляющей проводимости совершенствовалась, к тому же были проведены дополнительные серии экспериментов [10] по измерению проводимости плазмы инертных газов. В работе [11] для извлечения кулоновской составляющей проводимости была использована более точная и сложная методика, в основе которой лежал расчет полной проводимости. Ожидаемого согласия с экспериментом получено не было, чем и объясняется, на наш взгляд, учет достаточно экзотических эффектов при расчете. Была использована модель, названная [12] моделью Лоренца–Блоха. Эта плазменная модель была построена на основе соотношений, предложенных еще в [13] для расчета проводимости полупроводников, и развита

* E-mail: shum._ac@mail.ru

в работе [14] для использования в плазме экстремально высоких параметров, почти твердотельных. В плазменной модели [14] было учтено вырождение термически ионизованных электронов проводимости, возможность образования ионной решетки. Частота столкновений электронов проводимости с ионной решеткой в целом рассчитывалась в борновском приближении (фактически по Займану [15]), что позволяло учесть эффекты появления ее структуры. В расчетных формулах появлялся структурный фактор ионной решетки и специфический кулоновский логарифм. Согласие с экспериментом достигалось коррекцией «кулоновской составляющей» полной проводимости.

Авторы работы [16] также выполнили расчет проводимости плазмы инертных газов, используя исчерпывающий набор вариантов расчета кулоновского логарифма. Достигнуть согласия с экспериментальными данными [10], на наш взгляд, так и не удалось. Заметим также, что по данным самих авторов работы [11] эффектов сильного вырождения для большинства экспериментальных точек не наблюдалось. Параметр вырождения ϑ , равный отношению температуры к энергии Ферми, был везде заметно больше единицы. Да и проявления ионной структуры было весьма слабым, поскольку маделунговский параметр неидеальности Γ_i был заметно меньше единицы для большинства точек:

$$\Gamma_i = \frac{\beta q^2}{R_i}, \quad (1)$$

где $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура, q — заряд электрона, $R_i = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ — радиус ячейки Вигнера-Зейтца, n_i — концентрация ионов. В работе [9] используется другой параметр неидеальности:

$$\Gamma = \frac{\beta q^2}{R_D}, \quad (2)$$

где

$$R_D = 1/\sqrt{4\pi\beta q^2(n_e + n_i)}. \quad (3)$$

Между параметрами неидеальности есть связь: $\Gamma_i^3 = 6\Gamma^2$.

Мы решили вновь обратиться к рассмотрению данных экспериментов [9, 10] в инертных газах, приняв во внимание ряд новых факторов, а также несколько изменив методику расчета полной проводимости.

Действительно, в последнее время опубликованы результаты нескольких серий численных *ab initio* экспериментов [17, 18], где методом молекулярной динамики рассчитывалась проводимость полностью

ионизованной неидеальной плазмы. При обработке экспериментов в работах [10, 11, 16] эти данные не рассматривались. Не учитывались и работы, связанные с прямым решением уравнения Больцмана для полностью ионизованной неидеальной плазмы [19, 20].

В настоящей работе мы рассмотрим проблему расчета проводимости частично ионизованной неидеальной плазмы инертных газов, сформулировав достаточно простую, но единую методику расчета уравнения состояния, состава, проводимости и обработки исходных экспериментальных данных. Единственной неопределенной величиной, извлекаемой из эксперимента, будем считать величину кулоновского логарифма. Именно здесь следует ожидать наиболее яркие эффекты кулоновской неидеальности. В результате исследования хотелось бы понять, с чем связаны наблюдаемые отклонения от теории, — с ее несовершенством или с трудностями измерений и диагностики неидеальной плазмы, получаемой в ударно-волновых экспериментах.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА, УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И СОСТАВ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Рассмотрим систему, состоящую из N_a атомов, N_e электронов и N_i ионов, находящихся в объеме V , при температуре T . Будем считать газ свободных электронов невырожденным ($\vartheta > 1$) с максвелловской функцией распределения. Свободная энергия неидеальной смеси атомов, электронов и ионов в аддитивном приближении запишем в виде суммы свободных энергий атомарной и заряженной компонент:

$$F = F_a + F_{ch}, \quad (4)$$

где

$$F_a = -N_a k_B T \ln\left(\frac{eV g_a \exp(\beta I)}{N_a \lambda_a^3}\right) + N_a k_B T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad (5)$$

$$F_{ch} = -N_e k_B T \ln\left(\frac{eV g_e}{N_e \lambda_e^3}\right) - N_i k_B T \ln\left(\frac{eV g_i}{N_i \lambda_i^3}\right) - (N_e + N_i) \Delta f_{ei}. \quad (6)$$

В выражениях (5), (6) λ_e , λ_i и λ_a — соответственно тепловые длины волн электрона, иона и атома, g_e , g_i и g_a — статистические веса электрона, иона и атома, η — параметр упаковки, I — потенциал ионизации атома.

Перекрестные слагаемые, связанные с взаимодействием атом-заряд, в первом приближении мы

не учитываем (их учет выполнен в работе [21]), поскольку область, где одновременно высоки концентрации атомов и зарядов, в рассматриваемых нами условиях невелика.

В термодинамике нами учтены два вида неидеальности: исключенный объем в приближении Карнахана–Старлинга (второе слагаемое в (5)) для атомарной компоненты и кулоновское взаимодействие между разноименными зарядами в приближении ближайшего соседа [22] (третье слагаемое в (6)) для заряженной компоненты:

$$\Delta f_{ei} = \frac{3q^2}{4R_i}. \quad (7)$$

Наша практика показала [23], что этого вполне достаточно для плазмы инертных газов в рассматриваемых условиях, при расчетах с процентной точностью.

Равновесный состав газоплазменной смеси определяется из решения уравнений баланса, главным из которых является связь химических потенциалов атомов μ_a , электронов μ_e и ионов μ_i в реакции ионизации:

$$\mu_a = \mu_e + \mu_i. \quad (8)$$

Безразмерные ($\beta = 1/k_B T$) химические потенциалы определяются из свободной энергии $\beta\mu_{a,e,i} = \partial\beta F/\partial N_{a,e,i}$ и соответственно равны

$$\beta\mu_a = -\ln\left(\frac{Vg_a}{N_a\lambda_a^3}\right) + HS(\eta), \quad (9)$$

$$\beta\mu_{e,i} = -\ln\left(\frac{Vg_{e,i}}{N_{e,i}\lambda_{e,i}^3}\right) - \frac{\beta q^2}{R_i}, \quad (10)$$

$$HS(\eta) = \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1 - \eta)^3}. \quad (11)$$

Вводя степень термической ионизации $\alpha = n_{(e,i)}/n$, получим из (8) уравнение ионизационного равновесия — формулу Саха:

$$\frac{1 - \alpha}{\alpha^2} = n\lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp\left(\beta I - \frac{\beta q^2}{R_i} - HS(\eta)\right). \quad (12)$$

Формулу Саха необходимо дополнить уравнениями электронейтральности и баланса:

$$n_e = n_i, \quad (13)$$

$$n = n_a + n_i. \quad (14)$$

Уравнения (12) и (13), (14) полностью определяют состав газоплазменной смеси, а решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n, T)$. Наша методика дает результаты, весьма близкие к данным

расчетов по коду SANA IV [9, 11], что подтверждается сопоставлением результатов расчета состава — существенной величиной при расчете проводимости. На рис. 1 и 2 нанесены безразмерные величины n_e/n , n_a/n в зависимости от плотности. Для плазмы аргона и ксенона различия в расчетах не превосходят 5 % для аргона и 5–10 % для ксенона (см. рис. 2). Для аргона температура в этих расчетах соответствует 17000–20000 К, для ксенона $T = 25000$ –30000 К. Поскольку, как будет видно из дальнейшего, речь идет об отклонениях теории и эксперимента в десятки процентов, в уточнении термодинамической модели нет необходимости.

3. ПРОВОДИМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

По оценкам самих авторов работы [11] и нашим расчетам роль эффектов вырождения и роль структуры ионной решетки не велики. Для расчета проводимости мы воспользуемся хорошо зарекомендовавшей себя [23] интерполяционной формулой Фроста. Ее точность была установлена путем сравнения с результатами расчетов, полученных на основе прямого решения уравнения Больцмана [24] для частично ионизованной плазмы инертных газов. Установленная погрешность расчетов по формуле Фроста по сравнению с расчетами на основе уравнения Больцмана не превышала 10 %, что можно считать вполне достаточной для реализации целей настоящей работы. Надо отметить, что и формула Лоренца–Блоха [12] и формула Фроста не являются точными соотношениями, а построены с использованием τ -приближения для интеграла столкновений [7]. В этом приближении вместо транспортного сечения, возникающего естественным образом в модели Лоренца [7], используется некое эффективное время между столкновениями $\tau(E)$, что позволяет существенно упростить интеграл столкновений [7]:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{f - f_0}{\tau(E)}. \quad (15)$$

Для проводимости сразу имеем:

$$\sigma_\tau = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{q^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty e^{-E/T} E^{3/2} \tau(E) dE, \quad (16)$$

где q , m_e и E — заряд, масса и энергия электрона проводимости. С формальной точки зрения, выбор $\tau(E)$ произволен. Наличие точных соотношений для полностью ионизованной и слабоионизованной

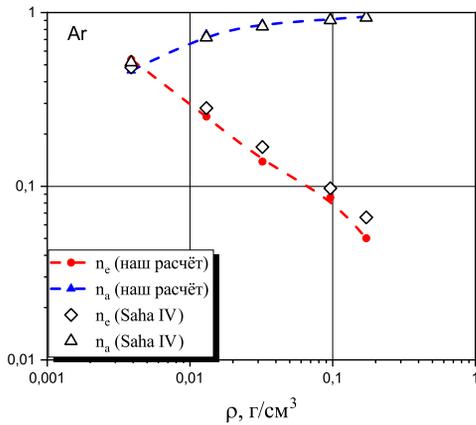


Рис. 1. Состав плазмы паров Ar. Наш расчет: штриховая кривая с кружками — концентрация электронов (n_e/n); штриховая кривая с треугольниками — концентрация атомов (n_a/n). Saha IV [9]: пустые ромбы — концентрация электронов; пустые треугольники — концентрация атомов

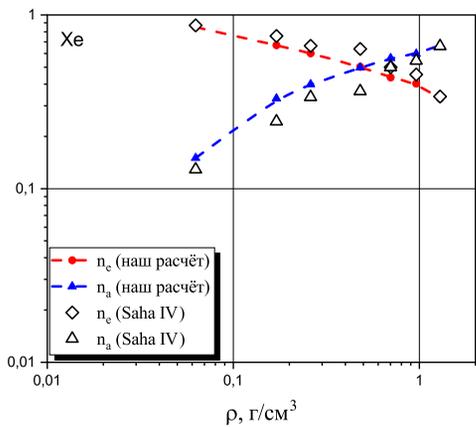


Рис. 2. Состав плазмы паров Xe. Наш расчет: штриховая кривая с кружками — концентрация электронов (n_e/n), штриховая кривая с треугольниками — концентрация атомов (n_a/n). Saha IV [9]: пустые ромбы — концентрация электронов, пустые треугольники — концентрация атомов

плазмы позволило Фросту [25] предложить интерполяционную формулу, носящую его имя.

Формула Фроста строится с использованием τ -приближения с временем пробега τ_F :

$$\tau_F = \frac{1}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}. \quad (17)$$

В частоту столкновений, которая определяет величину τ_F , введен множитель $\gamma_S = 0.582$, полученный Спитцером для полностью ионизованной плаз-

мы и учитывающий межэлектронные столкновения. Именно поэтому формула Фроста дает близкие к точным результатам значения для полностью и слабоионизованной плазмы:

$$\sigma_F = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{q^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \frac{e^{-E/T} E^{3/2} dE}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}. \quad (18)$$

Для последующей обработки экспериментальных данных мы запишем частоту столкновений электронов проводимости с ионами в виде

$$\nu_{e,i}(E, \Gamma) = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \left(4\pi n_i \left(\frac{q^2}{2E} \right)^2 A(\Gamma) \right), \quad (19)$$

где $A(\Gamma)$ — искомый нами (на основе обработки экспериментов) кулоновский логарифм — величина, вокруг которой идут основные дискуссии.

Качественно, кулоновский логарифм определяется как логарифм отношения максимального прицельного параметра рассеяния к минимальному. Можно говорить, что его величина надежно установлена лишь при его больших значениях в случае плазмы термоядерных условий. Простейший вариант кулоновского логарифма $\ln(1/\Gamma)$ мы находим у Спитцера [6] и Ландау [26]. Возможны и иные варианты, $\ln(1 + a/\Gamma)$. В литературе можно найти десяток «формул» для кулоновского логарифма, так что предмет поиска присутствует.

Для расчета частоты столкновений электронов с атомами инертных газов воспользуемся весьма точными (точность 6–9 % для Ar, Xe) аппроксимационными формулами, предложенными в работах [27,28]:

$$\sigma_{ea}(\epsilon) = \sum_i \frac{A_i + B_i \epsilon^{C_i}}{1 + D_i \epsilon^{E_i}}, \quad (20)$$

где $\epsilon = E/I$, I — потенциал ионизации атома инертного газа; A_i, B_i, C_i, D_i, E_i — коэффициенты аппроксимации, приведенные в [27, 28].

4. МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Разобьем всю совокупность экспериментальных данных на две группы: группа 1 — «ранние» [9] эксперименты и группа 2 — «новые» [10, 11] эксперименты. Такое разделение обусловлено прогрессом в уровне диагностики и обработки экспериментальных данных, полученных в рассматриваемых экспериментах в разное время.

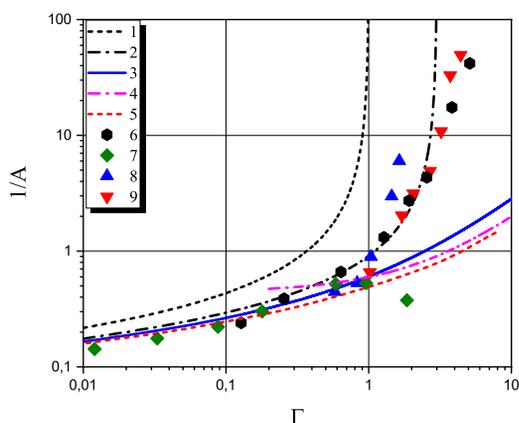


Рис. 3. Обратный кулоновский логарифм. Теория: 1 — $\ln(1/\Gamma)$; 2 — $\ln(3\sqrt{2}/\Gamma)$; 3 — $\ln(1 + 3\sqrt{2}/\Gamma)$; 4 — решение уравнения Больцмана для потенциала Muffin tin [19]; 5 — решение уравнения Больцмана для экранированного потенциала [20]. Результаты *ab initio* расчетов: 6 — [17]; 7 — [18]. Эксперимент [9]: 8 — Ar; 9 — Xe

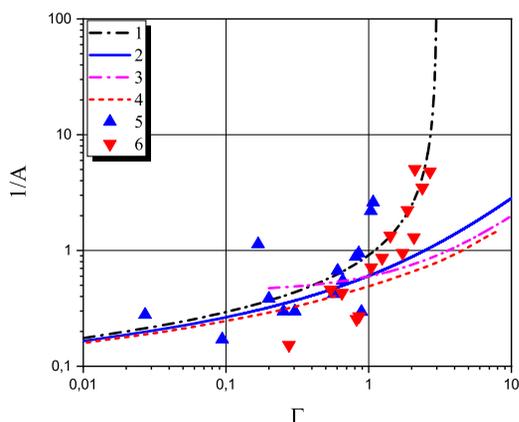


Рис. 4. Обратный кулоновский логарифм. Теория: 1 — $\ln(3\sqrt{2}/\Gamma)$; 2 — $\ln(1 + 3\sqrt{2}/\Gamma)$; 3 — решение уравнения Больцмана для потенциала Muffin tin [19]; 4 — решение уравнения Больцмана для экранированного потенциала [20]. Эксперимент [10, 11]: 5 — Ar; 6 — Xe

В таблице приводятся диапазоны параметров, при которых выполнены эксперименты [9, 11]. Данные двух групп экспериментов различаются диапазонами давлений и температур. Для [9] это $T \sim (20-30) \cdot 10^3$ К и $P \sim 300-2000$ бар. Для [11] диапазон несколько иной: $T \sim (6.5-18.3) \cdot 10^3$ К и $P \sim 392-6500$ бар. Важными являются диапазоны параметров неидеальности и вырождения. Видно, что эф-

Таблица 1.

Группа	P , бар	T , кК	Γ_i	Γ	ϑ
1 — [9]	300–2000	20–30	—	0.5–4.5	—
2 — [10, 11]	400–6500	6.5–18.3	0.05–1	—	10^4-10

фекты вырождения в первом приближении можно не учитывать. Эксперименты [1] по измерению уравнения состояния плазмы инертных газов в рассматриваемом диапазоне параметров неидеальности не показали наличия существенных эффектов, требующих учета при расчете состава. Пробные расчеты состава (см. рис. 1, 2) по нашей модели (4)–(6) с процентной точностью совпадают с расчетами по коду SANA IV, приведенными в [11].

Процедура обработки экспериментальных данных заключалась в следующем. Для каждой экспериментальной точки по заданной плотности и температуре рассчитывался состав и полная проводимость по формуле (18). Далее находилась величина A , при которой расчет совпадал с экспериментом. На рисунках откладывалась величина $1/A$ при соответствующем параметре неидеальности Γ . При обработке результатов численных *ab initio* расчетов рассчитанное значение проводимости σ_c делилось на величину σ_0 , и на рисунке откладывалась величина $1/A = \sigma_c/\sigma_0$, где

$$\sigma_0[\text{с}^{-1}] = 0.591 \frac{(k_B T)^{3/2}}{\sqrt{m_e q^2}}. \quad (21)$$

На рис. 3 представлены результаты обработки, которые можно назвать искомой величиной кулоновского логарифма. При $\Gamma < 1$ результаты теории и всех теоретических расчетов практически совпадают. При $\Gamma > 1$ результаты эксперимента лежат ближе к расчету по варианту 2 и не совпадают с решениями уравнения Больцмана и с *ab initio* расчетами [18], но неплохо совпадают с данными работы [17]. Однако результаты [17] при $\Gamma > 1$ лежат вне границ применимости использованной при расчетах модели «с полочкой». При $\Gamma = 3\sqrt{2}$ расходимость кулоновского логарифма отсутствует и имеет согласие [18] с результатами решений уравнения Больцмана [19, 20].

На рис. 4 представлены данные по обработке экспериментов [10, 11]. Ситуация при $\Gamma > 1$ немного изменилась. Экспериментальные точки заметно приблизились к данным работ [19, 20], но обращает на себя внимание группа точек при $\Gamma < 1$. Их отклоне-

ния от теории, причем с разных сторон, однозначно говорят о недостаточной точности эксперимента. Ярких эффектов неидеальности в этой серии также не наблюдается.

Мы в своих расчетах проводимости плазмы паров металлов и инертных газов пользовались и продолжаем пользоваться вариантом под номером 3 (см. рис. 3):

$$A = \ln\left(1 + \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma}\right). \quad (22)$$

Этот вариант при $\Gamma > 1$ проходит между результатами численного моделирования [17, 18] и близок к результатам, полученным при решении уравнения Больцмана, что позволяет нам рекомендовать его для расчетов в области $\Gamma < 3$, что вполне достаточно «для пользователей».

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена обработка экспериментальных данных, полученных в разное время для проводимости неидеальной плазмы инертных газов с использованием новой методики. По результатам обработки не удалось однозначно выявить эффекты неидеальности. Установленное поведение кулоновского логарифма показывает его регулярность, но не позволяет однозначно выявить его функциональную зависимость от параметра неидеальности. Скорее всего это обусловлено трудностями измерения и диагностики в эксперименте, а не недостатками теории.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Физика неидеальной плазмы*, Физматлит, Москва (2010).
2. В. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Репке, *Квантовая статистика систем заряженных частиц*, Мир, Москва (1988).
3. W. Ebeling, W. D. Kraeft, and D. Kremp, *Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids*, Akademie-Verlag, Berlin (1976).
4. П. П. Кулик, В. А. Рябый, Н. В. Ермохин, *Неидеальная плазма*, Энергоатомиздат, Москва (1984).
5. Л. П. Кудрин, *Статистическая физика плазмы*, Атомиздат, Москва (1974).
6. Л. Спитцер, *Физика полностью ионизованного газа*, под ред. М. Л. Левина, Мир, Москва (1965).
7. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
8. H. A. Gould and H. E. De Witt, *Phys. Rev.* **155**, 68 (1967).
9. В. Ю. Иванов, В. Б. Минцев, В. Е. Фортов, А. Н. Дремин, *ЖЭТФ* **71**, 216 (1976).
10. Н. С. Шилкин, С. В. Дудин, В. К. Грязнов и др., *ЖЭТФ* **124**, 1030 (2003).
11. J. R. Adams, N. S. Shilkin, V. E. Fortov et al., *Phys. Plasmas* **14**, 062303 (2007).
12. В. К. Грязнов, Ю. В. Иванов, А. Н. Старостин, В. Е. Фортов, *ТВТ* **14**, 643 (1976).
13. Б. М. Аскеров, *Электронные явления переноса в полупроводниках*, Наука, Москва (1975).
14. А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, А. В. Филиппов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 708 (2016).
15. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1972).
16. А. В. Филиппов, А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, *ЖЭТФ* **153**, 514 (2018).
17. Г. Э. Норман, И. В. Морозов, *ЖЭТФ* **127**, 412 (2005).
18. A. A. Bobrov, A. M. Bunkov, S. Y. Bronin, A. V. Klyarfeld, B. V. Zelener, and V. V. Zelener, *Phys. Plasmas* **26**, 082102 (2019).
19. И. А. Муленко, А. Л. Хомкин, *ТВТ* **29**, 1234 (1991).
20. Е. В. Заика, И. А. Муленко, А. Л. Хомкин, *ТВТ* **38**, 5 (2000).
21. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *ТВТ* **52**, 335 (2014).
22. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *Вестник ОИВТ РАН* **3**, 4 (2020).
23. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *УФН* **191**, 1187 (2021).
24. Э. И. Асиновский, В. М. Батенин, *ТВТ* **6**, 966 (1968).
25. L. Frost, *J. Appl. Phys.* **32**, 2029 (1961).
26. Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 203 (1937).
27. R. I. Golyatina and S. A. Maiorov, *Phys. Sci. Technol.* **8**, 4 (2021).
28. Р. И. Голятина, С. А. Майоров, *Успехи прикладной физики* **9**, 298 (2021).

ДИНАМИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ОБЛАКОВ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ

А. М. Камчатнов ^{a*}, Д. В. Шайкин ^{b**}

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

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

Поступила в редакцию 06 июня 2022 г.,
после переработки 06 июня 2022 г.
Принята к публикации 24 июня 2022 г.

На основе связи кинетического уравнения, описывающего взаимодействие двух солитонных облаков в теории уравнения Кортевега–де Фриза, с уравнениями динамики для газа Чаплыгина показано, что фундаментальным свойством нелинейной динамики солитонных газов является существование волн, распространяющихся без изменения формы. Приведены решения нескольких типичных задач динамики солитонных газов и указаны характерные черты такой динамики, позволяющие дать оценку эффектов взаимодействия солитонных газов.

DOI: 10.31857/S0044451022110207
EDN: LBHFAX

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, солитоны получили свое название [1] по аналогии с названиями элементарных частиц (электрон, протон и т.п.) в силу их упругого взаимодействия друг с другом для важного класса нелинейных волновых уравнений. А именно, две уединенные волны, находящиеся до их «столкновения» вдали друг от друга, пройдя через стадию взаимодействия, возвращаются к своей первоначальной форме без образования каких-либо дополнительных волн. Тем не менее акт их взаимодействия не проходит совсем бесследно и в результате него траектории солитонов приобретают дополнительные сдвиги по сравнению с их первоначальными траекториями [2]. Например, в случае уравнения Кортевега–де Фриза (КдФ), являющегося универсальным волновым уравнением для описания волн с учетом малых эффектов нелинейности и дисперсии, которое мы запишем в стандартных безразмерных переменных,

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (1)$$

солитонное решение имеет вид

$$u(x, t) = \frac{\kappa^2}{2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2[\kappa(x - \kappa^2 t - x_0)/2]}, \quad (2)$$

т.е. скорость солитона $s = \kappa^2$ пропорциональна его амплитуде $a = \kappa^2/2$. Если в начальный момент времени волновое возбуждение может быть представлено с хорошей точностью в виде двух удаленных друг от друга солитонных импульсов (2), причем более быстрый солитон с параметром $\kappa = \kappa_2$ имеет начальную координату x_{02} левее координаты x_{01} более медленного солитона с параметром κ_1 ($\kappa_1 < \kappa_2$), то их первоначальные траектории $x = \kappa_1^2 t + x_{01}$, $x = \kappa_2^2 t + x_{02}$ приобретут после столкновения сдвиги

$$x = \kappa_1^2 t + x_{01} + \Delta x_1, \quad x = \kappa_2^2 t + x_{02} + \Delta x_2,$$

где

$$\Delta x_1 = -\frac{2}{\kappa_1} \ln \frac{\kappa_2 + \kappa_1}{\kappa_2 - \kappa_1}, \quad \Delta x_2 = \frac{2}{\kappa_2} \ln \frac{\kappa_2 + \kappa_1}{\kappa_2 - \kappa_1}. \quad (3)$$

Таким образом, быстрый солитон с большой амплитудой сдвигается вперед, а медленный и низкий — назад, причем по абсолютной величине сдвиг низкого больше, чем сдвиг высокого. Замечательно, что для важного класса интегрируемых уравнений могут быть получены решения с любым числом солитонов. При этом в результате одновременного столкновения трех или большего их числа суммарный

* E-mail: kamch@isan.troitsk.ru

** E-mail: shaykin.dv@phystech.edu

сдвиг каждого солитона равен сумме сдвигов вида (3) для парных столкновений (см., например, [3, 4]), т.е. множественные столкновения солитонов одновременно в одной области пространства не отличаются в этом смысле от последовательных пространственно разделенных парных столкновений солитонов друг с другом.

Представим теперь, что в нашей волновой системе возбуждено очень большое число солитонов, каждый из которых характеризуется своим параметром κ . Тогда можно говорить о газе солитонов и использовать для его описания представления газовой кинетики. Если обозначить через $f(\kappa, x, t) dx d\kappa$ число солитонов с координатами в интервале $(x, x + dx)$, которые имеют параметр κ в интервале $(\kappa, \kappa + d\kappa)$ в момент времени t , то эволюция такого газа характеризуется зависимостью функции распределения $f(\kappa, x, t)$ по координате и параметру κ от времени. Задача найти кинетические уравнения для такой эволюции была поставлена Захаровым в работе [5] и решена им для разреженного газа солитонов, когда их столкновения друг с другом в среднем мало изменяют скорости $s = \kappa^2$. Позже Эль, исследуя специальный предел модуляционных уравнений Уизема для бесконечнофазного решения уравнения КдФ, получил в работе [6] обобщение кинетического уравнения Захарова на плотный солитонный газ. Более простой вывод этого уравнения на основе самосогласованного определения средней скорости солитона, движущегося сквозь газ, был дан в работе [7] и там же было получено простейшее решение этих уравнений, описывающее столкновение двух облаков солитонных газов, в каждом из которых параметры κ близки друг к другу. Формальные решения для любого числа таких облаков изучались в работах [8, 9]. В настоящее время теория кинетических уравнений для солитонов стала частью активно развивающейся так называемой «обобщенной гидродинамики», которая находит приложения к различным интегрируемым моделям систем многих взаимодействующих частиц (см., например, обзоры [10, 11] и имеющиеся там ссылки). Однако, несмотря на такой значительный формальный прогресс, физическое понимание поведения солитонных газов представляется недостаточным, так как до сих пор имеется лишь очень небольшое число решенных задач, дающих представление о характерных чертах динамики взаимодействующих солитонных газов. В то же время в настоящее время начались экспериментальные исследования динамики солитонных газов в различных физических системах, включая волны на воде и холодные атомы (см.,

например, [12–14]), что требует создания ясной картины динамики солитонных газов. В данной статье мы представим несколько примеров такой типичной динамики, которые позволяют понять некоторые существенные свойства газовой динамики солитонов, отличающие ее от динамики обычных газов.

2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ГАЗА СОЛИТОНОВ

Сначала приведем для полноты краткий вывод кинетического уравнения для солитонного газа КдФ, следуя методу работы [7]. Прежде всего заметим, что в силу интегрируемости уравнения КдФ, открытой в работе [15], эволюция волны $u(x, t)$ происходит таким образом, что спектр задачи на собственные значения для ассоциированного с уравнением КдФ стационарного уравнения Шрёдингера $\psi_{xx} = -(u(x, t) + \lambda)\psi$ не зависит от времени t и каждому солитону отвечает некоторое значение $\lambda < 0$ дискретного спектра. Более удобный параметр κ , использованный в записи солитонного решения в виде (2), связан с λ соотношением $\kappa = \sqrt{-\lambda}$. Следовательно, при эволюции волны согласно уравнению КдФ как спектр, так и набор значений κ при движении солитонов, сопровождаемом их столкновениями, не изменяется. Если бы солитоны при их столкновениях не претерпевали сдвигов (3), то их скорости выражались бы формулой $s = \kappa^2$ для всех солитонов с параметром κ . Однако столкновения модифицируют эту скорость. При каждом столкновении солитона с более медленными солитонами, имеющими параметр $\eta < \kappa$, «пробный» κ -солитон продвигается вперед на дополнительное расстояние

$$\frac{2}{\kappa} \ln \frac{\kappa + \eta}{\kappa - \eta},$$

и число таких столкновений в единицу времени равно относительной скорости $s(\kappa) - s(\eta)$, умноженной на плотность η -солитонов. Следовательно, благодаря таким столкновениям κ -солитон приобретает добавку к скорости

$$\int_0^{\kappa} \frac{2}{\kappa} \ln \frac{\kappa + \eta}{\kappa - \eta} [s(\kappa) - s(\eta)] f(\eta) d\eta. \quad (4)$$

Аналогичным образом каждый солитон с параметром $\eta > \kappa$, обгоняющий «пробный» κ -солитон, сме-

щает его за единицу времени назад на расстояние

$$\begin{aligned}
 & - \int_{\kappa}^{\infty} \frac{2}{\kappa} \ln \frac{\eta + \kappa}{\eta - \kappa} [s(\eta) - s(\kappa)] f(\eta) d\eta = \\
 & = \int_{\kappa}^{\infty} \frac{2}{\kappa} \ln \left| \frac{\kappa + \eta}{\kappa - \eta} \right| [s(\kappa) - s(\eta)] f(\eta) d\eta,
 \end{aligned}$$

получаемое умножением сдвига $-\frac{2}{\kappa} \ln \frac{\eta + \kappa}{\eta - \kappa}$ при единичном столкновении на число таких столкновений $[s(\eta) - s(\kappa)] f(\eta)$ и интегрированием по значениям $\eta > \kappa$. Прибавляя эти добавки к немодифицированному значению скорости κ^2 , получаем самосогласованное уравнение

$$s(\kappa) = \kappa^2 + \frac{2}{\kappa} \int_0^{\infty} \ln \left| \frac{\kappa + \eta}{\kappa - \eta} \right| [s(\kappa) - s(\eta)] f(\eta) d\eta. \quad (5)$$

Таким образом, функция распределения солитонов с параметром κ переносится вдоль оси x со скоростью $s(\kappa)$, определяемой интегральным уравнением (5), и условие сохранения спектра при эволюции волны согласно уравнению КдФ записывается в виде закона сохранения:

$$\frac{\partial f(\kappa, x, t)}{\partial t} + \frac{\partial [s(\kappa) f(\kappa, x, t)]}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Это уравнение, дополненное интегральным уравнением (5), называется кинетическим уравнением для газа солитонов КдФ, и оно было другим способом получено в работе Эля [6]. Отметим, что учет лишь парных столкновений в уравнении (5) в плотном солитонном газе оправдывается упомянутым выше сложением сдвигов при кратных столкновениях солитонов.

Если газ солитонов разреженный, т.е. $\int f(\kappa) d\kappa \ll \kappa_0$, где κ_0 — характерное значение параметра κ в распределении $f(\kappa)$, то поправочный член в формуле (5) мал и в него можно подставить немодифицированное значение $s(\kappa) \approx \kappa^2$:

$$s(\kappa) = \kappa^2 + \frac{2}{\kappa} \int_0^{\infty} \ln \left| \frac{\kappa + \eta}{\kappa - \eta} \right| (\kappa^2 - \eta^2) f(\eta) d\eta. \quad (7)$$

Это выражение определяет функцию $s(\kappa)$ замкнутой формулой в отличие от интегрального уравнения (5) для плотного газа солитонов. Система (6), (7) была получена Захаровым в работе [5] вместе со сформулированным здесь подходом к кинетике газа солитонов. Ясно, что такого рода кинетические уравнения могут быть получены и для других полностью интегрируемых уравнений с изоспектральной эволюцией нелинейных волн.

3. ДВУХПОТОКОВЫЕ ТЕЧЕНИЯ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ

Чтобы получить представление о динамике солитонных газов согласно кинетическому уравнению (5), (6), предположим, что функция распределения имеет два очень узких пика вблизи значений κ_1 и κ_2 , т.е. ее можно представить в виде

$$f(\kappa, x, t) = f_1(x, t) \delta(\kappa - \kappa_1) + f_2(x, t) \delta(\kappa - \kappa_2). \quad (8)$$

Это означает, что мы рассматриваем динамику взаимодействующих газов на временах, когда столкновениями солитонов одного сорта с очень близкими скоростями можно пренебречь и учитывать только столкновения между солитонами разных сортов. Тогда подстановка функции распределения (8) в (6) и (7) дает законы сохранения

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial (s_1 f_1)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial f_2}{\partial t} + \frac{\partial (s_2 f_2)}{\partial x} = 0, \quad (9)$$

где скорости s_1, s_2 удовлетворяют уравнениям

$$s_1 = \kappa_1^2 + \alpha_1 f_2 (s_1 - s_2), \quad s_2 = \kappa_2^2 + \alpha_2 f_1 (s_2 - s_1), \quad (10)$$

и мы ввели для удобства обозначения

$$\alpha_1 = \frac{2}{\kappa_1} \ln \left| \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{\kappa_1 - \kappa_2} \right|, \quad \alpha_2 = \frac{2}{\kappa_2} \ln \left| \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{\kappa_1 - \kappa_2} \right|. \quad (11)$$

Уравнения (10) позволяют выразить перенормированные скорости через плотности солитонных газов:

$$\begin{aligned}
 s_1 & = \frac{\kappa_1^2 (1 - \alpha_2 f_1) - \kappa_2^2 \alpha_1 f_2}{1 - \alpha_1 f_2 - \alpha_2 f_1}, \\
 s_2 & = \frac{\kappa_2^2 (1 - \alpha_1 f_2) - \kappa_1^2 \alpha_2 f_1}{1 - \alpha_1 f_2 - \alpha_2 f_1}.
 \end{aligned} \quad (12)$$

Если же выразить из (10) плотности $f_{1,2}$ через скорости $s_{1,2}$,

$$f_1 = \frac{s_2 - \kappa_2^2}{\alpha_2 (s_2 - s_1)}, \quad f_2 = \frac{\kappa_1^2 - s_1}{\alpha_1 (s_2 - s_1)}, \quad (13)$$

и подставить эти выражения в (9), то эта система приводится к замечательно простому диагональному виду:

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + s_2 \frac{\partial s_1}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial s_2}{\partial t} + s_1 \frac{\partial s_2}{\partial x} = 0, \quad (14)$$

где перенормированные скорости s_1, s_2 являются римановыми инвариантами этой системы уравнений гидродинамического типа.

Формально уравнения (14) похожи на уравнения газовой динамики в римановой форме, но физические свойства солитонного газа весьма отличны от

свойств обычного газа. Прежде всего заметим, что, хотя скорости солитонов перенормируются в области перекрытия солитонных облаков, такое изменение скорости нельзя интерпретировать как ускорение солитонов под действием давления: после выхода из области перекрытия их скорости восстанавливают свои первоначальные значения. Далее, газы свободно протекают сквозь друг друга с перенормированными скоростями, не испытывая никаких диссипативных процессов. При этом динамические уравнения (9) имеют форму законов сохранения и, как и в теории вязких ударных волн, допускают разрывные решения. Наконец, в нашем случае можно считать, что солитонные газы имеют нулевую температуру, так что переход через разрыв не связан с увеличением энтропии, т.е. теорема Жуге–Цемплена (см., например, [16]) неприменима и разрыв может иметь любой знак. Из этого же следует, что существование таких формально разрывных течений не связано с опрокидыванием солитонного импульса и последующим формированием узкого переходного слоя, связывающего два течения с разными параметрами, как это происходит в теории вязких ударных волн. Прояснить этот вопрос помогает связь уравнений (14) с теорией газа Чаплыгина. В работе [17] Чаплыгин указал, что уравнение состояния газа

$$p = A - \frac{B}{\rho} \tag{15}$$

(p — давление газа, ρ — его плотность, A, B — постоянные параметры) может служить удобным приближением на отдельных участках адиабаты Пуассона, когда формулы теории значительно упрощаются. (Обратим внимание, что им также была отмечена связь уравнений газовой динамики для этого случая с теорией минимальных поверхностей). Мы, однако, подойдем к теории газа Чаплыгина с другой стороны.

Еще на первоначальном этапе создания теории ударных волн в работах Стокса и Кельвина обсуждался вопрос, допускают ли уравнения газовой динамики

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0, \quad u_t + uu_x + \frac{c^2}{\rho} \rho_x = 0 \tag{16}$$

($c^2 = dp/d\rho$, c — скорость звука) решения в виде стационарной распространяющейся волны. При такой постановке вопроса ясно, что в стационарном решении как плотность ρ , так и скорость течения u являются функциями только координаты, $\xi = x - Vt$, т.е. они связаны друг с другом однозначной зависимостью. Следовательно, такое решение должно быть

простой волной и выражаться формулой Пуассона (см. [16])

$$\rho = \rho_0[x - (c + u)t], \tag{17}$$

$\rho_0(x)$ — профиль плотности в такой волне, распространяющейся со скоростью $c + u$. При этом связь между ρ и u выражается условием постоянства риманова инварианта:

$$u - \int c d\rho / \rho = r_- = \text{const.}$$

Для существования волны со стационарным профилем необходимо, чтобы выполнялось условие $c + u = \text{const.}$ Подставляя сюда соотношения

$$c = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}}, \quad u = \int_0^\rho \sqrt{\frac{dp}{d\rho}} \frac{d\rho}{\rho} + \text{const.},$$

получаем после дифференцирования по ρ уравнение для допускающих стационарную волну уравнений состояния газа $p = p(\rho)$:

$$\frac{d^2 p}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dp}{d\rho} = 0.$$

Это уравнение легко решается и дает как раз указанную выше зависимость (15). Приняв для простоты $B = 1$, мы тогда имеем $c^2 = dp/d\rho = 1/\rho^2$, $c = 1/\rho$ и римановы инварианты (см. [16]) оказываются равными

$$\begin{aligned} s_1 &= u + \int \frac{cd\rho}{\rho} = u - \frac{1}{\rho}, \\ s_2 &= u - \int \frac{cd\rho}{\rho} = u + \frac{1}{\rho}, \end{aligned} \tag{18}$$

где u и ρ подчиняются уравнениям Эйлера для газа Чаплыгина

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0, \quad u_t + uu_x + \frac{\rho_x}{\rho^3} = 0 \tag{19}$$

и выражаются через римановы инварианты как

$$\rho = \frac{2}{s_2 - s_1}, \quad u = \frac{1}{2}(s_2 + s_1). \tag{20}$$

Если переписать уравнения (19) через римановы инварианты (18), то простые вычисления приводят к уравнениям для динамики газа Чаплыгина в диагональной римановой форме, совпадающей с уравнениями (14), описывающими динамику двух взаимодействующих солитонных газов.

Если теперь мы будем искать решение уравнений (19) в виде бегущей с постоянной скоростью V волны $\rho = \rho(\xi)$, $u = u(\xi)$, $\xi = x - Vt$, то легко найдем, что эти уравнения удовлетворяются при любой

функции $\rho(\xi)$, если скорость течения газа Чаплыгина выражается через $\rho(\xi)$ формулой

$$u(\xi) = V + \frac{1}{\rho(\xi)}. \tag{21}$$

В этом случае инварианты Римана равны

$$s_1 = V, \quad s_2 = V + \frac{2}{\rho(\xi)}. \tag{22}$$

Очевидно, что эти формулы дают решение уравнений (14) в виде простой волны: если положить, например, $s_1 = V = \text{const}$, то второе уравнение превращается в $s_{2,t} + Vs_{2,x} = 0$ с общим решением $s_2 = F(x - Vt)$, что совпадает с (22), если записать функцию $F(\xi)$ в виде $F(\xi) = V + 2/\rho(\xi)$. В частности, функция $F(\xi)$ может включать в себя разрыв, распространяющийся без изменения формы в области перекрытия двух газов.

Связь между уравнениями для газа Чаплыгина и кинетическим уравнением, описывающим динамику двух взаимодействующих солитонных облаков, позволяет строить поучительные примеры решений кинетического уравнения.

4. СТОЛКНОВЕНИЕ ДВУХ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ

Уравнения (14) имеют очевидное вырожденное решение, в котором s_1 и s_2 являются постоянными, не зависящими ни от x , ни от t . Несмотря на тривиальность этого решения, оно имеет ясное физическое содержание: оно может служить «плато», соединяющим два указанных выше решения в виде простых волн. В частности, при столкновении двух проникающих друг в друга газов с постоянными плотностями f_1, f_2 и, значит, значениями римановых инвариантов s_1, s_2 , образуется область двухпоточкового течения, в которой скорости солитонов одного сорта перенормируются вследствие их взаимодействия с солитонами другого сорта. Таким образом, задача о столкновении двух газов заключается в нахождении плотностей и скоростей солитонов в области их «перемешивания», а также скоростей краев этой области. Хотя эта задача уже обсуждалась в работах [7, 18], мы кратко остановимся на ней, так как соответствующие результаты будут использованы в дальнейшем. Предположим, что в начальный момент времени в распределениях плотностей двух сортов солитонов имеется разрыв:

$$\begin{aligned} f_2(x, 0) = f_{20}, \quad f_1(x, 0) = 0, \quad x < 0, \\ f_2(x, 0) = 0, \quad f_1(x, 0) = f_{10}, \quad x > 0, \end{aligned} \tag{23}$$

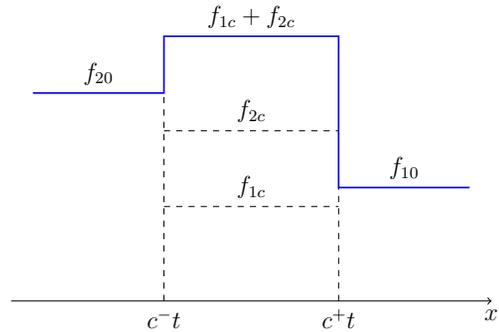


Рис. 1. Зависимость плотностей солитонных газов от координаты при их взаимопроникновении после столкновения солитонных облаков с постоянными начальными плотностями и скоростями.

причем мы считаем, что $\kappa_2 > \kappa_1$, так что более быстрое облако солитонов с плотностью f_{20} в момент времени $t = 0$ настигает в точке $x = 0$ более медленное облако с плотностью f_{10} и начинается процесс их взаимопроникновения. Как обычно в случае начального разрыва, решение должно зависеть только от автомодельной переменной $\zeta = x/t$. Поэтому начальный разрыв ведет к образованию плато между двумя простыми волнами, каждая из которых представляет собой разрыв с постоянным значением одного из римановых инвариантов — существование таких решений обусловлено указанными выше свойствами газа Чаплыгина. В целом же решение представляет собой последовательность трех течений с постоянными плотностями, которые разделяются разрывами:

$$f(x, t) = \begin{cases} f_{20}, & x < c^-t, \\ f_{1c} + f_{2c}, & c^-t < x < c^+t, \\ f_{10}, & x > c^+t. \end{cases} \tag{24}$$

Из рис. 1 ясно, что передний край плато движется с перенормированной скоростью s_{2c} быстрого газа, а задний край плато — с перенормированной скоростью s_{1c} медленного газа, так как на этих краях плотности соответствующих газов обращаются скачком в нуль:

$$c^- = s_{1c}, \quad c^+ = s_{2c}. \tag{25}$$

В двухпоточковой области плато $c^-t < x < c^+t$ скорости солитонов перенормированы их взаимодействии

ем и согласно (12) мы имеем

$$\begin{aligned} s_{1c} &= \frac{\kappa_1^2(1 - \alpha_2 f_{1c}) - \kappa_2^2 \alpha_1 f_{2c}}{1 - \alpha_1 f_{2c} - \alpha_2 f_{1c}}, \\ s_{2c} &= \frac{\kappa_2^2(1 - \alpha_1 f_{2c}) - \kappa_1^2 \alpha_2 f_{1c}}{1 - \alpha_1 f_{2c} - \alpha_2 f_{1c}}. \end{aligned} \quad (26)$$

Медленный газ втекает через правый разрыв в область плато и приравнивание выражений для его потока по разные стороны от разрыва в системе отсчета, где он покоится, дает $f_{1c}(s_{1c} - c^+) = f_{10}(\kappa_1^2 - c^+)$. Через левый разрыв в область плато втекает быстрый газ и аналогичный подсчет дает $f_{20}(\kappa_2^2 - c^-) = f_{2c}(s_{2c} - c^-)$. С учетом (25) и (26) полученные равенства приводят к уравнениям

$$\begin{aligned} f_{1c} &= f_{10} \frac{s_{2c} - \kappa_1^2}{s_{2c} - s_{1c}} = f_{10}(1 - \alpha_1 f_{2c}), \\ f_{2c} &= f_{20} \frac{\kappa_2^2 - s_{1c}}{s_{2c} - s_{1c}} = f_{20}(1 - \alpha_2 f_{1c}), \end{aligned} \quad (27)$$

откуда находим выражения

$$\begin{aligned} f_{1c} &= \frac{f_{10}(1 - \alpha_1 f_{20})}{1 - \alpha_1 \alpha_2 f_{10} f_{20}}, \\ f_{2c} &= \frac{f_{20}(1 - \alpha_2 f_{10})}{1 - \alpha_1 \alpha_2 f_{10} f_{20}} \end{aligned} \quad (28)$$

для плотностей солитонных газов в двухпотоковой области плато. Ясно, что полученные формулы имеют смысл лишь при выполнении неравенства

$$\alpha_1 f_{1c} + \alpha_2 f_{2c} < 1, \quad (29)$$

когда перенормированные скорости (26) положительны, т.е. плотности солитонных газов не могут быть слишком большими. Фактически еще более сильные ограничения на плотность солитонов налагает условие, что вариация флуктуирующего волнового поля $\overline{u^2} - \bar{u}^2$ в солитонном газе должна быть положительной (см. [19]). Полученные соотношения хорошо согласуются с результатами численного решения уравнения КдФ с начальными данными в виде большого числа солитонов двух разных типов, находящихся по разные стороны от начала координат (см. [18]).

5. ТЕЧЕНИЕ ДВУХ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ В ВИДЕ ПРОСТОЙ ВОЛНЫ

Формулы (22) дают более общую форму решения для течения двух солитонных газов в виде простой

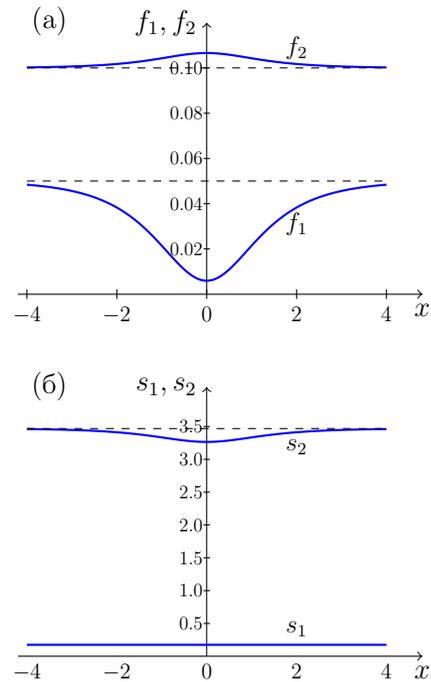


Рис. 2. Распределения плотностей солитонных газов (а) и их перенормированных скоростей (б) в зависимости от координаты для профиля волны, задаваемого формулой (36). Параметры солитонных газов равны $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 1.8$, $f_{10} = 0.05$, $f_{20} = 0.1$. Скорость волны, совпадающая со скоростью течения медленных солитонов, равна $V = s_1 = 0.174$, а скорость течения газа быстрых солитонов на бесконечности равна $s_{20} = 3.469$, что больше, чем перенормированная скорость $\kappa_2^2 = 3.24$.

волны. Пусть плотности солитонных газов на бесконечности стремятся к постоянным значениям:

$$f_1 \rightarrow f_{10}, \quad f_2 \rightarrow f_{20} \quad \text{при} \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (30)$$

Тогда постоянное значение риманова инварианта s_1 равно скорости волны солитонного газа (см. (26))

$$V = s_1 = \frac{\kappa_1^2(1 - \alpha_2 f_{10}) - \kappa_2^2 \alpha_1 f_{20}}{1 - \alpha_1 f_{20} - \alpha_2 f_{10}}, \quad (31)$$

совпадающей с перенормированной скоростью медленного газа, а формулы (13) дают выражения для плотностей солитонных газов:

$$\begin{aligned} f_1(\xi) &= \frac{1}{\alpha_2} \left[1 + \frac{1}{2}(V - \kappa_2^2)\rho(\xi) \right], \\ f_2(\xi) &= \frac{1}{2\alpha_1} (\kappa_1^2 - V)\rho(\xi). \end{aligned} \quad (32)$$

Легко видеть, что они связаны соотношением

$$1 - \alpha_1 f_2 - \alpha_2 f_1 = \frac{1}{2}(\kappa_2^2 - \kappa_1^2)\rho, \quad (33)$$

из которого следует, в частности, формула

$$\rho_0 = \frac{2(1 - \alpha_1 f_{20} - \alpha_2 f_{10})}{\kappa_2^2 - \kappa_1^2}. \quad (34)$$

Распределения плотности (32) содержат произвольную функцию $\rho(\xi)$ и через нее же выражается распределение перенормированной скорости быстрого солитонного газа согласно второй формуле (22). На бесконечности s_2 стремится к значению (см. (26))

$$s_{20} = \frac{\kappa_2^2(1 - \alpha_1 f_{20}) - \kappa_1^2 \alpha_2 f_{10}}{1 - \alpha_1 f_{20} - \alpha_2 f_{10}}. \quad (35)$$

Полученное решение имеет физический смысл при таких значениях параметров $\kappa_1, \kappa_2, f_{10}, f_{20}$, что и распределения плотностей f_1, f_2 солитонных газов, и их перенормированные скорости s_1, s_2 повсюду положительны.

Найденное нами течение двух солитонных газов проиллюстрировано на рис. 2 для функции $\rho(\xi)$, равной

$$\rho(\xi) = \rho_0 + \frac{a}{\text{ch } \xi}. \quad (36)$$

В этом случае профиль плотности f_1 медленного газа движется вместе с этой компонентой со скоростью $V = s_1$. Быстрый же газ течет сквозь медленный с локальной скоростью s_2 , которая уменьшается в области «ямы» в распределении f_1 , вследствие чего плотность f_2 в этой области увеличивается.

6. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ТЕЧЕНИЯ ДВУХ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ

Известный из газовой динамики метод годографа (см., например, [16]) позволяет легко получить общее решение уравнений (14), когда обе скорости s_1 и s_2 изменяются в пространстве и со временем. Делая стандартное преобразование годографа $t = t(s_1, s_2)$, $x = x(s_1, s_2)$, мы приводим эти уравнения к виду

$$\frac{\partial x}{\partial s_1} - s_1 \frac{\partial t}{\partial s_1} = 0, \quad \frac{\partial x}{\partial s_2} - s_2 \frac{\partial t}{\partial s_2} = 0. \quad (37)$$

Исключение x дает

$$\frac{\partial^2 t}{\partial s_1 \partial s_2} = \frac{1}{s_1} \frac{\partial^2 x}{\partial s_1 \partial s_2} = \frac{1}{s_1} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(s_2 \frac{\partial t}{\partial s_2} \right) = \frac{s_2}{s_1} \frac{\partial^2 t}{\partial s_1 \partial s_2}.$$

Поскольку $s_1 \neq s_2$, приходим к уравнению

$$\frac{\partial^2 t}{\partial s_1 \partial s_2} = 0, \quad (38)$$

общее решение которого запишем через две произвольные функции, которые удобно обозначить как $F''(s_1)$ и $G''(s_2)$, в виде

$$t(s_1, s_2) = F''(s_1) + G''(s_2). \quad (39)$$

Из уравнений (37) легко находим

$$x(s_1, s_2) = s_1 F''(s_1) + s_2 G''(s_2) - F'(s_1) - G'(s_2). \quad (40)$$

Это решение можно преобразовать к форме

$$\begin{aligned} x - s_1 t &= (s_2 - s_1)G''(s_2) - F'(s_1) - G'(s_2), \\ x - s_2 t &= -(s_2 - s_1)F''(s_1) - F'(s_1) - G'(s_2), \end{aligned} \quad (41)$$

в которой оно было получено другим способом в работе [20].

Приведем для полноты другие представления общего решения, которые могут оказаться более удобными при решении конкретных задач. Если обратиться к методу годографа в форме Царева [21], то общее решение можно записать в форме

$$x - s_2 t = \frac{\partial W}{\partial s_1}, \quad x - s_1 t = \frac{\partial W}{\partial s_2}, \quad (42)$$

где функция $W = W(s_1, s_2)$ должна удовлетворять уравнению Эйлера–Пуассона:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial s_1 \partial s_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left(\frac{\partial W}{\partial s_1} - \frac{\partial W}{\partial s_2} \right) = 0. \quad (43)$$

Легко убедиться, что решения уравнения (43) выражаются через две произвольные функции $F(s_1)$ и $G(s_2)$ следующим образом:

$$W(s_1, s_2) = (s_1 - s_2)[F'(s_1) - G'(s_2)] - 2[F(s_1) + G(s_2)]. \quad (44)$$

Подстановка (44) в (42) дает решение в форме (41). Функции $F(s_1)$ и $G(s_2)$ должны находиться из начальных условий задачи.

Как было показано Риманом (см., например, [22]), вместо использования этого общего решения, выраженного через произвольные функции, часто бывает удобно использовать метод, выражающий решение задачи непосредственно через начальные условия с помощью так называемой функции Римана. В нашем случае функция Римана может быть получена из общей формулы для динамики политропного газа при показателе адиабаты $\gamma = -1$. Входящая в это выражение гипергеометрическая функ-

ция сводится к $F(-1, 2; 1; z) = 1 - 2z$ и функция Римана для уравнений (14) принимает особенно простой вид:

$$R(r_1, r_2; s_1, s_2) = \frac{(r_1 + r_2)(s_1 + s_2) - 2(r_1 r_2 - s_1 s_2)}{(r_1 - r_2)^2}, \tag{45}$$

где (r_1, r_2) — текущие координаты на плоскости годографа, а (s_1, s_2) — координаты точки P , в которой ищется значение функции $W = W(P) = W(s_1, s_2)$. Мы не будем приводить здесь весьма громоздкие общие формулы, которые мало что добавляют к пониманию динамики взаимодействующих солитонных газов, а обратимся вместо этого к решению одной из типичных задач газовой динамики — задаче о расширении слоя газа. Решение может быть легко получено в элементарной форме и его отличие от решений этой же задачи для других физических систем хорошо демонстрирует существенное различие между обычной газовой динамикой и динамикой солитонных газов.

7. РАСШИРЕНИЕ СЛОЯ ИЗ СМЕСИ ДВУХ СОЛИТОННЫХ ГАЗОВ

Одной из типичных задач, в которой возникает область общего решения, является задача о расширении газового слоя. Она была рассмотрена в [23] для классического одноатомного газа, в [24] для бозе-эйнштейновского конденсата, в [25] для двухтемпературной плазмы и в [26–28] для ультрарелятивистского газа. Во всех этих случаях от краев слоя вглубь него распространялись волны разрежения и после их столкновения в центре образовывалась область общего решения, граничащая по краям с волнами разрежения. Однако в случае солитонного газа решения в виде волн разрежения отсутствуют, а вместо них возникают разрывные решения, между которыми образуется плато с постоянными значениями римановых инвариантов. Построенное таким способом решение позволяет сделать некоторые заключения общего характера об эволюции перекрывающихся облаков солитонных газов.

Если допустить, что в начальный момент времени единственный солитонный газ с параметром κ_1 имеет распределение плотности в виде столика со значением f_{10} при $-l/2 \leq x \leq l/2$, то его движение в последующие моменты времени очевидно: это распределение будет переноситься вдоль оси x со скоростью κ_1^2 без изменения формы. Однако если в начальный момент времени в области $-l/2 \leq x \leq l/2$

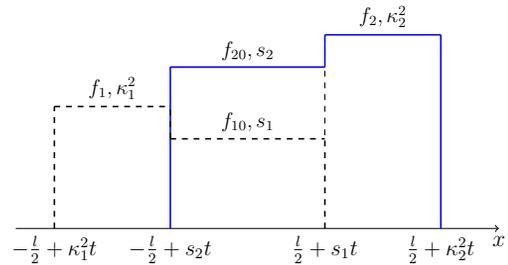


Рис. 3. Зависимость плотностей облаков двух солитонных газов от координаты при эволюции начального слоя из двух таких газов до момента их разделения. Жирной штриховой линией изображен график плотности медленного газа, а сплошной линией — график плотности быстрого газа.

имеется смесь двух солитонных газов с параметрами κ_1, κ_2 ($\kappa_1 < \kappa_2$) и плотностями f_{10} и f_{20} , то эволюция этих газов будет более сложной: в процессе разделения этих газов на два облака, движущихся со скоростями κ_1^2 и κ_2^2 , возникнет двухпотоковое плато. Нашей целью является описание процесса пространственного разделения солитонных облаков, а также определение их параметров после разделения.

Ясно, что в возникшем в процессе разделения плато газы будут двигаться с перенормированными скоростями s_1, s_2 , сохраняя начальные плотности f_{10}, f_{20} . Впереди этого слоя из смеси газов возникнет слой быстрого газа с плотностью f_2 , а позади — слой медленного газа с плотностью f_1 . Левый край области перекрытия движется со скоростью s_2 , а ее правый край — со скоростью s_1 . Следовательно, область перекрытия существует в течение времени

$$T = \frac{l}{s_2 - s_1} \tag{46}$$

и при $t > T$ газы разделяются. Из рис. 3 легко увидеть, что длины облаков медленного и быстрого газов в момент разделения соответственно равны

$$\begin{aligned} l_1 &= l \frac{s_2 - \kappa_1^2}{s_2 - s_1}, \\ l_2 &= l \frac{\kappa_2^2 - s_1}{s_2 - s_1}, \end{aligned} \tag{47}$$

причем обе они меньше первоначальной длины l , так как $s_1 < \kappa_1^2$ и $s_2 > \kappa_2^2$. Из сохранения числа солитонов в каждой компоненте находим амплитуды:

$$\begin{aligned} f_1 &= f_{10} \frac{s_2 - s_1}{s_2 - \kappa_1^2}, \\ f_2 &= f_{20} \frac{s_2 - s_1}{\kappa_2^2 - s_2}. \end{aligned} \tag{48}$$

В момент разделения облаков центры тяжести облака медленных солитонов и облака быстрых солитонов находятся соответственно в точках

$$\begin{aligned} x_1(T) &= \frac{l}{2} \frac{s_1 + \kappa_1^2}{s_2 - s_1}, \\ x_2(T) &= \frac{l}{2} \frac{s_2 + \kappa_2^2}{s_2 - s_1}. \end{aligned} \tag{49}$$

Если бы солитоны не взаимодействовали друг с другом, то эти облака двигались бы с неперенормированными скоростями и находились бы в этот момент в точках

$$\begin{aligned} x_{10}(T) &= \frac{\kappa_1^2 l}{s_2 - s_1}, \\ x_{20}(T) &= \frac{\kappa_2^2 l}{s_2 - s_1}, \end{aligned}$$

т.е. из-за взаимодействия они сдвигаются соответственно на расстояния

$$\begin{aligned} \Delta x_1 &= x_1(T) - x_{10}(T) = \frac{l}{2} \frac{s_1 - \kappa_1^2}{s_2 - s_1} < 0, \\ \Delta x_2 &= x_2(T) - x_{20}(T) = \frac{l}{2} \frac{s_2 - \kappa_2^2}{s_2 - s_1} > 0. \end{aligned} \tag{50}$$

Таким образом, вследствие взаимодействия облака сужаются, плотности солитонов в обоих увеличиваются и медленное облако сдвигается назад, а быстрое — вперед. Переход к этим значениям сдвигов иллюстрируется на рис. 4, полученном согласно численному решению уравнений для газа Чаплыгина. В начальный момент времени центры тяжести обоих газов находились в начале координат и по мере разделения облаков центр тяжести быстрого газа опережал движение, которое он совершал бы со своей неперенормированной скоростью, а центр тяжести медленного газа отставал от аналогичного движения со своей неперенормированной скоростью. После момента разделения центры тяжести обоих газов продолжают движение со своими неперенормированными скоростями, приобретая дополнительные сдвиги вследствие взаимодействия с солитонами другого сорта. Хорошее согласие предсказываемых теорией значений сдвигов (50) с численным решением показывает, что наша картина формирования из начальных разрывов простых волн с разрывами соответствует реальной динамике взаимодействующих солитонных облаков согласно кинетическому уравнению.

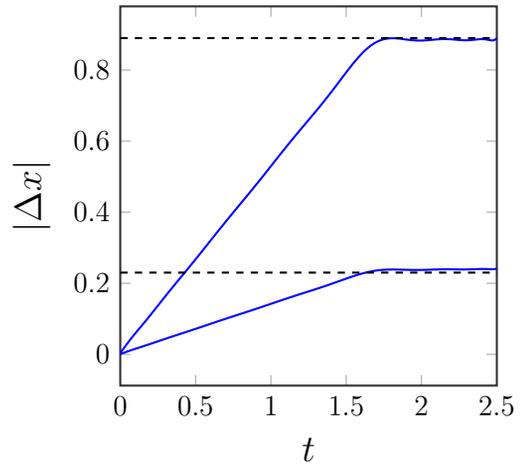


Рис. 4. Сдвиги центров тяжести облаков от их положений в отсутствие взаимодействия, полученные численным решением уравнений для газа Чаплыгина при начальных значениях параметров $f_{10} = 0.05$, $f_{20} = 0.1$, $\kappa_1 = 1.3$, $\kappa_2 = 2.5$, $l = 10$. В момент $T = 1.6$ разделения они принимают теоретические значения, даваемые формулами (50).

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе показано, что фундаментальным свойством динамики двух взаимодействующих солитонных газов является существование простых волн, распространяющихся без изменения формы. В частности, такие простые волны могут иметь разрывы, так что в задачах типа «разрушения плотины» вместо волн разрежения динамики обычных газов возникают простые волны с разрывами, соединяемые вместо общего решения, в котором в обычной теории изменяются оба римановых инварианта, областью плато с постоянными римановыми инвариантами. Это свойство динамики солитонных газов резко контрастирует со свойствами газовой динамики обычных газов. В то же время на основе указанной картины могут быть построены простые аналитические решения типичных задач, подтвержденные точными численными решениями кинетического уравнения, приведенного к эквивалентной форме уравнений для динамики газа Чаплыгина. Из построенных решений следует интуитивно понятная картина поведения облаков солитонных газов: в результате взаимодействия облако быстрых солитонов сдвигается вперед, а облако медленных солитонов сдвигается назад, причем оба облака сужаются, а плотность солитонов в них возрастает. Полученные формулы позволяют дать оценку этих эффектов в ведущихся в настоящее время экспериментальных

исследованиях солитонных газов в волнах на воде, нелинейной оптике и физике холодных атомов (см., например, [12–14]).

Благодарности. Выражаем благодарность Г. А. Элю за полезное обсуждение.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-01-00063).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. J. Zabusky and M. D. Kruskal, Phys. Rev. Lett. **15**, 240 (1965).
2. P. D. Lax, Comm. Pure Appl. Math. **21**, 467 (1968).
3. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов. Метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
4. А. Ньюэлл, *Солитоны в математике и физике*, Мир, Москва (1989).
5. В. Е. Захаров, ЖЭТФ **60**, 993 (1971).
6. G. A. El, Phys. Lett. A, **311**, 374 (2003).
7. G. A. El and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. Lett., **95**, 204101 (2005).
8. G. A. El, A. M. Kamchatnov, M. V. Pavlov, and S. A. Zykov, J. Nonlinear Sci., **21**, 151 (2011).
9. E. V. Ferapontov and M. V. Pavlov, J. Nonlinear Sci., **32**, 26 (2022).
10. B. Doyon, Lecture notes on Generalised Hydrodynamics, SciPost Phys. Lect. Notes **18** (2020).
11. G. A. El, J. Stat. Mech. **2021** 114001 (2021).
12. I. Redor, E. Barthélemy, H. Michallet, M. Onorato, and N. Mordant, Phys. Rev. Lett. **122**, 214502 (2019).
13. P. Suret, A. Tikan, F. Bonnefoy, F. Copie, G. Ducrozet, A. Gelash, G. Prabhudesai, G. Michel, A. Cazaubiel, E. Falcon, G. El, and S. Randoux, Phys. Rev. Lett. **125**, 264101 (2020).
14. I. Bouchoule and J. Dubail, J. Stat. Mech. **2022**, 014003 (2022).
15. S. C. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, Phys. Rev. Lett. **19**, 1095 (1967).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
17. С. А. Чаплыгин, *О газовых струях*, Унив. тип., Москва (1902); С. А. Чаплыгин, *Собрание сочинений*, т. II, ОГИЗ-ГИТТЛ, Москва (1948), с. 19–137.
18. F. Carbone, D. Dutykh, and G. A. El, Europhys. Lett. **113**, 30003 (2016).
19. G. A. El, Chaos **26**, 023105 (2016).
20. М. В. Павлов, ТМФ **73**, 316 (1987).
21. С. П. Царев, Изв. АН СССР, сер. матем. **54**, 1048 (1990).
22. А. Зоммерфельд, *Дифференциальные уравнения в частных производных физики*, Изд-во иностр. лит., Москва (1950).
23. В. Г. Носов, А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **70**, 768 (1976).
24. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. A **99**, 013609 (2019).
25. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, Phys. Fluids **32**, 126115 (2020).
26. Л. Д. Ландау, Изв. АН СССР, сер. физ. **17**, 51 (1953).
27. И. М. Халатников, ЖЭТФ, **27**, 529 (1954).
28. А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **156**, 689 (2019).

Главный редактор *А. И. СМИРНОВ*

Редколлегия:

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

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова