

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Продолжение физической части

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

Выходит 12 раз в год

Том 162

ИЮЛЬ

ВЫПУСК 1 (7)

2022МОСКВА

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР А. И. СМИРНОВ

ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

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

Редколлегия: член-корр. РАН А. И. СМИРНОВ,

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. ЧЕРЕПАЦУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Москва

ООО «Тематическая редакция»

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Временная зависимость резонансных фотопроцессов, индуцированных электромагнитными импульсами различной длительности	Астапенко В. А.	5
Определение дисперсионных характеристик интегральных оптических микрорезонаторов и генерация в них когерентных оптических частотных гребенок	Дмитриев Н. Ю., Волошин А. С., Кондратьев Н. М., Лобанов В. Е., Миньков К. Н., Шитиков А. Е., Данилин А. Н., Лоншаков Е. А., Биленко И. А.	14
Неупругое расщепление рентгеновского фотона атомным ионом	Хоперский А. Н., Надолинский А. М., Конеев Р. В.	27
Численное моделирование выхода ядерных реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$, инициируемых мощным пикосекундным лазерным излучением	Андреев С. Н., Беляев В. С., Матафонов А. П., Тараканов В. П., Загреев Б. В., Крайнов В. П., Муханов С. А., Лобанов А. В.	34
Тензор энергии-импульса Минковского в нелинейной оптике сред с нелокальностью оптического отклика	Рыжиков П. С., Макаров В. А.	45
Роль протяженного филаментационного фокуса при абляции поверхности кремния в водной среде ультракороткими лазерными импульсами	Смирнов Н. А., Кудряшов С. И., Ионин А. А.	55
Радиационно-столкновительное вовлечение молекул в резонанс с лазерным ИК-полем в двухкомпонентной молекулярной среде	Лаптев В. Б., Макаров Г. Н., Петин А. Н., Рябов Е. А.	60
Ионизация атомов бихроматическим полем кратных $\omega + 2\omega$ частот произвольной поляризации ...	Попова М. М., Грызлова Е. В., Киселев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н.	72

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

О теореме декомпозиции для глюонов	Аникин И. В., Жевлаков А. С.	87
Геодезические в гравитационном поле кротовой норы	Сажин М. В., Сажина О. С., Шацкий А. А.	96
Тени черных дыр как источник ограничений на расширенные теории гравитации	Прокопов В. А., Алексеев С. О., Зенин О. И.	108

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Комплексы с переносом заряда линейных и лестничных сопряженных полимеров как перспективные органические узкозонные полупроводники	Сосоров А. Ю.	118
Аномальный эффект Холла в квантовых ямах GaAs-AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи перехода металл-изолятор	Агринская Н. В., Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В.	127

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

Подавление вынужденного рассеяния Манделштама – Бриллюэна в лазерной плазме при многочастотном режиме облучения мишени	Демченко Н. Н., Ивановских Р. Д.	133
Неустойчивость солитонов и коллапс звуковых волн в средах с положительной дисперсией	Кузнецов Е. А.	143

ВРЕМЕННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ РЕЗОНАНСНЫХ ФОТОПРОЦЕССОВ, ИНДУЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ РАЗЛИЧНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

*В. А. Астапенко**

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

Поступила в редакцию 14 декабря 2021 г.,
после переработки 21 декабря 2021 г.
Принята к публикации 21 декабря 2021 г.

В рамках теории возмущений исследуется временная зависимость (от длительности импульса и текущего времени) резонансных фотопроцессов, индуцированных электромагнитными импульсами различной длительности, включая ультракороткие и квазимонохроматические. Рассмотрены импульсы с гауссовской и экспоненциальной огибающими, а также лоренцевский и гауссовский спектральные профили сечения фотопроцесса. Получены простые аналитические выражения для вероятности в пределе больших времен. Временная зависимость при заданной длительности импульса исследована аналитически в монохроматическом и ультракоротких пределах и численно для промежуточных значений параметров. Установлены специфические черты временной динамики, общие для резонансных фотопроцессов и зависящие от формы импульса и спектрального профиля сечения.

DOI: 10.31857/S004445102207001X
EDN: DRLUJU

1. ВВЕДЕНИЕ

Современное развитие технологии генерации электромагнитных импульсов (ЭМИ) различной длительности, включая ультракороткие [1–5], и спектроскопии высокого временного разрешения [6–9] требуют развития адекватных, эффективных и надежных способов описания временной зависимости фотопроцессов в поле таких импульсов.

Экспериментально временная зависимость фотоионизации атомов ультракороткими ЭМИ в настоящее время исследуется методами аттосекундной хроноскопии [10]. В их основе лежит аттосекундный стрикинг [11, 12]. Это метод накачки–зондирования, в котором аттосекундный XUV-импульс служит накачкой, создающей электронный волновой пакет, в то время как малоцикловой ИК-импульс его зондирует при различных временных задержках между импульсами. Таким образом, в частности, была

измерена временная задержка при фотоионизации 2s- и 2p-уровней атома неона, которая составила 21 ас [13].

Аттосекундная хроноскопия применяется также для изучения временной динамики фотоионизации твердых тел, фуллеренов и наноструктур [14], рассеяния электронов в диэлектрических наночастицах [15], аттосекундной динамики в жидкости [16] и ряда других фотоиндуцированных процессов. Существующие методы описания этих явлений реализованы, как правило, для конкретных процессов и мишеней, а также для заданных параметров ЭМИ. Можно отметить численные расчеты отклика мишени на электромагнитное воздействие, опирающиеся, например, на прямое интегрирование временного уравнения Шредингера [17, 18], и аналитическое рассмотрение, широко представленное работами по резонансу Фано [19–24].

Здесь уместно выделить взаимодействие ЭМИ с квантовым осциллятором, поскольку в этом случае имеется аналитическое решение для любых параметров внешнего воздействия [25, 26]. Временная динамика возбуждения квантового осциллятора в поле ЭМИ детально исследовалась в работе [27]. Отме-

* E-mail: astval@mail.ru

тим также, что в статье [28] этот вопрос рассматривался в приближении внезапных возмущений для униполярных ультракоротких импульсов. В работе [29] временная зависимость среднего числа квантов квантового осциллятора, возбужденного chirpированными гауссовскими импульсами, рассчитывалась с помощью решения уравнения Гейзенберга для операторов рождения и уничтожения.

При экстенсивных численных расчетах, требующих больших вычислительных ресурсов и времени, затруднена физическая интерпретация полученных результатов и выявление характерных особенностей исследуемого процесса. Поэтому представляется полезным аналитическое рассмотрение, применимое для широкого круга задач, которое позволяет выявить общие закономерности и специфические черты фотопроцессов, обусловленных конечной длительностью и формой огибающей ЭМИ.

Так, в статье [30] приведены формулы, описывающие вероятность фотоионизации атома под действием мало- и субцикловых ЭМИ различной формы, которые получены в рамках адиабатического подхода, использованного ранее в классической работе [31] для расчета ионизации атома в поле интенсивной электромагнитной волны. В цитированной статье, в частности, отмечается важность аналитических решений, которые могут оказаться полезными для представления общей картины процесса.

Взаимодействие ультракоротких импульсов с квантовыми объектами рассматривалось в [32] в приближении внезапных возмущений. В этой статье было получено выражение для амплитуды перехода через «электрическую площадь импульса», которое может использоваться для различных квантовых систем в случае предельно коротких импульсов с длительностями, меньшими обратных собственных частот системы. В том же приближении в работе [33] вероятность возбуждения квантового перехода под действием субциклового униполярного импульса с различными огибающими исследовалась как функция длительности импульса и текущего времени.

Простой способ расчета вероятности фотопроцессов в рамках теории возмущений, предложенный в статье [34] и дополненный в [35], позволяет разделить задачу на две части. Первая часть относится к внутренней динамике электронов мишени, которая описывается сечением, а вторая зависит только от напряженности электрического поля в импульсе. Существенно, что для сечения можно использовать как теоретические, так и экспериментальные дан-

ные, что важно в случае сложных систем, для которых точный расчет сечения представляет собой значительную проблему. Таким образом, данный метод является «гибридным» и применимым для широкого круга радиационных процессов с участием разных мишеней от атомов до наночастиц [36–41].

В настоящей статье подход, предложенный в работах [34, 35], используется для универсального описания резонансных фотопроцессов, индуцированных ЭМИ произвольной длительности с различными огибающими, с целью выявления общих закономерностей и специфических черт их временной зависимости.

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Рассмотрим возбуждение квантовой системы (мишени) под действием ЭМИ в рамках применимости теории возмущений и дипольного приближения. Вероятность данного процесса как функция времени в первом порядке теории возмущений после усреднения по начальному состоянию мишени дается следующим выражением:

$$W(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \times \int_{-\infty}^t dt'' \langle \hat{d}(t') \hat{d}(t'') \rangle E(t') E(t''). \quad (1)$$

Здесь $\hat{d}(t)$ — зависящий от времени оператор дипольного момента системы, угловые скобки означают усреднение по начальному состоянию, $E(t)$ — напряженность электрического поля в ЭМИ. Предполагаем в дальнейшем, что $E(t \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$.

В статье [35] было показано, что равенство (1) можно преобразовать к виду

$$W(t, \tau) = \frac{c}{4\pi^2} \int_0^\infty d\omega \frac{\sigma(\omega)}{\hbar\omega} D(t, \tau, \omega). \quad (2)$$

Здесь $\sigma(\omega)$ — сечение фотовозбуждения мишени, c — скорость света,

$$D(t, \tau, \omega) = \left| \int_{-\infty}^t dt' \exp(i\omega t') E(t', \tau) \right|^2 \quad (3)$$

— квадрат модуля неполного фурье-образа напряженности электрического поля в ЭМИ (D -функция), τ — длительность импульса.

Рассмотрим далее два типа импульсов: с гауссовской огибающей

$$E_G(t, \tau) = E_0 \exp(-t^2/2\tau^2) \cos(\omega_c t) \quad (4)$$

и экспоненциальный импульс

$$E_{EP}(t, \tau) = \theta(t) E_0 \exp(-t/\tau) \cos(\omega_c t). \quad (5)$$

Здесь E_0 и ω_c — амплитуда и несущая частота ЭМИ, $\theta(t)$ — ступенчатая функция Хевисайда.

Далее предполагаем, что ЭМИ являются мультицикловыми, так что выполняется неравенство $\omega_c \tau \gg 1$ и можно пренебречь наличием постоянной составляющей поля в импульсах.

В приближении вращающейся волны для D -функции импульсов (4) и (5) имеем

$$D_G(t, \tau, \omega) \cong \frac{\pi}{8} E_0^2 \tau^2 \exp(-(\omega - \omega_c)^2 \tau^2) \times \left| \operatorname{erfc} \left(-\frac{t/\tau + i |\omega - \omega_c| \tau}{\sqrt{2}} \right) \right|^2, \quad (6)$$

$$D_{EP}(t, \tau, \omega) \cong \frac{1}{4} \theta(t) E_0^2 \tau^2 \times \frac{1 + \exp(-2t/\tau) - 2 \exp(-t/\tau) \cos[(\omega - \omega_c)t]}{1 + \tau^2(\omega - \omega_c)^2}, \quad (7)$$

где $\operatorname{erfc}(z)$ — дополнительная функция ошибок.

3. ВЕРОЯТНОСТЬ ФОТОПРОЦЕССА ЗА ВСЕ ВРЕМЯ ДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА

При больших временах, $t \gg \tau$, когда ЭМИ уже практически закончился, формула (2) принимает вид [34]

$$W(\tau) = \frac{c}{4\pi^2} \int_0^\infty d\omega \frac{\sigma(\omega)}{\hbar\omega} |E(\omega, \tau)|^2, \quad (8)$$

где $E(\omega, \tau)$ — фурье-образ напряженности электрического поля. Очевидно, что в рассматриваемом случае введенные выше D -функции равны квадрату модуля фурье-образа напряженности поля.

Как было показано в статье [34] в рамках феноменологического подхода, выражение (8) обобщается на произвольный фотопроцесс, который в монокроматическом пределе ($\tau \rightarrow \infty$) описывается сечением $\sigma(\omega)$ по стандартной формуле:

$$w = \sigma(\omega) \frac{I_0}{\hbar\omega},$$

где w — вероятность в единицу времени, $I_0 = cE_0^2/8\pi$.

Отметим, что выражение, аналогичное (8), для спектрально-угловой вероятности рассеяния ЭМИ на атоме вне рамок дипольного приближения можно получить и с помощью квантовомеханического рассмотрения [42].

Формулу (8) полезно представить в виде [43]

$$W(\tau) = \int_0^\infty \sigma(\omega) \frac{J_{phot}(\omega, \tau)}{\hbar\omega} d\omega, \quad (8a)$$

где

$$J_{phot}(\omega, \tau) = \frac{c}{4\pi^2} |E(\omega, \tau)|^2 \quad (9)$$

— энергия излучения на частоте ω , прошедшая за все время действия импульса через единичную площадь. Выражение (8a) обнаруживает связь рассматриваемого подхода с методом эквивалентных фотонов Ферми [44].

Предположим, что сечение фотопроцесса представимо в виде

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \sigma_{tot} G(\omega), \\ \sigma_{tot} &= \int \sigma(\omega) d\omega, \\ \int G(\omega) d\omega &= 1, \end{aligned} \quad (10)$$

где $G(\omega)$ — спектральный профиль сечения. Далее полагаем, что профиль имеет максимум на собственной частоте ω_0 и спектральную ширину γ , причем $\omega_0 \gg \gamma$. Тогда равенство (8) можно переписать приближенно как

$$W(\tau) \cong \frac{c\sigma_{tot}}{4\pi^2 \hbar\omega_0} \int_0^\infty d\omega G(\omega) |E(\omega, \tau)|^2. \quad (11)$$

Введем безразмерную функцию F от безразмерных длительности импульса y и отстройки несущей частоты от собственной ρ :

$$F(y, \rho) = \frac{\gamma^2}{E_0^2} \int_0^\infty d\omega G(\omega) |E(\omega, \tau = y/\gamma)|^2, \quad (12)$$

$$y = \gamma\tau, \quad \rho = (\omega_0 - \omega_c)/\gamma. \quad (13)$$

Данная функция описывает зависимость вероятности фотопроцесса от длительности импульса в пределе больших времен, когда импульс практически закончился, для разных частотных отстроек. Ее можно получить в аналитическом виде для гауссовского и экспоненциального импульсов и гауссовского и

лоренцевского спектральных профилей. После интегрирования по частоте в формуле (12) находим следующие выражения для F -функции в различных случаях:

а) гауссовский профиль и гауссовский импульс:

$$F_{G,GP}(y, \rho) = \frac{y^2}{\sqrt{1+y^2}} \exp\left(-\frac{\rho^2 y^2}{1+y^2}\right), \quad (14)$$

б) лоренцевский профиль и гауссовский импульс:

$$F_{L,GP}(y, \rho) = y^2 \operatorname{Re}\{w[y(i+\rho)]\}, \quad (15)$$

в) гауссовский профиль и экспоненциальный импульс:

$$F_{G,EP}(y, \rho) = y \operatorname{Re}\left[w\left(\rho + \frac{i}{y}\right)\right], \quad (16)$$

г) лоренцевский профиль и экспоненциальный импульс:

$$F_{L,EP}(y, \rho) = \frac{y^2(1+y)}{(1+y)^2 + \rho^2 y^2}. \quad (17)$$

В формулах (15) и (16) введена комплексная функция ошибки

$$w(z) = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz). \quad (18)$$

Выражение (14) было получено в работе [45] при расчете временной зависимости поглощения энергии ЭМИ на неоднородно уширенном радиационном переходе.

В монохроматическом пределе, когда $y \gg 1$ ($\tau \gg \gg 1/\gamma$), формулы (14)–(17) дают линейную зависимость от длительности импульса, что согласуется с результатом стандартного подхода к описанию фотопроцессов с помощью вероятности в единицу времени (золотое правило Ферми).

Для коротких импульсов, $y \ll 1$, из полученных выражений следует квадратичная зависимость вероятности от длительности импульса.

Важным принципиальным свойством функций (14)–(17) является их нелинейная зависимость от длительности импульса, возникающая в линейном режиме по интенсивности электромагнитного поля, в контрасте с традиционным подходом, использующим вероятность в единицу времени, что подразумевает линейную зависимость от длительности ЭМИ.

На рис. 1–4 приведены графики F -функций (14)–(17) для различных значений безразмерной отстройки ρ .

Существенно, что функции длительности импульса (14), (15) для гауссовского ЭМИ являются

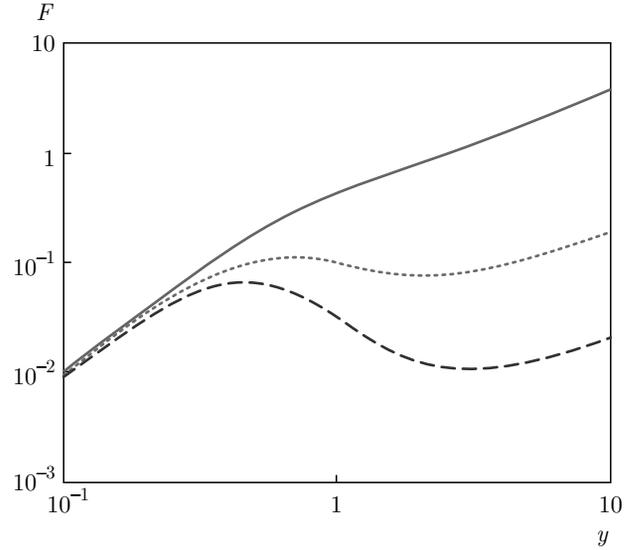


Рис. 1. Функции F для гауссовского импульса и гауссовского профиля для различных отстроек ρ : сплошная кривая — $\rho = 1$, пунктирная кривая — $\rho = 2$, штриховая кривая — $\rho = 2.5$

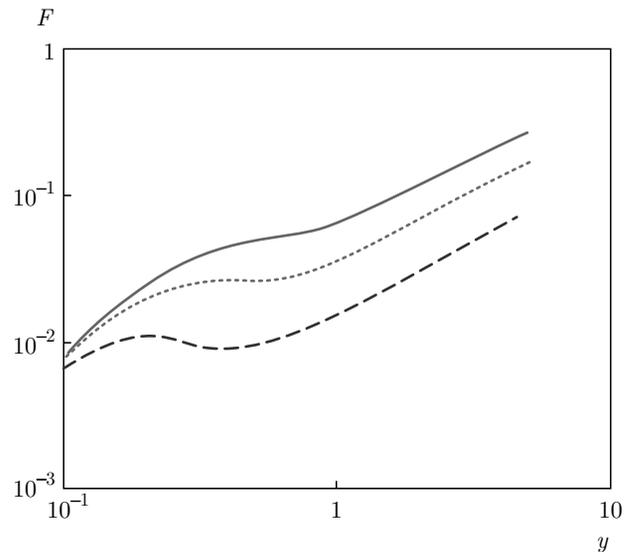


Рис. 2. Функции F для гауссовского импульса и лоренцевского профиля для различных отстроек ρ : сплошная кривая — $\rho = 3$, пунктирная кривая — $\rho = 4$, штриховая кривая — $\rho = 6$

немонотонными для достаточно больших отстроек несущей частоты от резонансной. В первой из них возникают экстремумы при отстройках $\rho > 1.707$ [45], во второй — при $\rho > 3.85$. В случае гауссовского профиля минимум более глубокий, чем для лоренцевского, и лежит в области больших длительностей. С ростом отстройки ρ положение экстремумов

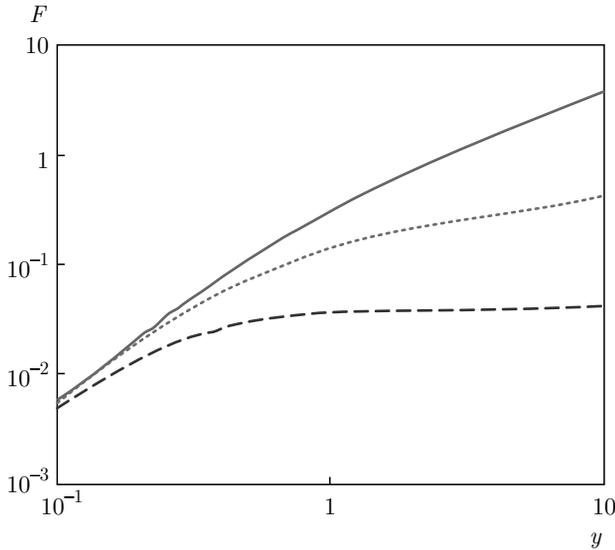


Рис. 3. Функции F для экспоненциального импульса и гауссовского профиля для различных отстроек ρ : сплошная кривая — $\rho = 1$, пунктирная кривая — $\rho = 2$, штриховая кривая — $\rho = 4$

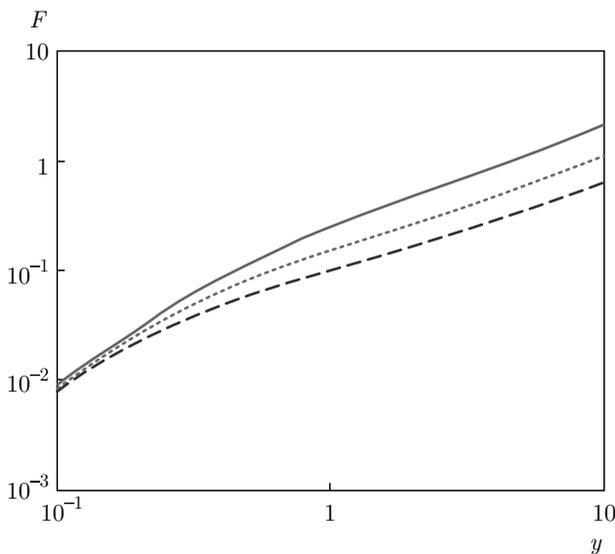


Рис. 4. Функции F для экспоненциального импульса и лоренцевского профиля для различных отстроек ρ : сплошная кривая — $\rho = 2$, пунктирная кривая — $\rho = 3$, штриховая кривая — $\rho = 4$

в случае лоренцевского профиля смещается в область меньших длительностей, а в случае гауссовского — y_{max} уменьшается, а y_{min} растет.

Функции (16), (17), описывающие фотопроцесс, индуцированный экспоненциальным ЭМИ, монотонно возрастают для всех значений параметра ρ с точкой перегиба, разделяющей области квадратич-

ного и линейного роста. В случае гауссовского профиля, как это видно из рис. 3, при больших отстройках зависимость от длительности импульса становится слабой. Угол наклона соответствующей прямой пропорционален $\exp(-\rho^2)$.

Из формул (14)–(17) также следует, что спектральная ширина вероятности фотопроцесса $\Delta\omega$ определяется не только спектральной шириной сечения γ , но и длительностью ЭМИ. Так, в случае (а) спектральный профиль вероятности является гауссовским с шириной $\Delta\omega = \sqrt{\gamma^2 + 1/\tau^2}$; в случае (б) профиль описывается контуром Фойгта с $\Delta\omega_G = 1/\tau$, $\Delta\omega_L = \gamma$; в случае (в) — контуром Фойгта с $\Delta\omega_G = \gamma$, $\Delta\omega_L = 1/\tau$; в случае (г) профиль является лоренцевским, $\Delta\omega = \gamma + 1/\tau$.

4. ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ ФОТОПРОЦЕССА ОТ ВРЕМЕНИ ПРИ ЗАДАННОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ИМПУЛЬСА

4.1. Монохроматический предел

В монохроматическом пределе, $\tau \gg 1/\gamma$, D -функции ЭМИ (6), (31) имеют резкий максимум на частоте $\omega = \omega_c$, так что остальные множители в подынтегральном выражении (2) можно вынести за знак интеграла на несущей частоте. Тогда формула (2) принимает вид

$$W(t, \tau) \cong \frac{c}{4\pi^2} \frac{\sigma(\omega_c)}{\hbar\omega_c} \int_0^\infty D(t, \tau, \omega) d\omega. \quad (19)$$

Для экспоненциального импульса подстановка (31) в (19) дает

$$W_{EP}(t, \tau \gg 1/\gamma) \approx \frac{c}{16\pi} \frac{\sigma(\omega_c)}{\hbar\omega_c} \times \theta(t) E_0^2 \tau \left(1 - e^{-2t/\tau}\right). \quad (20)$$

Из (20) следует, что линейный по времени рост вероятности имеет место при малых временах $t \ll \tau$, а линейный по длительности импульса — в противоположном пределе $t \gg \tau$.

Для гауссовского импульса, подставляя (6) в (19), получаем в нулевом приближении:

$$W_{GP}(t, \tau \gg 1/\gamma) \approx \frac{c}{32\sqrt{\pi}} \frac{\sigma(\omega_c)}{\hbar\omega_c} \times E_0^2 \tau \left| \operatorname{erfc}\left(-\frac{t}{\sqrt{2}\tau}\right) \right|^2. \quad (21)$$

Для малых времен $t \ll \tau$ вероятность (21) растет линейно со временем, поскольку тогда

$$\left| \operatorname{erfc} \left(-\frac{t}{\sqrt{2}\tau} \right) \right|^2 \approx 1 + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t}{\tau}.$$

4.2. Предел ультракоротких импульсов

Предел ультракоротких импульсов отвечает неравенству $\tau \ll 1/\gamma$. Тогда в выражении для вероятности фотопроцесса (2) профиль спектрального сечения (10) можно положить равным дельта-функции:

$$G(\omega) \approx \delta(\omega - \omega_0). \quad (22)$$

В результате имеем

$$W(t, \tau \ll 1/\gamma) = \frac{c}{4\pi^2} \frac{\sigma_{tot}}{\hbar\omega_0} D(t, \tau, \omega_0). \quad (23)$$

Таким образом, зависимость вероятности фотопроцесса от времени и длительности импульса полностью определяется D -функцией на собственной частоте спектрального сечения. Для вероятности возбуждения связанно-связанного перехода в атоме водорода выражение (23) было получено в работе [35].

В случае экспоненциального импульса, подставляя (31) в (22), получаем

$$W_{EP}(t, \tau \ll 1/\gamma) \cong \frac{c}{16\pi^2} \frac{\sigma_{tot}}{\hbar\omega_0} \frac{\theta(t) E_0^2 \tau^2}{1 + \tau^2(\omega_0 - \omega_c)^2} \times \left\{ \left(1 - e^{-t/\tau}\right)^2 + 4e^{-t/\tau} \sin^2 \left(\frac{(\omega_0 - \omega_c)t}{2} \right) \right\}. \quad (24)$$

Выражение (24) демонстрирует колебания во времени вероятности фотопроцесса для $t < \tau$. Период этих колебаний обратно пропорционален модулю отстройки несущей частоты от собственной частоты сечения фотопроцесса. Колебания спектральной вероятности резонансного рассеяния ультракоротких импульсов на частоте $|\omega_0 - \omega'|$ (ω' — частота рассеянного излучения) были получены в работе [46] для времен $t > 2\tau$ и произвольной формы импульса.

В резонансе, $\omega_c = \omega_0$, из (24) следует, что

$$W_{EP}(t, \omega_0 = \omega_c) = \frac{c}{16\pi^2} \frac{\sigma_{tot}}{\hbar\omega_0} \theta(t) \times E_0^2 \tau^2 \left(1 - e^{-t/\tau}\right)^2, \quad (25)$$

значит, для $t < \tau$ вероятность квадратично возрастает со временем в отличие от монохроматического случая (20).

Для гауссовского импульса в пределе ультракоротких ЭМИ имеем

$$W_{GP}(t, \tau \ll 1/\gamma) \cong \frac{c}{32\pi} \frac{\sigma_{tot}}{\hbar\omega_0} E_0^2 \tau^2 \times \exp \left(-(\omega_0 - \omega_c)^2 \tau^2 \right) \times \left| \operatorname{erfc} \left(-\frac{t/\tau + i|\omega_0 - \omega_c|\tau}{\sqrt{2}} \right) \right|^2. \quad (26)$$

Подчеркнем, что в отличие от случая экспоненциального импульса (24) вероятность фотопроцесса, индуцированного ультракоротким гауссовским ЭМИ (26), не имеет временных осцилляций на разностной частоте $|\omega_0 - \omega_c|$. Для «двойного экспоненциального импульса» с огибающей $\propto \exp(-|t|/\tau)$ эти осцилляции тоже имеют место.

При рассмотрении дифференциальной по энергии фотоэлектрона вероятности ионизации атома под действием ЭМИ справедливо соотношение (22), в котором нужно положить $\omega_0 = (I_P + \varepsilon)/\hbar$ (I_P — потенциал ионизации, ε — энергия фотоэлектрона), и, соответственно, применимы формулы (23)–(26). Тогда представляется возможным использовать методы аттосекундной хронометрии [10–12], о которой говорилось во Введении, для наблюдения временной зависимости вероятности процесса, описываемой приведенными выше выражениями.

4.3. Общий случай

Для произвольных значений параметров зависимость вероятности фотопроцесса от времени, длительности ЭМИ и его несущей частоты определяется интегралом:

$$J(t, \tau, \omega_c) = \frac{1}{E_0^2} \int_0^\infty d\omega \frac{G(\omega, \gamma)}{\omega} D(t, \omega, \tau, \omega_c). \quad (27)$$

Результаты расчетов временной зависимости вероятности фотопроцесса с помощью формулы (27) для экспоненциального импульса и лоренцевского профиля сечения для «промежуточных» длительностей $\tau \sim 1/\gamma$ приведены на рис. 5, 6 для собственной частоты $\omega_0 = 0.4$ отн. ед.

Величины параметров даны в относительных единицах.

Как видно из рис. 5, 6, осцилляции временной зависимости вероятности фотопроцесса, индуцированного экспоненциальным импульсом, на частоте $\omega_{osc} = |\omega_0 - \omega_c|$ возникают при ненулевой отстройке несущей частоты от собственной частоты сечения и

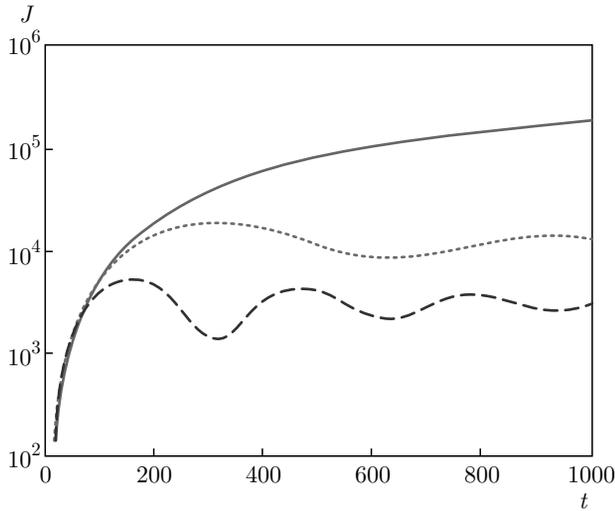


Рис. 5. Зависимости вероятности фотопроцесса от времени для различных несущих частот экспоненциального импульса: сплошная кривая — $\omega_c = 0.4$, пунктирная кривая — $\omega_c = 0.41$, штриховая кривая — $\omega_c = 0.42$; $\tau = 10^3$, $\gamma = 10^{-3}$

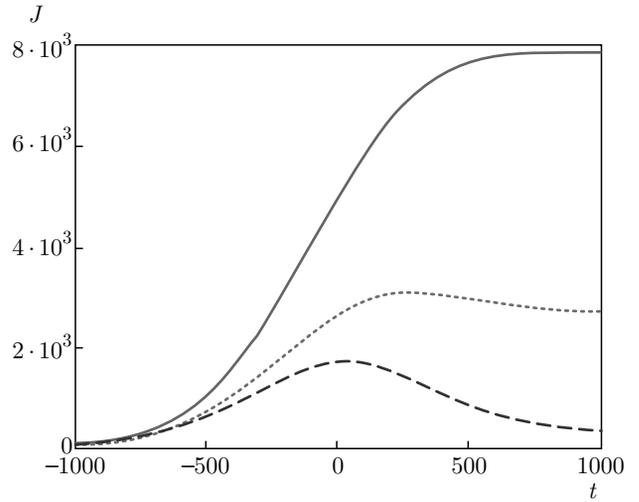


Рис. 7. Зависимости вероятности фотопроцесса от времени для гауссовского импульса и разных спектральных ширин лоренцевского профиля: сплошная кривая — $\gamma = 3 \cdot 10^{-3}$, пунктирная кривая — $\gamma = 10^{-3}$, штриховая кривая — $\gamma = 10^{-4}$; $\tau = 500$, $\omega_c = 0.42$

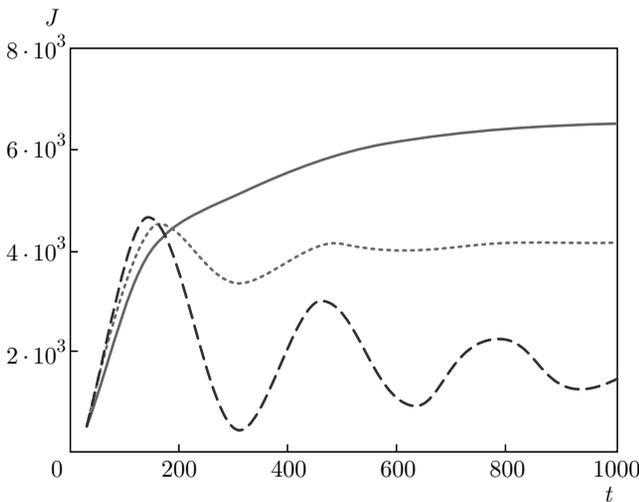


Рис. 6. Зависимости вероятности фотопроцесса от времени для экспоненциального импульса и разных спектральных ширин лоренцевского профиля: сплошная кривая — $\gamma = 10^{-2}$, пунктирная кривая — $\gamma = 4 \cdot 10^{-3}$, штриховая кривая — $\gamma = 10^{-4}$; $\tau = 500$, $\omega_c = 0.42$

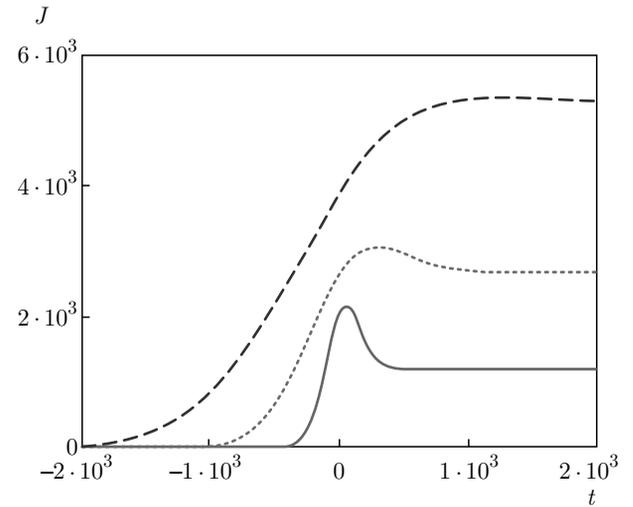


Рис. 8. Зависимости вероятности фотопроцесса от времени для различных длительностей гауссовского импульса ($\gamma\tau \sim 1$): сплошная кривая — $\tau = 200$, пунктирная кривая — $\tau = 500$, штриховая кривая — $\tau = 1000$; $\omega_c = 0.42$, $\gamma = 10^{-3}$

при достаточно малых ширинах спектрального профиля $\gamma < |\omega_c - \omega_0|$. Кроме того, длительность импульса должна быть больше периода осцилляций.

Результаты расчетов по формуле (27) для гауссовских импульсов «промежуточной» длительности ($\tau \sim 1/\gamma$) и $\omega_0 = 0.4$ отн. ед. представлены на рис. 7–9.

Из рис. 7–30 видно, что для гауссовского импульса временные осцилляции вероятности на частоте $\omega_{osc} = |\omega_0 - \omega_c|$ отсутствуют.

Максимум функции $J_{GP}(t)$ появляется при выполнении неравенства $\gamma < |\omega_0 - \omega_c|$. Для длинных импульсов максимум в зависимости $J_{GP}(t)$ возникает с уменьшением длительности (рис. 8), а для коротких — с увеличением τ (рис. 9). Этот вывод

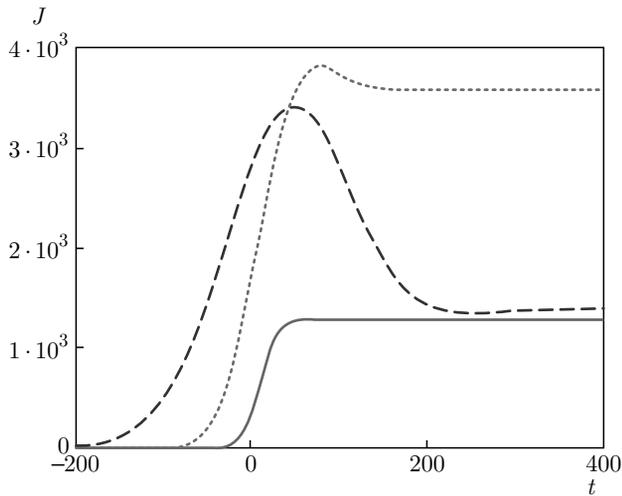


Рис. 9. То же, что на рис. 8, для меньших длительностей импульса ($\gamma\tau < 1$): сплошная кривая — $\tau = 20$, пунктирная кривая — $\tau = 50$, штриховая кривая — $\tau = 100$; $\omega_c = 0.42$, $\gamma = 10^{-3}$

был сделан в [35] при рассмотрении ультракороткого предела возбуждения атома аттосекундным импульсом.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе в рамках теории возмущений прослежена зависимость вероятности резонансного фотопроцесса от времени, длительности и формы ЭМИ, а также от профиля спектрального сечения.

Для больших времен, когда ЭМИ уже практически закончился, получены простые формулы, описывающие вероятность фотопроцесса как функцию безразмерных параметров импульса для нескольких сочетаний огибающей импульса и профиля сечения. Показано, что общим для выведенных выражений является их квадратичная зависимость от длительности импульса в ультракоротком пределе и линейная для квазимонохроматических ЭМИ. Последнее согласуется с результатом стандартного подхода, использующего вероятность в единицу времени. В случае гауссовской огибающей зависимость вероятности фотопроцесса от длительности импульса для достаточно больших отстроек несущей частоты от собственной является немонотонной функцией, имеющей максимум и минимум. Указанные экстремумы сильнее проявляются в случае гауссовского профиля сечения, чем в случае лоренцевского. Спектральная ширина вероятности за все время действия импульса определяется как спектральной шириной се-

чения, так и длительностью ЭМИ в соответствии с полученными формулами.

В предельных случаях длинных и коротких импульсов экспоненциальной и гауссовской формы получены аналитические выражения для вероятности фотопроцесса как функции времени $W(t)$.

В монохроматическом пределе $\gamma\tau \gg 1$ на малых временах $t \ll \tau$ вероятность $W(t)$ линейно возрастает со временем. При этом для всех времен данная функция не содержит экстремумов.

Для ультракороткого экспоненциального импульса вероятность при определенных условиях может иметь временные осцилляции на разностной частоте $\omega_{osc} = |\omega_0 - \omega_c|$, в то время как для гауссовского импульса эти осцилляции отсутствуют. Данные осцилляции не являются осцилляциями Раби: их частота не зависит от амплитуды поля.

В общем случае для гауссовских ЭМИ нет однозначной связи между появлением максимума функции $W(t)$, длительностью импульса и спектральной шириной сечения фотопроцесса.

Таким образом, в настоящей статье продемонстрировано, что учет конечной длительности и формы огибающей ЭМИ приводит к выявлению специфических свойств фотопроцессов, которые отсутствуют при их описании с помощью вероятности в единицу времени и золотого правила Ферми.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Hassan, A. Wirth, I. Grguras et al., Rev. Sci. Instrum. **83**, 111301 (2012).
2. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
3. J. Xu, B. Shen, X. Zhang et al., Sci. Rep. **8**, 2669 (2018).
4. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко и др., Письма в ЖЭТФ **110**, 9 (2019).
5. М. К. Есеев, В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Письма в ЖЭТФ **114**, 444 (2021).
6. K. Ramasesha, S. R. Leone, and D. M. Neumark, Ann. Rev. Phys. Chem. **67**, 41 (2016).
7. М. Ю. Рябикин, М. Ю. Емелин, В. В. Стрелков, УФН (2022).
8. P. B. Corkum and F. Krausz, Nature Phys. **3**, 381 (2007).
9. Д. В. Мещанкин, А. А. Воронин, Е. Е. Серебряков и др., Письма в ЖЭТФ **106**, 621 (2017).

10. R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdorfer, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 765 (2015).
11. J. Itatani, F. Quere, G. L. Yudin et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 173903 (2002).
12. R. Klenberger, E. Goulielmakis, M. Uiberacker et al., *Nature* **427**, 817 (2004).
13. M. Schultze, M. Fiess, N. Karpowicz et al., *Science* **328**, 1658 (2010).
14. U. Thumm, O. Liao, E. M. Bothschafter et al., in *Fundamentals of Photonics and Physics*, ed. by D. L. Andrew, Ch. 13, Wiley, New York (2015).
15. L. Seiffer, Q. Liu, S. Zherebtsov et al., *Nature Phys.* **13**, 766 (2017).
16. H. J. Worner, A. Schild, D. Jelovina et al., arXiv: 2009.04913v [cond-mat.other].
17. V. Prasad, B. Dahiya, and K. Yamashita, *Phys. Scripta* **82**, 055302 (2010).
18. A. C. Brown, G. Armstrong, J. Benda et al., *Comput. Phys. Comm.* **250**, 107062 (2020).
19. Th. Mercouris, Y. Komninos, and C. A. Nicolaides, *Phys. Rev. A* **75**, 013407 (2007).
20. C. A. Nicolaides, Th. Mercouris, and Y. Komninos, *Phys. Rev. A* **80**, 055402 (2009).
21. W.-C. Chu and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **82**, 053415 (2010).
22. L. Argenti, R. Pazourek, J. Feist et al., *Phys. Rev. A* **87**, 053405 (2013).
23. A. Desrier, A. Maquet, R. Taieb et al., *Phys. Rev. A* **98**, 053406 (2018).
24. M. Tribelsky and A. Miroshnichenko, *Nanophotonics* **0340** (2021).
25. J. Schwinger, *Phys. Rev.* **91**, 728 (1953).
26. K. Husimi, *Prog. Theor. Phys.* **9**, 381 (1953).
27. В. А. Астапенко, Ф. Б. Розми, Е. В. Сахно, *ЖЭТФ* **160**, 155 (2021).
28. R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. V. Arkhipov et al., *Opt. Lett.* **44**, 1202 (2019).
29. S. S. Hassan, R. A. Alharbey, T. Jarad et al., *Int. J. Appl. Math.* **33**, 59 (2020).
30. Л. В. Келдыш, *УФН* **187**, 1280 (2017).
31. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
32. Н. Н. Розанов, *Опт. и спектр.* **124**, 75 (2018).
33. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov et al., *Opt. Express* **28**, 17020 (2020).
34. V. A. Astapenko, *Phys. Lett. A* **374**, 1585 (2010).
35. В. А. Астапенко, *ЖЭТФ* **157**, 67 (2020).
36. F. B. Rosmej, V. A. Astapenko, and V. S. Lisitsa, *Phys. Rev. A* **90**, 043421 (2014).
37. В. А. Астапенко, С. Ю. Свита, *ЖЭТФ* **148**, 444 (2015).
38. В. А. Астапенко, С. В. Сахно, *ЖЭТФ* **150**, 1 (2016).
39. В. А. Астапенко, В. С. Лисица, А. В. Яковец, *ЖЭТФ* **154**, 1087 (2018).
40. V. A. Astapenko, O. J. Piegbusi, S. V. Sakhno, and L. I. Trakhtenberg, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry* **371**, 76 (2019).
41. V. A. Astapenko, F. B. Rosmej, and E. S. Khramov, *Matter Rad. Extrem.* **6**, 054404 (2021).
42. В. А. Астапенко, *ЖЭТФ* **139**, 228 (2011).
43. V. A. Astapenko, A. Calisti, and V. S. Lisitsa, *High Energy Density Phys.* **31**, 59 (2019).
44. E. Fermi, *Z. Phys.* **29**, 315 (1924).
45. В. А. Астапенко, С. Ю. Свита, *Изв. вузов. Физика* **57**, 46 (2014).
46. V. A. Astapenko, *Appl. Phys. B* **126**, 110 (2020).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИСПЕРСИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИНТЕГРАЛЬНЫХ ОПТИЧЕСКИХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ И ГЕНЕРАЦИЯ В НИХ КОГЕРЕНТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ЧАСТОТНЫХ ГРЕБЕНОК

Н. Ю. Дмитриев^{a,b*}, *А. С. Волошин*^c, *Н. М. Кондратьев*^a, *В. Е. Лобанов*^a,
К. Н. Миньков^a, *А. Е. Шитиков*^a, *А. Н. Данилин*^{a,d}, *Е. А. Лоншаков*^a, *И. А. Биленко*^{a,d}

^a *Российский квантовый центр
121205, Москва, Россия*

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

^c *Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL)
1015, Lausanne, Switzerland*

^d *Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 3 февраля 2022 г.,
после переработки 17 февраля 2022 г.
Принята к публикации 17 февраля 2022 г.

Оптические частотные гребенки являются уникальным инструментом для фундаментальной метрологии, спектроскопии, широкого спектра прикладных задач. Перспективной платформой для генерации когерентных частотных гребенок служат высокодобротные микрорезонаторы. Ключевыми характеристиками, определяющими свойства оптической частотной гребенки, являются дисперсионные параметры микрорезонатора. В данной работе разработана и верифицирована оригинальная методика, позволяющая с высокой точностью определить величину дисперсионных коэффициентов как в кристаллических, так и в интегральных микрорезонаторах с межмодовым интервалом от гигагерц до терагерц. Продемонстрирована генерация солитонной оптической частотной гребенки в интегральном микрорезонаторе, накачиваемым лазерным диодом в режиме затягивания на длине волны 1.55 мкм, и показано, что ее спектральные характеристики полностью соответствуют измеренным дисперсионным параметрам микрорезонатора.

DOI: 10.31857/S0044451022070021
EDN: DRLYOD

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокдобротные оптические микрорезонаторы с модами шепчущей галереи, впервые продемонстрированные более 30 лет назад [1], открыли уникальные возможности для наблюдения и исследования широкого круга оптических явлений и до сих пор вызывают живой интерес научного сообщества [2–11]. Одним из наиболее активно развивающихся направлений является генерация в них такого

интересного вида оптических сигналов, как оптическая частотная гребенка, представляющая собой набор эквидистантно расположенных спектральных линий. Оптические частотные гребенки в высокодобротных оптических микрорезонаторах впервые были продемонстрированы в 2007 году [12]. Генерация таких частотных гребенок, называемых керровскими частотными гребенками или микрогребенками, происходит за счет процесса нелинейного четырехволнового взаимодействия [13–16]. Процесс генерации был детально описан и успешно продемонстрирован в различных типах микрорезонаторов, объемных кристаллических и интегральных [17–19]. Хотя оптические частотные гребенки известны и успешно применяются в науке и технике уже более

* E-mail: nkdmiriev@gmail.com

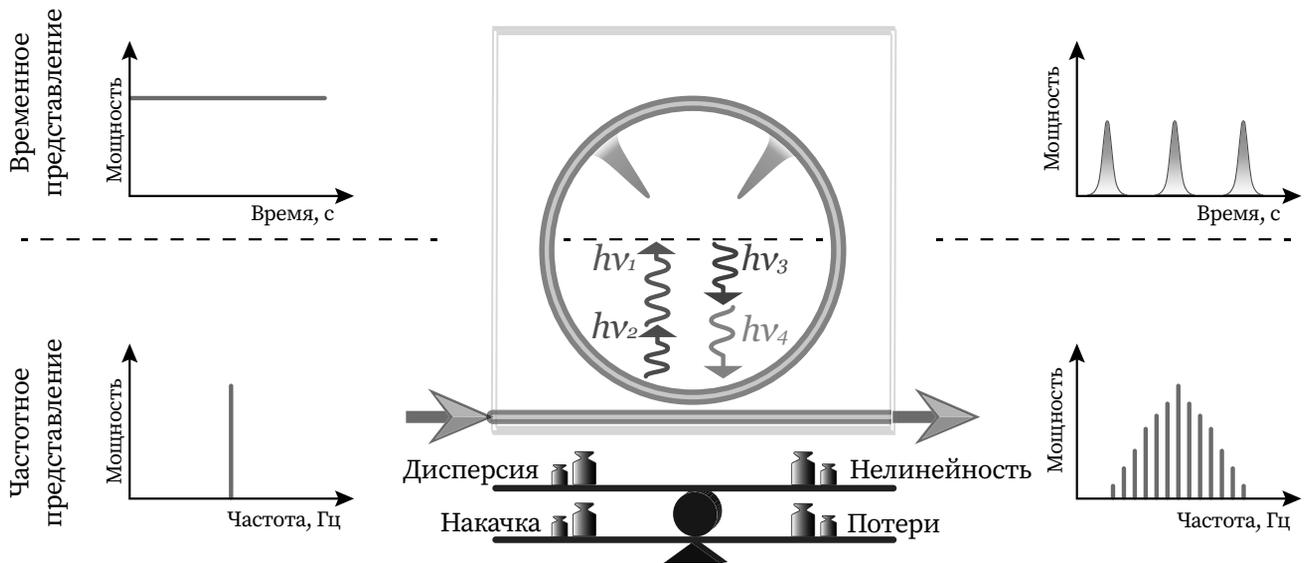


Рис. 1. Схематическое представление процесса генерации частотной гребенки: в фотонный чип со сверхдобротным микрорезонатором заводится излучение от узкополосного непрерывного лазера, частота излучения которого близка к одной из собственных частот микрорезонатора. Начиная с некоторого уровня мощности входного сигнала, при соблюдении оптимального двойного баланса между дисперсией и нелинейными свойствами микрорезонатора и между накачкой и потерями можно наблюдать процесс гиперпараметрических осцилляций. В результате четырехволнового смешения происходит каскадный процесс генерации боковых линий, отстоящих друг от друга строго на величину области свободной дисперсии микрорезонатора. При выполнении определенных условий внутри резонатора начинают распространяться короткие импульсы (солитоны). На выходе сигнал, спектр которого состоит из узких эквидистантных линий (частотная гребенка), во временном представлении имеет вид последовательности сверхкоротких импульсов (солитонов)

20 лет [20, 21], активное развитие интегральной фотоники открыло возможности существенной миниатюризации устройств для их возбуждения и позволило существенно расширить область их применения. На сегодняшний день микрогребенки успешно применяются для таких задач, как системы связи [22, 23], оптические сверхбыстрые дальнометры [24, 25], спектроскопия в режиме реального времени [26], калибровочные эталоны [27, 28], атомные часы [29], интегральные источники микроволнового излучения [30, 31] и т. п.

Особый интерес представляют когерентные частотные гребенки, соответствующие сверхкоротким солитонным импульсам во временном представлении. Такие сигналы характеризуются наименьшим уровнем фазовых шумов и наиболее гладкой спектральной огибающей. Генерацию таких частотных гребенок, или же диссипативных солитонов, возможно наблюдать при накачке высокодобротного микрорезонатора лазером с непрерывным излучением при выполнении определенных условий [32, 33] (рис. 1). Данное явление становится возможно при соблюдении баланса между нелинейностью третьего порядка, которая выражается зависимостью показателя

преломления от интенсивности распространяющегося в среде сигнала, и дисперсией групповых скоростей (ДГС), с одной стороны, и между потерями и накачкой, с другой. Нелинейность третьего порядка, обычно называемая керровской, в основном зависит от природы используемого материала и его свойств. ДГС же зависит одновременно и от свойств материала, и от геометрических параметров микрорезонатора.

В зависимости от знака коэффициента дисперсии второго порядка выделяют два типа ДГС, нормальную и аномальную. Динамика нелинейных процессов в микрорезонаторе зависит от типа ДГС на длине волны накачки [34]. Для генерации солитонных частотных гребенок, как правило, требуется аномальная ДГС. Обладая информацией о ее величине, можно однозначно определить параметры огибающей частотной гребенки для известных значений мощности накачки и отстройки частоты накачки от собственной частоты микрорезонатора [32]. Более того, такой параметр, как ДГС, является одним из важнейших параметров в физике сверхкоротких импульсов и играет ключевую роль в большинстве нелинейных процессов. В связи с этим

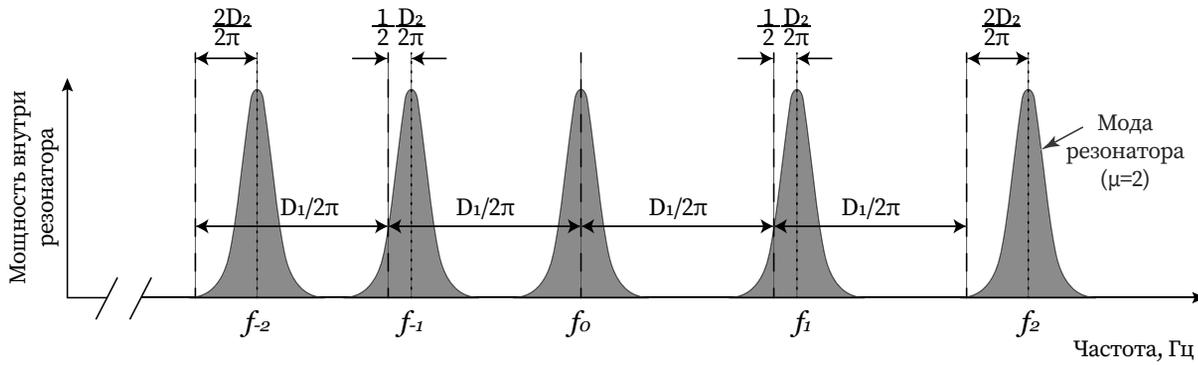


Рис. 2. Спектр собственных частот микрорезонатора с учетом влияния дисперсии. Наглядно представлена разница между ОСД микрорезонатора ($D_1/2\pi$, штриховые линии) и межмодовым интервалом при учете вклада дисперсии второго порядка (см. пунктирные линии) в случае аномальной дисперсии $D_2/2\pi > 0$

крайне важно уметь проводить теоретическую оценку и экспериментальные измерения дисперсионных характеристик систем, а также иметь возможность управлять ими путем изменения геометрии микрорезонатора [35, 36]. В ряде случаев прямое измерение дисперсионных характеристик может оказаться затруднительным, особенно для интегральных микрорезонаторов с большой величиной области свободной дисперсии, превышающей сотню гигагерц.

В данной работе представлено детальное описание реализации нового универсального метода измерения дисперсионных характеристик оптических микрорезонаторов и проведена его верификация. Преимущества рассматриваемого метода заключаются в его гибкости и доступности. Рассмотренный метод позволяет проводить измерение ДГС практически для любого диапазона длин волн. Помимо этого, он подходит для измерения дисперсионных характеристик как интегральных микрорезонаторов с большим значением области свободной дисперсии (ОСД), так и кристаллических с рекордными уровнями добротности и крайне узкими резонансами. Вдобавок рассмотренная методика калибровки может быть использована для измерения других характеристик микрорезонаторов, например, для оценки добротности. Также в работе продемонстрирована генерация солитонной частотной гребенки в одном из исследуемых интегральных микрорезонаторов и показано, что ее спектральные характеристики полностью соответствуют рассчитанным на основе измеренных с помощью разработанной методики дисперсионных параметров микрорезонатора. Для генерации частотной гребенки в качестве источника накачки использовался компактный лазерный диод, стабилизированный тем же са-

мым микрорезонатором [2, 11].

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ СТЕНД

2.1. Экспериментальная оценка дисперсионных характеристик

Общая идея экспериментальной оценки дисперсионных характеристик микрорезонатора заключается в определении положения всех его собственных частот (мод) в выбранной области спектра, относящихся к одному пространственному семейству, и в последующем вычислении дисперсионных коэффициентов D_i . Вычисление дисперсионных коэффициентов осуществляется путем аппроксимации полученных экспериментальных данных аналитической формулой зависимости частоты моды от ее порядкового номера μ [32, 35]:

$$\omega_\mu = \omega_0 + D_1\mu + \frac{D_2}{2}\mu^2 + \frac{D_3}{6}\mu^3 + \frac{D_4}{24}\mu^4 + \dots \equiv \omega_0 + D_1\mu + D_{int}, \quad (1)$$

где ω_0 — собственная частота моды накачки, $D_1/2\pi$ — ОСД резонатора, $D_2/2\pi$ — показатель дисперсии второго порядка, определяющий ДГС, $D_3/2\pi, D_4/2\pi, \dots$ — коэффициенты, относящиеся к более высоким порядкам дисперсии. Будем предполагать, что $D_1 \gg D_2 \gg D_3 \gg \dots$, и ограничимся рассмотрением дисперсии второго порядка. Довольно часто под ОСД подразумевают интервал между соседними модами резонатора, азимутальные числа которых отличаются на 1, однако, как видно из соотношения (1), интервал между соседними модами меняется и зависит от порядкового номера моды.

В данной работе межмодовым будем называть интервал, который складывается из ОСД $D_1/2\pi$ и добавки $D_2/2\pi$, обусловленной наличием дисперсии второго порядка (см. рис. 2). В случае резонатора с нулевой дисперсией ($D_i = 0, i \geq 2$) межмодовый интервал и ОСД совпадают: все моды будут располагаться эквидистантно на расстоянии, численно равном ОСД. Аномальной ДГС соответствует случай $D_2 > 0$, а нормальной — случай $D_2 < 0$. Для генерации солитонных частотных гребенок, как правило, требуется аномальная ДГС. В ряде случаев важны и значения дисперсионных коэффициентов более высокого порядка. В частности, их соотношения могут определять возможность формирования и положение дисперсионной волны, что может быть использовано для расширения спектральной ширины гребенки [37], а также положение дополнительных спектральных компонент, появляющихся в результате вырожденного четырехволнового взаимодействия [38, 39].

Пропуская через микрорезонатор излучение от плавно перестраиваемого источника и регистрируя мощность на выходе из микрорезонатора, можно получить спектр его пропускания, из которого, в свою очередь, можно определить положения собственных частот (мод) микрорезонатора. Однако на практике подобные измерения трудно осуществить, в особенности для интегральных микрорезонаторов. Основная проблема заключается в том, что характерная величина ОСД ($D_1/2\pi$) порядка 10^{10} – 10^{12} Гц, а вклад дисперсии групповых скоростей ($D_2/2\pi$) в межмодовое расстояние обычно лежит в диапазоне 10^5 – 10^8 Гц.

Таким образом, для измерения дисперсионных характеристик необходим источник с широким диапазоном плавной перестройки (порядка нескольких терагерц) и одновременно достаточно узкой мгновенной шириной линии (на уровне единиц–десятков кГц). Стабильность и воспроизводимость частоты за время проведения измерений также не должны превышать этой величины.

К сожалению, источников, обладающих одновременно всеми перечисленными свойствами, на сегодняшний день попросту не существует. Узкополосные источники с высокой долговременной стабильностью, как правило, или имеют очень малый диапазон перестройки, или перестраиваются дискретно, что делает их совершенно непригодными для применения в рассматриваемом эксперименте. Источники с возможностью плавной перестройки в широком диапазоне, в свою очередь, обычно имеют низкую долговременную стабильность. Следо-

вательно, при использовании подобных источников остро стоит вопрос высокоточной калибровки в процессе проведения измерений. Данная задача может быть решена путем использования прецизионного измерительного оборудования, например измерителя длины волны, или же путем использования эталонов, таких как источники гребенок [40]. Однако такой подход обладает рядом существенных недостатков. Во-первых, подобное оборудование, обладающее необходимым уровнем точности, стоит крайне дорого, и многие лаборатории попросту не могут себе его позволить. Второй, и самый главный, недостаток подобного подхода заключается в том, что экспериментальная установка в этом случае оказывается сильно ограниченной по диапазону длин волн, в котором могут проводиться измерения.

Рассматриваемый в данной работе метод калибровки лишен перечисленных недостатков. Он универсален и может быть применен практически для любого диапазона длин волн, а что самое главное — он достаточно прост в реализации и требует существенно меньших затрат. При этом точность определения положения собственных частот при использовании данного метода может варьироваться в зависимости от требований эксперимента и потенциально может достигать 10^4 – 10^5 Гц.

В качестве калибровочного инструмента в рассматриваемом методе предлагается использовать классический интерферометр Маха–Цендера (ИМЦ): одновременная регистрация уровней сигнала, прошедшего через откалиброванный ранее интерферометр и исследуемый микрорезонатор, позволяет с высокой точностью определить межмодовый интервал микрорезонатора. В данной работе измерения проводились в диапазоне 1500–1650 нм и использовался волоконный ИМЦ, собранный из двух волоконных делителей 50/50 и одномодового волокна smf-28. ИМЦ должен быть предварительно тщательно откалиброван, в нашем случае с учетом дисперсионных свойств использованного волокна.

Схема экспериментальной установки для проведения предварительной калибровки ИМЦ представлена на рис. 3а. В качестве источника излучения использовался перестраиваемый лазер Toptica STL-1550, на вход которого подавался сигнал треугольной формы с импульсного генератора (Ген. имп.) для перестройки частоты. Частота треугольного сигнала перестройки была 10 кГц. Оптическая схема имела два равнозначных плеча, на выходе каждого плеча имелся фотодетектор (ФД), который передавал сигнал, пропорциональный мощности прошедшего оптического сигнала, на осцилло-

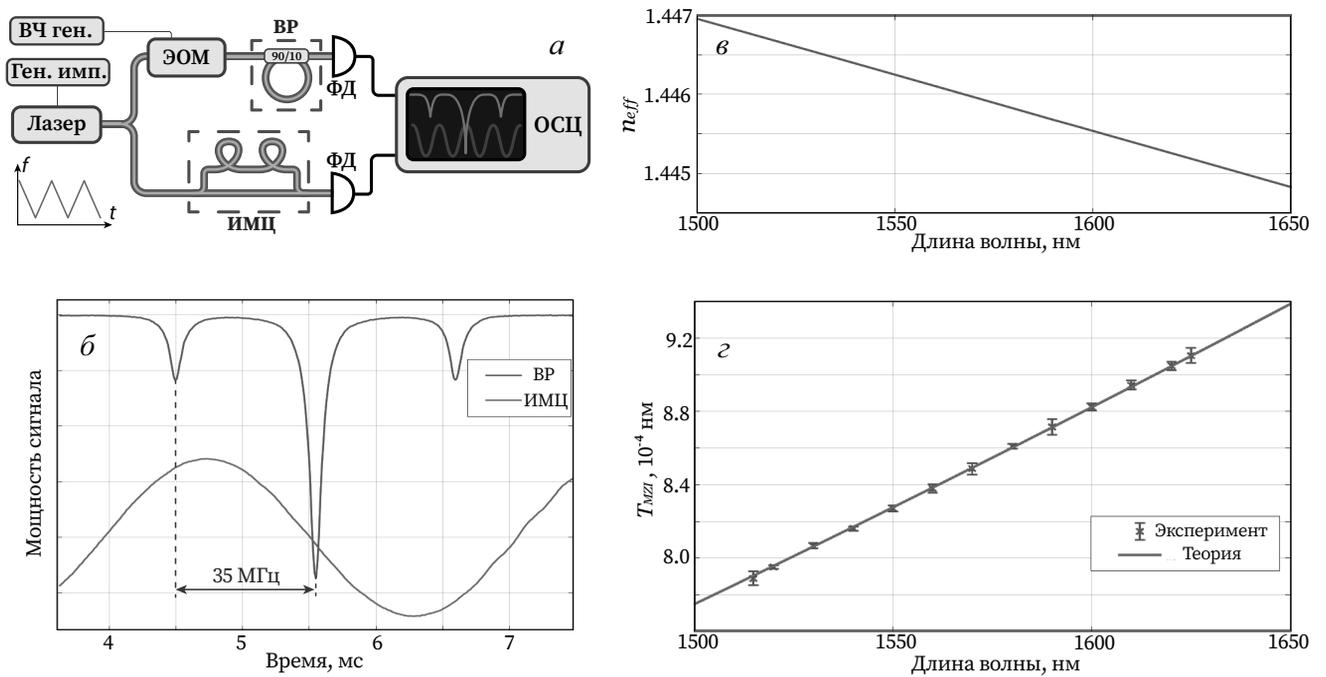


Рис. 3. (В цвете онлайн) Калибровка ИМЦ. а) Принципиальная схема установки для калибровки ИМЦ: Лазер — перестраиваемый источник лазерного излучения (Toptica CTL 1550); Ген. имп. — генератор импульсов произвольной формы для перестройки частоты лазерного источника (Keysight 33500B); ЭОМ — электрооптический модулятор (Thorlabs LN65S-FC); ВЧ ген. — высокочастотный генератор для подачи сигнала на ЭОМ; ВР — волоконный резонатор на базе делителя 90/10; ИМЦ — исследуемый волоконный ИМЦ; ФД — фотодетектор; ОСЦ — осциллограф. б) Данные, записанные с экрана осциллографа (наличие ЭОМ в одном из плеч приводит к генерации боковых резонансов ВР на частоте, равной частоте сигнал ВЧ генератора), что позволяет перевести временную шкалу осциллографа в частоту и рассчитать период калибруемого ИМЦ. в) Аналитическая зависимость эффективного показателя преломления n_{eff} используемого волокна smf-28 от длины волны. г) Зависимость периода калибруемого ИМЦ, полученная путем аппроксимации экспериментальных данных теоретической зависимостью (2)

граф (ОСЦ). В первом плече располагался калибруемый ИМЦ, выходной сигнал которого представлял собой синусоиду. Во втором плече размещался волоконный резонатор (ВР) и фазовый электрооптический модулятор (ЭОМ), на вход которого с генератора (ВЧ ген.) подавался сигнал с частотой, близкой к частоте синусоидального сигнала от исследуемого ИМЦ. Волоконный резонатор был собран на базе делителя 90/10, и его межмодовый интервал значительно превышал ОСД калибруемого ИМЦ.

Наличие модуляции во втором плече приводило к тому, что помимо основного резонанса волоконного резонатора на экране осциллографа можно было наблюдать два боковых резонанса, которые отстоят от основного точно на частоту сигнала модуляции (рис. 3б). Зная это расстояние, можно осуществить однозначный переход от временной шкалы осциллографа к шкале частот и получить частотную зависимость функции пропускания ИМЦ, из которой вы-

числяется ее период T_{MZI} . В процессе постобработки данных резонансы волоконного резонатора были аппроксимированы функцией Лоренца, а сигнал ИМЦ — синусоидой. Повторив подобный эксперимент для 13 разных длин волн из интересующего нас диапазона, мы получили зависимость периода ИМЦ от длины волны (синие точки на рис. 3г). Среднеквадратичное отклонение результатов измерений периода составило $2 \cdot 10^{-6}$ нм. Используя предоставленные производителем параметры волокна, с помощью моделирования методом конечных элементов мы получили аналитическую зависимость эффективного показателя (n_{eff}) преломления волокна от длины волны (рис. 3в).

Экспериментально измеренные значения периода ИМЦ для разных длин волн были аппроксимированы выражением (2) для периода ИМЦ с использо-

ванием аналитической зависимости $n_{eff}(\lambda)$ [41, 42]:

$$T_{MZI} = \frac{\lambda^2}{n_g(\lambda_0)L}, \quad (2)$$

где L — разность плеч ИМЦ, $n_g(\lambda_0) = n_{eff}(\lambda_0) - \lambda_0 dn_{eff}/d\lambda$. В результате аппроксимации была получена непрерывная функция зависимости периода ИМЦ от длины волны $T_{MZI}(\lambda)$ (красная линия на рис. 3z). Таким образом, была проведена калибровка ИМЦ. С помощью полученной зависимости можно определить частоту излучения источника в каждый момент времени. Для этого требуется знать значение частоты источника лишь в одной точке.

Следующим этапом эксперимента было непосредственное измерение спектра собственных частот интегрального резонатора. Принципиальная схема экспериментальной установки представлена на рис. 4a. В качестве лазера накачки использовался тот же лазер Tortica STL 1550, что и в процессе предварительной калибровки ИМЦ. Однако теперь частота его излучения плавно и непрерывно перестраивалась во всем возможном диапазоне, а именно, от 1510 до 1620 нм. Оптическая схема имела два равнозначных плеча, в конце каждого из которых располагался фотодетектор (ФД). Сигнал с ФД в режиме реального времени записывался с помощью аналогово-цифрового преобразователя (АЦП), конкретно в рассматриваемом эксперименте использовался АЦП, встроенный в контроллер Tortica. В одном из плеч располагался ранее откалиброванный ИМЦ, а в другом плече — фотонный чип с интегральным микрорезонатором и волноводом из нитрида кремния (Si_3N_4). Ввод и вывод излучения в интегральный волновод осуществлялись с помощью подведения к торцам чипа конических (линзированных) волокон (рис. 4б,в), суммарные потери при этом составляли около 3 дБ. Исходный массив данных, полученный в ходе эксперимента, в общем случае представляет собой зависимость прошедшей мощности двух каналов от времени. Сигнал одного из каналов, в котором располагается ИМЦ, представляет собой синусоиду с известным нам периодом. Сигнал второго канала имеет вид плавно меняющейся кривой с характерными узкими провалами, соответствующими модам микрорезонатора.

Используя полученную на предыдущем этапе зависимость периода ИМЦ от длины волны, можно осуществить переход от временной зависимости в исходном массиве экспериментальных данных к частотной (рис. 4z). Для этого необходимо знать точную длину волны в какой-либо момент времени. В рассматриваемом эксперименте была известна дли-

на волны начальной точки диапазона сканирования, так как используемый лазер с отключенной опцией перестройки позволяет выставить начальную длину волны с точностью 10^{-5} нм. Поэтому было достаточно выставить длину волны лазера с выключенной опцией перестройки и начать сбор данных до включения перестройки. В общем же случае, при отсутствии описанной возможности лазера, можно модернизировать установку, добавив третье плечо в оптическую схему. В этом плече можно осуществить гетеродинирование проходящего сигнала с каким-либо эталонным источником излучения или же пропустить излучение через прибор с заведомо известными спектральными характеристиками, например, волоконную брэгговскую решетку.

Логика перехода от временной зависимости исходных данных к частотной заключается в следующем: информация о длине волны λ_0 в какой-либо одной точке исходного массива данных дает нам возможность вычислить период ИМЦ в окрестности этой точки, $T_{MZI}(\lambda_0)$, используя ранее полученную зависимость $T_{MZI}(\lambda)$. Зная величину $T_{MZI}(\lambda_0)$, мы можем вычислить длину волны нескольких соседних точек в пределах одного периода ИМЦ. Далее необходимо вычислить период ИМЦ уже для новой длины волны, $\lambda_1 = \lambda_0 + T_{MZI}(\lambda_0)$, используя который мы можем найти значения длин волн для точек, соседних с λ_1 . Таким образом, мы имеем рекуррентное соотношение

$$\lambda_i = \lambda_{i-1} + T_{MZI}(\lambda_{i-1}),$$

с помощью которого можно вычислить длину волны для всех точек исходного массива данных и перейти от временной зависимости к зависимости от длины волны (частотной). Для реализации описанного перехода были написаны соответствующие оригинальные скрипты в пакете MATLAB. На рис. 4z приведены спектры пропускания микрорезонатора и ИМЦ после обработки изложенным выше методом.

Точность определения положения собственных частот микрорезонатора зависит от величины периода используемого ИМЦ и количества точек, укладываемого в этот период. Количество точек зависит от соотношения между частотой дискретизации АЦП и скоростью перестройки длины волны лазерного источника. Оптимальная скорость сканирования должна быть выбрана из следующих соображений: с одной стороны, скорость сканирования должна быть достаточно низкой, чтобы частоты дискретизации АЦП хватало для четкой «прорисовки» синусоиды ИМЦ и пиков резонатора; с другой стороны, слишком низкая скорость скани-

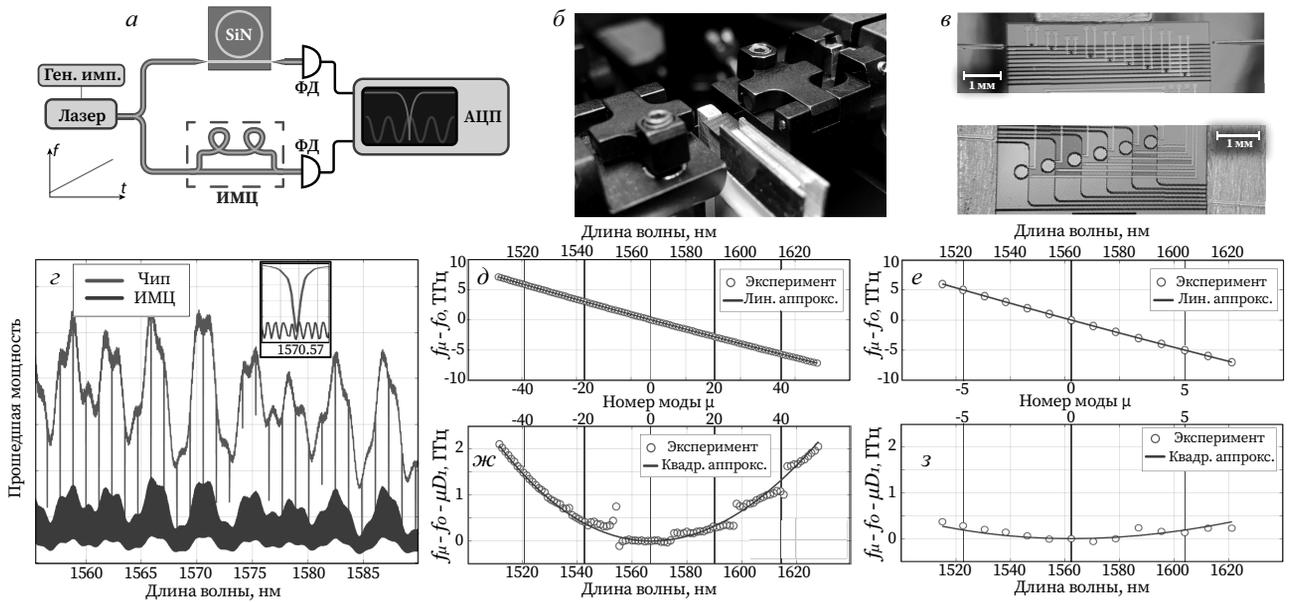


Рис. 4. (В цвете онлайн) Измерение дисперсии интегрального микрорезонатора. а) Принципиальная схема экспериментальной установки: ИМЦ — ранее откалиброванный волоконный ИМЦ; — фотодетектор; АЦП — аналого-цифровой преобразователь для сбора и записи данных. б) Фото общего вида экспериментальной установки. в) Вид в микроскоп чипа и подводимых в его торец линзованных волокон (процесс юстировки): показаны интегральные резонаторы с межмодовым расстоянием 1 ТГц (вверху) и 150 ГГц (внизу). г) Экспериментальные данные для резонатора с межмодовым расстоянием 150 ГГц после обработки: синяя линия — пропускание интегрального чипа с резонатором (спектр мод резонатора); красная — пропускание ИМЦ (на вставке более крупный масштаб). д–з) Экспериментальные результаты для резонаторов с межмодовым расстоянием 150 ГГц (д, ж) и 1 ТГц (е, з): д и е — зависимости отступа по частоте μ -й моды резонатора от центральной и аппроксимация экспериментальных данных линейной функцией, ж и з — вклады дисперсии высших порядков в положения мод и аппроксимация квадратичной функцией

рования будет приводить к тому, что частотная нестабильность перестраиваемого источника, связанная с дрейфом частоты или же тепловыми эффектами, приведет к сильным амплитудным шумам снимаемых данных. В данной работе экспериментально определенная оптимальная скорость сканирования была около 2 нм/с, период использованного ИМЦ для 1550 нм составлял 103.412 МГц. Такой выбор обусловлен ограничением максимальной частоты дискретизации используемого АЦП, который для данных параметров системы мог обеспечить около 10–12 точек на период синусоиды ИМЦ ($T_{MZI}(\lambda)$).

2.2. Результаты

На описанной экспериментальной установке с использованием изложенной методики нами успешно измерены спектры пропускания и определены значения собственных частот интегральных микрорезонаторов из нитрида кремния (Si_3N_4) с межмодовыми интервалами около 150 ГГц и 1 ТГц

(рис. 4в). Для дальнейшего расчета коэффициентов D_1 и D_2 из соотношения (1) необходимо выбрать точку разложения — моду, на которой будет накачиваться будущая гребенка. Для резонатора с межмодовым интервалом 150 ГГц в качестве моды отсчета $\mu = 0$ была выбрана мода вблизи 1567 нм ($f_0 = 191.32$ ТГц), а с интервалом 1 ТГц — вблизи 1560 нм ($f_0 = 192.17$ ТГц). После вычитания частоты выбранной центральной моды f_0 из положения всех остальных была получена зависимость отступа μ -й моды от центральной моды вида (рис. 4д, е)

$$\Delta f(\mu) = f_\mu - f_0,$$

а в соответствии с соотношением (1)

$$f_\mu - f_0 = \frac{D_1}{2\pi} \mu + \frac{D_2}{4\pi} \mu^2.$$

Следовательно, для вычисления коэффициентов D_1 и D_2 достаточно аппроксимировать полученную экспериментальную зависимость квадратичной функцией. В связи с тем, что $D_1 \gg D_2$, удобнее сначала найти D_1 путем аппроксимации экспериментальной

зависимости $f_\mu - f_0$ линейной функцией, а затем вычислить D_2 , найдя квадратичное приближение для зависимости $f_\mu - f_0 - (D_1/2\pi)\mu$ (рис. 4*д*).

На графике для резонатора с межмодовым расстоянием в 150 ГГц отчетливо видны отклонения экспериментальных точек от теоретической кривой, определяемой квадратичной функцией, в районе длин волн 1555, 1595 и 1615 нм. Данные отклонения связаны с влиянием на измеряемое семейство мод микрорезонатора другого семейства мод с отличающимся пространственным распределением поля [40, 43]. Наличие подобного влияния обусловлено наличием некоторых неоднородностей в микрорезонаторе, связанных с особенностями процесса производства. Такие неоднородности уникальны для каждого резонатора и, естественно, не учитываются в аналитическом выражении (1).

В результате проведенного эксперимента было выяснено, что исследованные микрорезонаторы обладают аномальной дисперсией. Для интегрального микрорезонатора с предполагаемым межмодовым расстоянием 150 ГГц на длине волны 1567 нм

$$D_1/2\pi = 143.516 \pm 0.005 \text{ ГГц},$$

$$D_2/2\pi = 1.72 \pm 0.02 \text{ МГц},$$

а для межмодового расстояния 1 ТГц на длине волны 1560 нм

$$D_1/2\pi = 996.80 \pm 0.07 \text{ ГГц},$$

$$D_2/2\pi = 14.9 \pm 0.8 \text{ МГц}.$$

Погрешность расчета показателей D_1 и D_2 была оценена с помощью метода складного ножа [44], который заключается в поочередном отбрасывании одной экспериментальной точки из расчета. Величина погрешности в случае измерения резонатора с межмодовым расстоянием 1 ТГц выше, так как количество мод, укладываемых в диапазон измерения, существенно меньше, чем в случае резонатора с межмодовым расстоянием 150 ГГц (10 мод в первом случае и порядка 70 мод во втором). Предлагаемая методика может быть доработана для расчета дисперсионных коэффициентов более высокого порядка.

2.3. Верификация результатов измерения дисперсионных характеристик

Верификация описанного метода была проведена на примере микрорезонатора с межмодовым расстоянием 150 ГГц путем сравнения полученных экспериментальных результатов с результатами численных расчетов.

Был рассчитан спектр собственных мод микрорезонатора методом конечных элементов (МКЭ) в частотной области. В модель была заложена топология микрорезонатора с межмодовым расстоянием 150 ГГц с учетом всех погрешностей геометрических размеров, связанных с неточностями производственного процесса, и использовалась зависимость показателя преломления материалов с соответствующими допусками, предоставленная производителем. Измерение дисперсионных характеристик было проведено для фундаментальной моды с горизонтальным направлением вектора напряженности электрического поля (рис. 5*а*). Именно для этого семейства были рассчитаны положения всех собственных частот микрорезонатора в диапазоне 1500–1650 нм. Расчеты проводились в пакете COMSOL MultiPhysics, обладающим проверенной высокой предсказательной способностью [45–47]. В результате численного расчета с учетом погрешностей всех параметров для каждой моды была определена некоторая область частот, в которой, согласно теории, она должна располагаться.

Таким образом, теоретически был получен доверительный интервал для коэффициента $D_2/2\pi = 1.11\text{--}2.14$ МГц (красная область на рис. 5*б*). Экспериментально измеренное значение коэффициента $D_2/2\pi = 1.72 \pm 0.02$ МГц находится в хорошем соответствии с результатами численных расчетов.

В качестве дополнительной верификации было проведено прямое сравнение полученных экспериментальных результатов с уже зарекомендовавшим себя методом измерения дисперсионных характеристик с использованием источника внешней эталонной частотной гребенки, обладающим высокой точностью. Были измерены дисперсионные характеристики интегральных микрорезонаторов, топология которых полностью повторяла топологию микрорезонаторов использованных в работе [48], где калибровка в процессе измерения проводилась с помощью источника внешней оптической частотной гребенки, используемого в качестве эталонного источника. Коэффициенты $D_2/2\pi$ для данной топологии микрорезонатора, найденные с помощью предлагаемого метода и приведенные в работе [48], составили соответственно 1.26 МГц и 1.56 МГц. Отклонение результатов укладывается в погрешность, обусловленную точностью процесса производства.

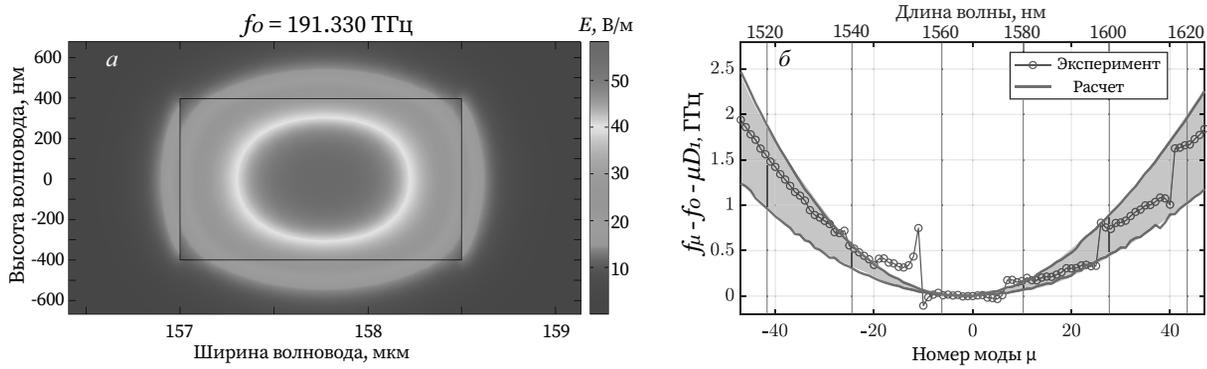


Рис. 5. (В цвете онлайн) Сравнение полученных экспериментальных результатов с результатами численного расчета с помощью метода конечных элементов в частотной области. а) Распределение напряженности электрического поля в поперечном сечении волновода для центральной моды f_0 исследуемого пространственного семейства. б) Вклад дисперсии высших порядков в положения мод. Синие точки — эксперимент, оценка $D_2/2\pi = 1.72$ МГц. Красная область — доверительный интервал численного расчета с учетом погрешностей технологического процесса производства и погрешности предоставленных нам зависимостей показателей преломления использованных материалов, оценка $D_2/2\pi = 1.11\text{--}2.14$ МГц

3. ГЕНЕРАЦИЯ СОЛИТОННОЙ ЧАСТОТНОЙ ГРЕБЕНКИ В ИССЛЕДУЕМЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРАХ

Солитонная частотная гребенка возбуждалась с использованием одного из ранее охарактеризованных микрорезонаторов с $D_1/2 = 143.516$ ГГц, $D_2/2\pi = 1.72$ МГц, добротностью $Q \approx 2 \cdot 10^6$, собственной шириной линии $\kappa_0/2\pi = 106$ МГц и шириной линии, обусловленной связью, $\kappa_c/2\pi = 75$ МГц (рис. 6 в). В качестве источника накачки использовался одномодовый многочастотный лазерный диод с резонатором Фабри – Перо, работающий в режиме затягивания [2, 11]. Работа в этом режиме, обеспечивающем за счет обратного рэлеевского рассеяния на поверхностных и объемных неоднородностях микрорезонатора [49, 50] быструю обратную связь между лазером и микрорезонатором, позволяет существенно стабилизировать частоту генерации и значительно уменьшить ширину линии [2, 30], причем не только для одночастотных, но и для многочастотных диодов [51]. Это дает возможность использовать для генерации частотных гребенок и солитонов не традиционно используемые узкополосные перестраиваемые лазеры, достаточно дорогие и громоздкие, а значительно более доступные и компактные лазерные диоды [11, 48, 52–54]. Более того, в случае генерации гребенки при помощи затянутого лазерного диода происходит компенсация нежелательных тепловых эффектов [55, 56], которые неизбежны при генерации с использованием внешнего лазера с оптическим изолятором, что приводит к необходимости

применения специальных методик для их компенсации [57–60].

Излучение лазерного диода в чип заводилось через торец (рис. 6 б). С этой целью была изготовлена оригинальная оснастка, позволяющая разместить термостабилизированный лазерный диод на прецизионной шестикоординатной подаче. Как известно, эффект затягивания является крайне чувствительным к фазе отраженной волны [11], поэтому помимо точного позиционирования лазерного диода в плоскости фотонного чипа и по вертикали к нему требовалось с высокой точностью контролировать расстояние между торцами фотонного чипа и лазерного диода. Для этого были использованы пьезоэлементы, позволяющие позиционировать диод с точностью до 20 нм. Чип при этом был термостабилизирован и располагался неподвижно на специально изготовленном держателе. К противоположному торцу фотонного чипа было подведено коническое волокно. Выходной сигнал подавался на оптический анализатор спектра и детектор, подключенный к электрическому анализатору спектра и осциллографу (рис. 6 а). Таким образом, собранный экспериментальный стенд позволял одновременно получать информацию об оптическом спектре и электрическом спектре выходного сигнала и тем самым оценивать степень его когерентности. Как известно, длина волны излучения лазерного диода растет с увеличением тока. Таким образом, возбуждение интересующей нас моды микрорезонатора и затягивание на нее лазерного диода происходило путем плавного увеличения тока последнего. При попадании в

область затягивания сначала наблюдается снижение выходной мощности и характерное изменение оптического спектра выходного сигнала.

В случае многочастотного лазерного диода с резонатором Фабри – Перо наблюдается переход к одностороннему режиму работы на частоте моды микрорезонатора с дополнительным сужением линии генерации [48, 51, 61]. Затем при условии оптимальной фазы обратной волны путем дальнейшей подстройки тока можно увеличить отстройку и пронаблюдать гиперпараметрическую генерацию. Как правило, при увеличении отстройки сначала наблюдается «шумный» режим, затем бризерные состояния, и уже после можно достичь когерентного солитонного состояния, которое характеризуется отсутствием низкочастотных составляющих (ниже частоты повторения солитонов) [32, 61]. Подобный способ генерации путем плавной перестройки тока лазера может быть реализован благодаря наличию эффекта затягивания, обеспечивающим дополнительную стабилизацию системы лазер–микрорезонатор. В случае использования для накачки оптически изолированного внешнего лазера генерация солитона плавной перестройкой частоты излучения не представляется возможной и необходимо использовать различного рода методики, например импульсную модуляцию мощности [57] накачки для компенсации влияния нежелательных тепловых эффектов.

На собранной экспериментальной установке с помощью описанной выше методики мы успешно пронаблюдали генерацию солитонной частотной оптической гребенки в ранее охарактеризованном микрорезонаторе. Ток использованного лазерного диода с резонатором Фабри – Перо мог варьироваться в диапазоне 0–500 мА. Солитонная гребенка наблюдалась на токах около 300 мА, что соответствует примерно 30 мВт в интегральном волноводе, при этом измеренный порог гиперпараметрической генерации (P_{th}) для данного микрорезонатора равен 14 мВт.

Как было упомянуто ранее, значение коэффициента D_2 напрямую влияет на спектральную ширину генерируемой гребенки [32]. Ее огибающая в случае односолитонного режима описывается следующим выражением:

$$P_\mu \sim 2\eta^2 P_{th} \frac{D_2}{\kappa} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\pi\mu}{2} \sqrt{\frac{D_2}{2(\omega_0 - \omega)}} \right), \quad (3)$$

где $\eta = \kappa_c / (\kappa_0 + \kappa_c)$ – нормированный коэффициент связи [0;1], $\kappa = \kappa_c + \kappa_0$ – ширина линии нагруженного микрорезонатора. Поправка к мощности центральной линии здесь не приводится ввиду громоздкости, но также может быть рассчитана аналитиче-

ски [32]. Отметим, что мощность линий гребенки (за исключением центральной) не зависит от мощности накачки при фиксированной отстройке.

Таким образом, дисперсия может быть измерена как по ширине гребенки (числу линий по уровню 3 дБ),

$$N_{comb} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2(\omega_0 - \omega)}{D_2}} 2 \operatorname{arcosh}(\sqrt{2}),$$

так и по суммарной мощности боковых линий (без учета центральной линии),

$$P_{lines} = \frac{4\eta^2 P_{th}}{\kappa} \left(\frac{2}{\pi} \sqrt{2(\omega_0 - \omega)D_2} - D_2 \right).$$

Сравнение теоретически предсказанной на основе измеренных дисперсионных коэффициентов огибающей частотной гребенки и экспериментально полученной частотной гребенки приведены на рис. 6г. Ширина теоретически предсказанной гребенки практически полностью совпала с шириной экспериментально наблюдаемой, что свидетельствует о точности измеренных дисперсионных характеристик микрорезонатора и, следовательно, о корректности разработанной методики их определения. Однако при этом спектр наблюдаемой гребенки выглядит достаточно изрезанным в сравнении с гладкой расчетной огибающей, что приводит к тому, что часть линий лежит под теоретической кривой, а часть, наоборот, возвышается над ней. Мы полагаем, что подобные отклонения могут быть вызваны рядом причин.

Во-первых, вероятно, что мы наблюдали многосолитонное состояние, когда в микрорезонаторе существует не один, а несколько солитонов одновременно. Подобное состояние вполне может быть устойчивым и когерентным, т. е. с точки зрения низкочастотных шумов многосолитонное и односолитонное состояния не различимы. Многосолитонное состояние как раз характеризуется изрезанной огибающей оптического спектра, причем степень изрезанности спектра зависит от взаимного расположения солитонов внутри микрорезонатора [32].

Во-вторых, в связи с тем, что накачка производилась многочастотным лазерным диодом с резонатором Фабри – Перо вполне возможно наличие Вернье эффекта, когда некоторые подавленные продольные моды лазерного диода совпадают с соответствующими модами резонатора (аналог многочастотной накачки). В этом случае может происходить усиление отдельных линий гребенки, которые совпали по час-

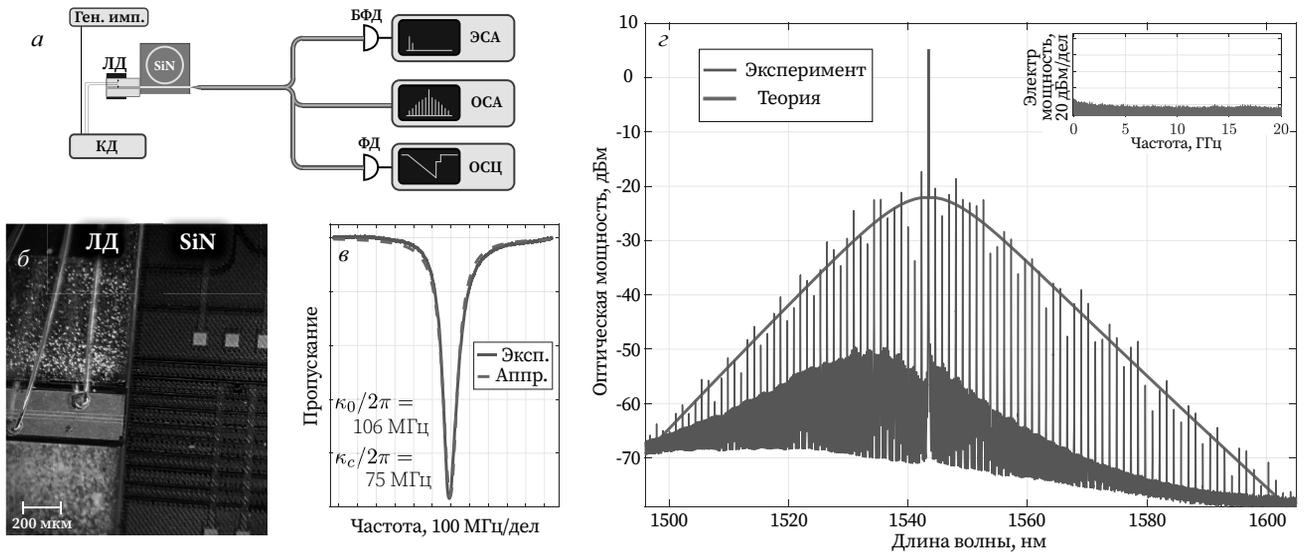


Рис. 6. (В цвете онлайн) Генерация оптической частотной гребенки в режиме затягивания. а) Принципиальная схема экспериментальной установки для генерации гребенки при накачке лазерным диодом в режиме затягивания: ЛД — лазерный диод; КД — контроллер лазерного диода (ток инжекции и термостабилизация); БФД — быстрый фотодетектор; ЭСА — электрический анализатор спектра; ОСА — оптический анализатор спектра. б) Фото лазерного диода (ЛД), подведенного в торец фотонного чипа (SiN); вид в микроскоп. в) Экспериментально измеренная накачиваемая мода микрорезонатора в линейном режиме (синяя линия) и аппроксимация функцией Лоренца с учетом связи (красная штриховая линия) и ее параметры. г) Экспериментально полученная солитонная частотная гребенка (синие линии) и огибающая (3), рассчитанная на основе измеренных параметров микрорезонатора (красная линия). Вставка: СВЧ-спектр выходного сигнала. Отсутствие низкочастотных составляющих свидетельствует о высокой когерентности выходного сигнала

тоте с продольными модами лазерного диода в полосе его усиления. Аналогичный эффект был недавно продемонстрирован для генерации частотных гребенок и платиконов в режиме затягивания в области нормальной ДГС [62].

В-третьих, изрезанность огибающей оптической гребенки может быть вызвана наличием неоднородностей в микрорезонаторе, приводящих к взаимодействию мод разных семейств, наличие которых подтверждается неоднородностью экспериментально измеренной дисперсионной кривой (см. рис. 5б).

4. ВЫВОДЫ

Таким образом, авторами разработан и испытан оригинальный метод экспериментального определения дисперсионных характеристик оптических микрорезонаторов и подробно описан способ его реализации. Рассмотренный метод, основанный на применении интерферометра Маха–Цендера в качестве калибровочного инструмента, отличается своей универсальностью с точки зрения диапазона измерений, доступностью и высоким уровнем точности. Помимо этого, данный метод

подходит для измерения дисперсионных характеристик интегральных микрорезонаторов с большим межмодовым расстоянием, что успешно было продемонстрировано на примере измерения ДГС высокочастотных микрорезонаторов из нитрида кремния с межмодовыми расстояниями 1 ТГц и 150 ГГц. Точность метода была подтверждена численно, путем сравнения измеренных параметров с результатами, полученными численно с помощью метода конечных элементов, так и экспериментально, посредством анализа спектра возбужденной лазерным диодом солитонной гребенки при эффекте затягивания. Параметры огибающей спектра частотной гребенки полностью совпали с аналитической оценкой на основе измеренных дисперсионных параметров микрорезонатора.

Благодарности. Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ВНИИОФИ (срр.vniiofi.ru) и ЦКП «Визуализации высокого разрешения» Сколтех (https://www.skoltech.ru).

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-72-00132).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. B. Braginsky, M. L. Gorodetsky, and V. S. Ilchenko, *Phys. Lett. A* **137**, 393 (1989).
2. V. V. Vassiliev, V. L. Velichansky, V. S. Ilchenko et al., *Opt. Comm.* **158**, 305 (1998).
3. K. J. Vahala, *Nature* **424**, 839 (2003).
4. A. B. Matsko and V. S. Ilchenko, *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* **12**, 3 (2006).
5. A. B. Matsko and V. S. Ilchenko, *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* **12**, 15 (2006).
6. I. S. Grudin, A. B. Matsko, A. A. Savchenkov et al., *Opt. Comm.* **265**, 33 (2006).
7. J. Ward and O. Benson, *Laser Photon. Rev.* **5**, 553 (2011).
8. D. V. Strekalov, C. Marquardt, A. B. Matsko et al., *J. Opt.* **18**, 123002 (2016).
9. G. Lin, A. Coillet, and Y. K. Chembo, *Adv. Opt. Photonics* **9**, 828 (2017).
10. M. Kues, C. Reimer, J. M. Lukens et al., *Nature Photonics* **1**, 170 (2019).
11. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, A. V. Cherenkov et al., *Opt. Express* **25**, 28167 (2017).
12. P. Del'Haye, A. Schliesser, O. Arcizet et al., *Nature* **450**, 1214 (2007).
13. T. J. Kippenberg, S. M. Spillane, and K. J. Vahala, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 083904 (2004).
14. T. J. Kippenberg, R. Holzwarth, and S. A. Diddams, *Science* **332**, 555 (2011).
15. A. A. Savchenkov, A. B. Matsko, D. Strekalov et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 243905 (2004).
16. T. Herr, J. Riemensberger, C. Wang et al., *Nature Photonics* **6**, 480 (2012).
17. A. Pasquazi, M. Peccianti, L. Razzari et al., *Phys. Rep.* **729**, 1 (2018).
18. A. L. Gaeta, M. Lipson, and T. J. Kippenberg, *Nature Photonics* **13**, 158 (2019).
19. Y. K. Chembo, *Nanophotonics* **5**, 214 (2016).
20. T. Udem, R. Holzwarth, and T. W. Hänsch, *Nature* **416**, 233 (2002).
21. T. Fortier and E. Baumann, *Comm. Phys.* **2**, 153 (2019).
22. P. Marin-Palomo, J. N. Kemal, M. Karpov et al., *Nature* **546**, 274 (2017).
23. A. Fülöp, M. Mazur, A. Lorences-Riesgo et al., *Nature Comm.* **9**, 1598 (2018).
24. M. G. Suh and K. J. Vahala, *Science* **359**, 884 (2018).
25. P. Trocha, D. Ganin, M. Karpov et al., *Science* **359**, 887 (2018).
26. Q. F. Yang, B. Shen, H. Wang et al., *Science* **363**, 965 (2019).
27. E. Obrzud, M. Rainer, A. Harutyunyan et al., *Nature Photonics* **13**, 31 (2019).
28. M.-G. Suh, X. Yi, Y.-H. Lai et al., *Nature Photonics* **13**, 25 (2019).
29. Z. L. Newman, V. Maurice, T. Drake et al., *Optica* **6**, 680 (2019).
30. W. Liang, V. Ilchenko, A. A. Eliyahu et al., *Nature Comm.* **6**, 7371 (2015).
31. D. T. Spencer, T. Drake, T. C. Briles et al., *Nature* **557**, 81 (2018).
32. T. Herr, V. Brasch, J. D. Jost et al., *Nature Photonics* **8**, 145 (2014).
33. T. J. Kippenberg, A. L. Gaeta, M. Lipson, and M. L. Gorodetsky, *Science* **361**, eaan8083 (2018).
34. C. Godey, I. V. Balakireva, A. Coillet, and Y. K. Chembo, *Phys. Rev. A* **89**, 063814 (2014).
35. S. Fujii and T. Tanabe, *Nanophotonics* **9**, 1087 (2020).
36. C. Xu, J. Ma, Ch. Ke et al., *Appl. Phys. Lett.* **114**, 091104 (2019).
37. V. Brasch, M. Geiselmann, T. Herr et al., *Science* **351**, 357 (2016).
38. N. L. B. Sayson, K. E. Webb, S. Coen et al., *Opt. Lett.* **42**, 5190 (2017).
39. N. L. B. Sayson, T. Bi, V. Ng et al., *Nature Photonics* **13**, 701 (2019).
40. P. Del'Haye, O. Arcizet, M. L. Gorodetsky et al., *Nature Photonics* **3**(9), 529 (2009).
41. L. C. Schneider, *Bloomington* (2017).
42. Z. Tian, S. S.-H. Yam, J. Barnes et al., *IEEE Photon. Techn. Lett.* **20**, 626 (2008).
43. T. Herr, V. Brasch, J. D. Jost et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 123901 (2014).
44. B. Efron and C. Stein, *Ann. Stat.* **9**, 586 (1981).

45. Y. A. Demchenko and M. L. Gorodetsky, *J. Opt. Soc. Amer. B* **30**, 3056 (2013).
46. A. V. Andrianov, M. P. Marisova, V. V. Dorofeev, and E. A. Anashkina, *Results Phys.* **17**, 103128 (2020).
47. N. M. Kondratiev and M. L. Gorodetsky, *Phys. Lett. A* **382**, 2265 (2018).
48. A. S. Raja, A. S. Voloshin, H. Guo et al., *Nature Comm.* **10**, 680 (2019).
49. M. L. Gorodetsky, A. D. Pryamikov, and V. S. Ilchenko, *J. Opt. Soc. Amer. B* **17**, 1051 (2000).
50. T. J. Kippenberg, S. M. Spillane, and K. J. Vahala, *Opt. Lett.* **27**, 1669 (2002).
51. R. R. Galiev, N. G. Pavlov, N. M. Kondratiev et al., *Opt. Express* **26**, 30509 (2018).
52. N. G. Pavlov, S. Koptyaev, G. V. Lihachev et al., *Nature Photonics* **12**, 694 (2018).
53. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, E. A. Lonshakov et al., *Opt. Express* **28**, 38892 (2020).
54. B. Shen, L. Chang, J. Liu et al., *Nature* **582**, 365 (2020).
55. V. S. Il'chenko and M. L. Gorodetskii, *Laser Phys.* **2**, 1004 (1992).
56. T. Calmon, L. Yang, and K. J. Vahala, *Opt. Express* **12**, 4742 (2004).
57. V. Brasch, M. Geiselmann, M. H. P. Pfeiffer, and T. J. Kippenberg, *Opt. Express* **24**, 29312 (2016).
58. T. Wildi, V. Brasch, J. Liu et al., *Opt. Lett.* **44**, 4447 (2019).
59. X. Yi, Q.-F. Yang, K. Y. Yang, and K. Vahala, *Opt. Lett.* **41**, 2037 (2016).
60. S. Zhang, J. M. Silver, L. Del Bino et al., *Optica* **6**, 206 (2019).
61. A. S. Voloshin, N. M. Kondratiev, G. V. Lihachev et al., *Nature Comm.* **12**, 235 (2021).
62. А. Е. Шитиков, А. С. Волошин, И. К. Горелов и др., *ЖЭТФ* **161**, 1 (2022).

НЕУПРУГОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА АТОМНЫМ ИОНОМ

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский*, Р. В. Конеев

Ростовский государственный университет путей сообщения
344038, Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 3 февраля 2022 г.,
после переработки 7 февраля 2022 г.
Принята к публикации 8 февраля 2022 г.

Вне рамок дипольного приближения для оператора контактного перехода построен нерелятивистский вариант квантовой теории процесса неупругого расщепления жесткого рентгеновского фотона на два фотона атомным ионом.

DOI: 10.31857/S0044451022070033
EDN: ECVEKL

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальному и теоретическому исследованию фундаментальных процессов нерезонансного кратного комптоновского рассеяния фотона свободным электроном посвящено большое количество работ (см., например, [1–7]). В недавней работе авторов [8] проведено теоретическое исследование процесса нерезонансного двойного комптоновского рассеяния фотона атомным ионом. Этот процесс был нами интерпретирован (см. также [6]) как неупругое (ион переходит в возбужденное состояние) расщепление фотона на два фотона атомным ионом. Такая общая интерпретация обусловлена тем, что при неупругом рассеянии фотона многоэлектронной системой лишь часть парциальных амплитуд вероятности перехода (диаграмм Фейнмана) соответствует временной последовательности комптон-эффект (в момент времени t_1) [9, 10] и последующее тормозное излучение второго фотона (в момент времени t_2), $t_1 < t_2$ (рис. 1b). В самом деле, например, диаграмму Фейнмана на рис. 1a естественно интерпретировать как амплитуду вероятности локального двойного тормозного излучения сплошным спектром возбужденного состояния атомного иона в момент времени t_2 . В данной работе мы дополняем результаты [8] выходом за рамки дипольного приближения для оператора контактного перехода, учитываем следующий порядок приближения

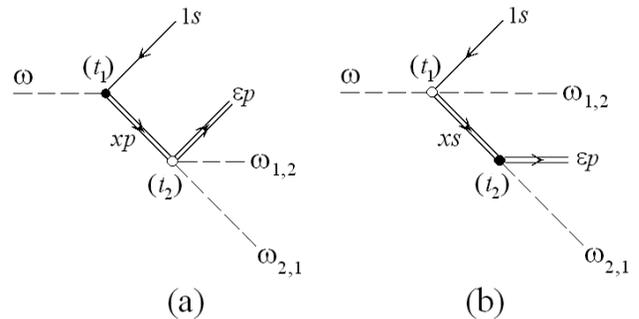


Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса (A_M — a; B_M — b) неупругого расщепления фотона на два фотона атомным ионом Ne^{8+} в представлении диаграмм Фейнмана. Стрелка вправо — электрон сплошного спектра, стрелка влево — вакансия. Двойная линия — состояние получено в хартри-фокковском поле $1s$ -вакансии. Черный (светлый) кружок — вершина взаимодействия по оператору радиационного (контактного) перехода: ω (ω_n , $n = 1, 2$) — падающий (рассеянный) фотон: $\omega \geq I_{1s}$. Направление времени — слева-направо ($t_1 < t_2$)

Тамма–Данкова (число частиц в рассеяниях диаграмм Фейнмана $N \leq 3$) и даем более детальное изложение теории процесса.

В качестве объекта исследования взят гелиоподобный атом неона (Ne^{8+} , заряд ядра иона $Z = 10$, конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 [^1S_0]$). Следует ожидать, что полученные результаты будут широко востребованы, в частности, в физике магнитной термоядерной плазмы (см., например, [11, 12]) и при интерпретации фоновых (континуальных) структур спектров эмиссии гелиоподобных ионов от горячих астрофизических объек-

* E-mail: amnrnd@mail.ru

тов (см., например, [13, 14]).

2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим процесс неупругого расщепления фотона на два фотона электронами иона Ne^{8+} :

$$\omega + [0] \rightarrow \left\{ \begin{matrix} K_1 \\ K_2 \end{matrix} \right\} \rightarrow 1s\varepsilon p ({}^1P_1) + \omega_1 + \omega_2, \quad (1)$$

$$K_1 = 1sxp ({}^1P_1), \quad (2)$$

$$K_2 = 1sxs ({}^1S_0) + \omega_n, \quad n = 1, 2. \quad (3)$$

В (1) и далее принята атомная система единиц ($m_e = e = \hbar = 1$), ω (ω_n) — энергия падающего (рассеянного) фотона, $\omega \geq I_{1s}$, I_{1s} — энергия порога ионизации $1s$ -оболочки иона и x (ε) — энергия электрона сплошного спектра промежуточного (конечного) состояния рассеяния. Учет возбужденных состояний дискретного спектра энергий — предмет отдельного рассмотрения.

2.1. Амплитуда A_M

Амплитуда вероятности перехода по каналу расщепления (2) в третьем порядке (по постоянной тонкой структуры) нерелятивистской квантовой теории возмущений принимает вид (рис. 1а)

$$A_M = \sum_{M'=-1,0,1} \int_0^\infty dx \frac{\langle 0 | \hat{R} | \Phi \rangle \langle \Phi | \hat{C} | X \rangle}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}}, \quad (4)$$

$$|0\rangle = |0\rangle \otimes \hat{a}_\omega^+ |0_{ph}\rangle, \quad (5)$$

$$|\Phi\rangle = |1sxp ({}^1P_1), M'\rangle \otimes |0_{ph}\rangle, \quad (6)$$

$$|X\rangle = |1s\varepsilon p ({}^1P_1), M\rangle \otimes \hat{a}_{\omega_1}^+ \hat{a}_{\omega_2}^+ |0_{ph}\rangle, \quad (7)$$

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{m=1}^N (\hat{p}_m \cdot \hat{A}_m), \quad (8)$$

$$\hat{C} = \frac{1}{2c^2} \sum_{m=1}^N (\hat{A}_m \cdot \hat{A}_m), \quad (9)$$

$$\hat{A}_m = \sum_k \sum_{\rho=1,2} \mathbf{e}_{k\rho} \left(\hat{a}_{k\rho}^+ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_m)} + \hat{a}_{k\rho}^- e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_m)} \right). \quad (10)$$

В (4)–(10) определены полные волновые функции начального ($|0\rangle$), промежуточного ($|\Phi\rangle$) и конечного ($|X\rangle$) состояний рассеяния в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока, M' (M) — проекция полного момента промежуточного (конечного) состояния системы «ион \otimes электрон», $|0_{ph}\rangle$ — волновая функция фотонного вакуума квантовой электродинамики, \hat{a}^+ (\hat{a}^-) — оператор рождения (уничтожения) фотона и $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$, где Γ_{1s} —

естественная ширина распада $1s$ -вакансии атомного иона. Переход $|0\rangle \rightarrow |\Phi\rangle$ реализуется через \hat{R} -оператор радиационного поглощения, где c — скорость света в вакууме, \hat{p}_m — оператор импульса m -го электрона атомного иона, \hat{A}_m — оператор электромагнитного поля (в момент времени $t = 0$) в представлении вторичного квантования, \mathbf{r}_m — радиус-вектор m -го электрона атомного иона, $\mathbf{e}_{k\rho}(\mathbf{k})$ — вектор поляризации (волновой вектор) фотона и N — число электронов в атомном ионе. Переход $|\Phi\rangle \rightarrow |X\rangle$ реализуется через нелинейный по электромагнитному полю \hat{C} -оператор контактного взаимодействия. В данной статье \hat{C} -оператор рассмотрен вне рамок дипольного приближения с использованием разложения экспоненты по сферическим функциям (формула Рэлея). Для \hat{R} -оператора принято дипольное приближение ($\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_m)] \rightarrow 1$). В самом деле, например, при $\omega = 6.4$ кэВ отношение длины волны падающего фотона ($\lambda_\omega = 1.94 \text{ \AA}$) к среднему радиусу $1s$ -оболочки иона Ne^{8+} ($\langle r_{1s} \rangle = 0.08 \text{ \AA}$) удовлетворяет критерию применимости дипольного приближения ($\lambda_\omega / \langle r_{1s} \rangle \gg 1$). Тогда методами алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов, теории неприводимых тензорных операторов и теории неортогональных орбиталей (физическое и математическое содержание этих методов см., например, в [15] и ссылки в ней) для (4) получаем

$$A_M = \xi (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) C_M^{(1)}(\mathbf{e}_\omega) G, \quad (11)$$

где суммирование по M проведено с учетом символа Кронекера–Вейерштрасса в $3j$ -символе Вигнера:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -M' & 0 & M \end{pmatrix} = (-1)^{1-M'} \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{MM'}. \quad (12)$$

В (11) определены структуры:

$$\xi = -i \frac{2}{\sqrt{6}} \left(\frac{2\pi}{V} \right)^{3/2} \frac{\langle 1s_0 | 1s_+ \rangle}{\sqrt{\omega\omega_1\omega_2}}, \quad (13)$$

$$G = \int_0^\infty dx \cdot \Delta(x) J(x), \quad (14)$$

$$\Delta(x) = \frac{x + I_{1s}}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}}, \quad (15)$$

$$J(x) = \langle 1s_0 | \hat{r} | xp_+ \rangle \langle xp_+ | j_0(qr) | \varepsilon p_+ \rangle, \quad (16)$$

и обозначено: V — объем квантования электромагнитного поля, $\mathbf{e}_\omega(\mathbf{e}_n)$ — вектор поляризации падающего (рассеянного) фотона, $C_M^{(1)}$ — сферическая функция, $j_0(qr) = (1/qr) \sin(qr)$ — сферическая функция Бесселя первого рода порядка нуль, $q = |\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ и \mathbf{k}_n — волновые векторы рассеянных

фотонов. В (16) и далее для одноэлектронного оператора дипольного перехода использована «форма радиуса» (\hat{r}). Возможное расхождение форм радиуса и скорости в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока при сохранении аналитической структуры \hat{R} -оператора радиационного перехода в виде (8) может быть практически снято, например, учетом корреляций приближения случайных фаз с обменом. Решение этой задачи — предмет отдельного рассмотрения. Индексы «0» и «+» определены для радиальных частей волновых функций электронов, полученных решением уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока для конфигураций начального ($[0]$) и конечного ($[1s_+]$) состояний иона. Таким образом, используемый нами при построении амплитуд вероятности переходов метод неортогональных орбиталей позволяет учесть эффект радиальной релаксации волновых функций электронов в хартри-фовковском поле $1s$ -вакансии. Для (14) согласно первой обобщенной теореме о среднем для несобственного интеграла первого рода [16] имеем

$$G \cong \Delta(\varepsilon) \int_0^\infty dx J(x), \quad \varepsilon \in [0; \infty). \quad (17)$$

Аналогом преобразования (17) является широко используемое, прежде всего для качественных оценок матричных элементов оператора перехода в теории многофотонной ионизации атома (атомного иона) [17], приближение Бейба–Голда [18], где величина ε играет роль «средней частоты». Тогда, учитывая условие полноты набора промежуточных состояний перехода

$$\sum_n |np_+(r)\rangle \langle np_+(r')| + \int_0^\infty |xp_+(r)\rangle \langle xp_+(r')| dx = \delta(r-r') \quad (18)$$

и пренебрегая вкладом суммы по возбужденным состояниям дискретного спектра (np_+ , $n \geq 2$) для (11), получаем окончательно:

$$A_M = \xi \Delta(\varepsilon) \langle 1s_0 | \hat{r} j_0(qr) | \varepsilon p_+ \rangle \times (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) C_M^{(1)}(\mathbf{e}_\omega). \quad (19)$$

При построении (19) мы не учитывали вклад xp_+ -состояний сплошного спектра через j_2 -функцию Бесселя, поскольку, как показал расчет, выполнено неравенство

$$\langle 1s_0 | \hat{r} j_0(qr) | \varepsilon p_+ \rangle \gg \langle 1s_0 | \hat{r} j_2(qr) | \varepsilon p_+ \rangle. \quad (20)$$

2.2. Амплитуда B_M

Амплитуда вероятности перехода по каналу расщепления (3) принимает вид (рис. 1b)

$$B_M = \sum_{n=1,2} \int_0^\infty dx \frac{\langle 0 | \hat{C} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{R} | X \rangle}{\omega - I_{1s} - \omega_n - x + i\gamma_{1s}}, \quad (21)$$

$$\Psi_n = |1sxs(1S_0), M' = 0\rangle \otimes \hat{a}_{\omega_n}^+ |0_{ph}\rangle. \quad (22)$$

Проводя аналогичные предыдущим построения, получаем

$$B_M = -2i\xi (Q_{12} + Q_{21}), \quad (23)$$

$$Q_{12} = \sqrt{2\varepsilon} A_1 \frac{(\mathbf{e}_\omega \cdot \mathbf{e}_1)}{\omega - I_{1s} - \omega_1 - \varepsilon + i\gamma_{1s}} C_M^{(1)}(\mathbf{e}_2), \quad (24)$$

$$A_n = \langle 1s_0 | j_0(qnr) | \overline{\varepsilon s} \rangle. \quad (25)$$

В (25) $q_n = |\mathbf{k}_\omega - \mathbf{k}_n|$, \mathbf{k}_ω — волновой вектор падающего фотона, и аналитическая структура радиальной части волновой функции электрона сплошного спектра промежуточного состояния перехода,

$$|\overline{\varepsilon s}\rangle = |\varepsilon s_+\rangle - \alpha |1s_0\rangle - \beta |1s_+\rangle, \quad (26)$$

$$\alpha = \frac{a_0 - aa_+}{1 - a^2}, \quad \beta = \frac{a_+ - aa_0}{1 - a^2}, \quad (27)$$

$$a_0 = \langle 1s_0 | \varepsilon s_+ \rangle, \quad a_+ = \langle 1s_+ | \varepsilon s_+ \rangle, \quad (28)$$

$$a = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle,$$

установлена процедурой ортогонализации по Граму–Шмидту [19] из требования выполнения равенств

$$\langle 1s_0 | \overline{\varepsilon s} \rangle = 0, \quad \langle 1s_+ | \overline{\varepsilon s} \rangle = 0. \quad (29)$$

При расчете интеграла $\langle xs_+ | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle$ в (21) для радиальных частей волновых функций электронов сплошного спектра принято приближение плоских волн: $|x\rangle \cong (2/\pi^2 x)^{1/4} \sin(r\sqrt{2x})$. Как результат, интегрирование в (21) проведено с учетом δ -функции Дирака в структуре:

$$(x - \varepsilon) \langle xs_+ | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle \cong i\sqrt{2x} \delta(x - \varepsilon), \quad (30)$$

где отброшено главное значение несобственного интеграла в смысле Коши. Выход за рамки приближения плоских волн, например, в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока существенно усложняет аналитические структуры интегралов перехода между двумя сплошными спектрами (см. [20] и ссылки в ней) и является предметом отдельного рассмотрения. При построении (23) мы не учитывали вклад xd -состояний сплошного спектра промежуточного состояния перехода $1sxd(1D_2)$

через j_2 -функцию Бесселя, поскольку, как показал расчет, выполнено неравенство

$$\langle 1s_0 | j_0(q_n r) | \varepsilon s_+ \rangle \gg \langle 1s_0 | j_2(q_n r) | \varepsilon d_+ \rangle. \quad (31)$$

Физическая интерпретация амплитуд вероятности процесса (1) в представлении диаграмм Фейнмана дана на рис. 1. Учет лишь этих диаграмм обусловлен принятым нами приближением Тамма–Данкова [21, 22]. В этом приближении в нашем случае учитываются лишь диаграммы Фейнмана с учетом числа «частиц» (фотоны, электроны, вакансии) в рассеяниях, не превышающих фиксированного значения $N_0 = 3$.

2.3. Дифференциальное сечение

Установим аналитическую структуру дифференциального сечения процесса (1). Просуммируем квадрат результирующей амплитуды вероятности процесса $(A_M + B_M)$ по проекциям полного момента конечного состояния рассеяния ($J = 1$) и усредним по проекциям полного момента начального состояния иона ($J = 0$). Учтем теорему сложения сферических функций:

$$\sum_M C_M^{(1)*}(\mathbf{e}_i) C_M^{(1)}(\mathbf{e}_j) = P_1(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j), \quad (32)$$

где «*» — символ комплексного сопряжения и P_1 — сферический ортогональный полином Лежандра первого рода первой степени ($P_1(x) = x$). Тогда, следуя «золотому правилу» Ферми, в приближении нулевой ширины распада $1s$ -вакансии ($\gamma_{1s} \rightarrow 0$) для четырехжды дифференциального сечения получаем

$$\frac{d^4\sigma}{d\omega_1 d\omega_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \equiv \sigma^{(4)} = \varphi r_0^2 \frac{\omega_1 \omega_2}{\omega} D, \quad (33)$$

$$D = \mu S^2 + \eta_1 S_1^2 + \eta_2 S_2^2 + 2\chi S_1 S_2, \quad (34)$$

$$S = \left(1 - \frac{\omega}{\omega_1 + \omega_2}\right) \langle 1s_0 | \hat{r} j_0(qr) | \varepsilon p_+ \rangle, \quad (35)$$

$$S_1 = \sqrt{2\varepsilon} \Lambda_1 / \omega_2, \quad (36)$$

$$S_2 = \sqrt{2\varepsilon} \Lambda_2 / \omega_1, \quad (37)$$

$$\varepsilon = \omega - I_{1s} - \omega_1 - \omega_2. \quad (38)$$

В (33) определены: Ω_n — пространственный угол вылета рассеянного фотона, безразмерный множитель $\varphi = (\alpha r_0 \bar{\varepsilon} / \pi^2 a_0) \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle^2$, α — постоянная тонкой структуры, r_0 — классический радиус электрона, a_0 — радиус Бора, $\bar{\varepsilon} = 27.21$ и поляризационные множители:

$$\mu = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2, \quad (39)$$

$$\eta_n = (\mathbf{e}_\omega \cdot \mathbf{e}_n)^2, \quad (40)$$

$$\chi = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) (\mathbf{e}_\omega \cdot \mathbf{e}_1) (\mathbf{e}_\omega \cdot \mathbf{e}_2). \quad (41)$$

В (34) слагаемое $2\chi S_1 S_2$ описывает внутриканальную интерференцию по B_M -амплитуде вероятности перехода при круговой замене $\omega_1 \rightarrow \omega_2$ и $\omega_2 \rightarrow \omega_1$. Интерференция амплитуд вероятности каналов расщепления (2) и (3) в приближении $\gamma_{1s} \rightarrow 0$ отсутствует, поскольку

$$\lim_{\gamma_{1s} \rightarrow 0} (A_M^* B_M + A_M B_M^*) = 0. \quad (42)$$

В дипольном приближении для \hat{C} -оператора имеем $j_0 \rightarrow 1 \Rightarrow A_n \rightarrow 0$. Как результат, амплитуда вероятности перехода B_M (рис. 1б) обращается в нуль, и мы возвращаемся к результатам работы [8]. Обращение B_M в нуль при $j_0 \rightarrow 1$ ($j_n \rightarrow 0$, $n \geq 1$) воспроизводит известный результат теории однократного нерезонансного комптоновского рассеяния фотона атомом (атомным ионом) [9].

Сечение (33) представляет собой общее выражение для любых схем эксперимента с линейно-поляризованными падающим (ω) и рассеянными (ω_n) фотонами. Как и в работе [8], ограничимся (простейшим) случаем аксиально-симметричного (относительно волнового вектора падающего фотона) вылета рассеянных фотонов. В этом случае $\eta_1 = \eta_2 \equiv \eta$. Тогда поляризационные множители в (39), (40) и (41) принимают вид в соответствии с тремя схемами предполагаемого эксперимента:

1. \perp -схема (векторы \mathbf{e}_ω и \mathbf{e}_n перпендикулярны плоскости рассеяния):

$$\mu^\perp = \eta^\perp = \chi^\perp = 1, \quad (43)$$

2. \parallel -схема (векторы \mathbf{e}_ω и \mathbf{e}_n параллельны плоскости рассеяния):

$$\mu^\parallel = \cos^2(2\theta), \quad (44)$$

$$\eta^\parallel = \cos^2\theta, \quad (45)$$

$$\chi^\parallel = \cos(2\theta) \cos^2\theta. \quad (46)$$

3. Неполяризованные фотоны:

$$\mu = \frac{1}{2} (\mu^\perp + \mu^\parallel), \quad (47)$$

$$\eta = \frac{1}{2} (\eta^\perp + \eta^\parallel), \quad (48)$$

$$\chi = \frac{1}{2} (\chi^\perp + \chi^\parallel). \quad (49)$$

Здесь θ — угол рассеяния (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов) и

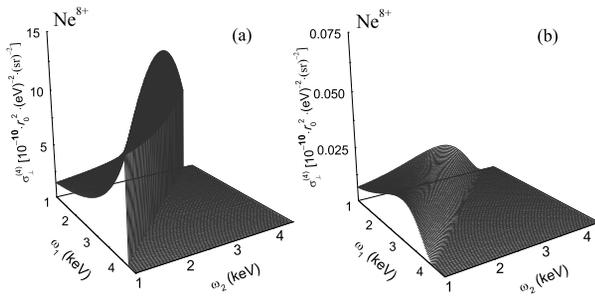


Рис. 2. Четырежды дифференциальное сечение (а — по амплитудам вероятности A_M и B_M ; б — лишь по амплитуде вероятности B_M) неупругого расщепления фотона на два фотона атомным ионом Ne^{8+} . Энергия падающего фотона $\hbar\omega = 6.4$ кэВ, энергия порога ионизации $1s^2$ -оболочки $I_{1s} = 1.195$ кэВ, $\mu = \eta = \chi = 1$ (\perp -схема предполагаемого эксперимента), $\theta = 90^\circ$

плоскость рассеяния проходит через волновые векторы фотонов. Параметр η из (48) формально математически воспроизводит параметр угловой анизотропии упругого томсоновского, аномально-дисперсионного (рэлеевского) [23, 24] и неупругого нерезонансного комптоновского [9, 10] рассеяния неполяризованного фотона электронами атома (атомного иона).

В работе [8] показано, что в дипольном приближении для \hat{C} -оператора $\sigma^{(4)} \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow \infty$ и при $\omega_1 + \omega_2 \rightarrow 0$ отсутствует так называемая «инфракрасная расходимость» [10] сечения расщепления. Выход за рамки дипольного приближения для \hat{C} -оператора не изменяет этих утверждений при дополнительном формально математическом требовании к структуре B_M -амплитуды вероятности расщепления: $\gamma_{1s} \rightarrow 0$, но $\gamma_{1s} > 0$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчета приведены на рис. 2, 3. Для параметров сечения (33) приняты значения $I_{1s} = 1.195$ кэВ (релятивистский расчет работы [8]) и $\omega = 6.4$ кэВ (энергия K_α -линии эмиссии атома железа).

Результаты расчета полного сечения расщепления (33) на рис. 2а демонстрируют симметрию сечения относительно прямой $\omega_1 = \omega_2$ на плоскости $(\omega_1; \omega_2)$. Такая симметрия обусловлена инвариантностью функций S , S_n и ε относительно круговой замены $\omega_1 \rightarrow \omega_2$ и $\omega_2 \rightarrow \omega_1$. «Обрыв» сечения на прямой $\omega_1 + \omega_2 = \omega - I_{1s}$ обусловлен требовани-

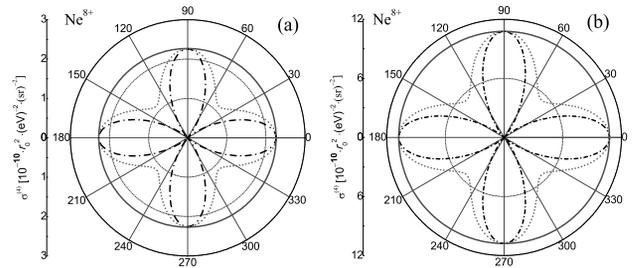


Рис. 3. Результирующие (по амплитудам вероятности A_M и B_M) индикатрисы рассеяния для атомного иона Ne^{8+} с полярным радиусом $\rho = \sigma^{(4)}$ и полярным углом θ при фиксированных значениях энергий падающего ($\hbar\omega = 6.4$ кэВ) и рассеянных ($\hbar\omega_1 = \hbar\omega_2 = 1.5$ кэВ (а) и 2.5 кэВ (б)) фотонов. Схемы предполагаемого эксперимента: \perp (сплошная кривая), \parallel (штрихпунктирная кривая), неполяризованные фотоны (пунктирная кривая)

ем положительности энергии электрона сплошного спектра $\varepsilon \geq 0 \Rightarrow \omega_1 + \omega_2 \leq \omega - I_{1s}$. Как и следовало ожидать, выход за рамки дипольного приближения для \hat{C} -оператора приводит к появлению ненулевого вклада в сечение расщепления от B_M -амплитуды вероятности перехода (рис. 2б). Однако, как в длинноволновой ($\omega_n \sim 1.5$ кэВ $\Rightarrow \lambda_n \sim 8.27 \text{ \AA}$), так и в коротковолновой ($\omega_n \sim 2.5$ кэВ $\Rightarrow \lambda_n \sim 4.96 \text{ \AA}$) областях энергий ω_n -фотонов вклад B_M -амплитуды исчезающе мал (подавляется значениями энергий ω_n -фотонов и малостью амплитуд A_n в (36) и (37)) и практически сохраняется симметрия результирующей индикатрисы рассеяния во взаимно перпендикулярных направлениях расщепления $\theta = 0^\circ, 180^\circ$ и $\theta = \pm 90^\circ$ (рис. 3). При этом заметим, что в \parallel -схеме предполагаемого эксперимента для углов рассеяния $\theta = 45^\circ, 135^\circ$ поляризационный множитель $\mu^\parallel = 0$ и ненулевое значение сечения расщепления (33) определяется лишь B_M -амплитудой вероятности перехода без вклада внутрикаанальной интерференции ($\eta^\parallel = 1/2, \chi^\parallel = 0$).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулирована нерелятивистская квантовая теория процесса неупругого расщепления фотона на два фотона атомным ионом. Результаты работы [8] дополнены выходом за рамки дипольного приближения для оператора контактного перехода и учетом следующего порядка приближения Тамма–Данкова для числа «частиц» $N_0 = 3$ в рассеяниях диаграмм Фейнмана. Теория допускает моди-

фикацию, в частности, заменой δ -функции Дирака в «золотом правиле» Ферми на спектральную функцию Гаусса–Лапласа для учета ненулевой ширины спектрального разрешения эксперимента. Переход к приближению Тамма–Данкова для числа «частиц» $N_0 = 4$ в рассеяниях диаграмм Фейнмана и, как результат, учет процессов нелокального двойного тормозного излучения сплошным спектром возбужденных состояний иона является предметом будущего развития теории. При этом диаграммы Фейнмана для амплитуд вероятности процессов «повремени–назад» (спонтанное рождение «частиц» до момента времени поглощения падающего фотона ионом) в приближении Тамма–Данкова игнорируются [21, 22]. Можно предположить (см. также [8]), что уровень спектрального разрешения современных экспериментов с рентгеновским лазером на свободных электронах (XFEL) $\Gamma_{beam} \cong 0.15\text{--}0.44$ эВ [25, 26], достигнутые значения средней яркости падающего на ион XFEL-излучения (число фотонов в лазерном импульсе) $N \cong 10^{12}\text{--}10^{14}$ [27, 28] и методы получения многозарядных атомных ионов в газовой фазе, удерживаемых в ионных «ловушках» (см., например, [29–31]), позволят проверить предсказываемые в данной работе теоретические результаты. Наконец, заметим следующее. Исследованный нами «эффект расщепления» по лидирующей амплитуде вероятности перехода (рис. 1а) носит характер локального двойного тормозного излучения сплошным спектром возбужденных состояний атомного иона и не имеет отношения к эффекту двойного тормозного излучения налетающим свободным электроном в электрическом поле атома (атомного иона) (см. [32–36] и ссылки в них).

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Mandl and T. H. R. Skyrme, Proc. R. Soc. (London) Ser. A **215**, 497 (1952).
2. M. Ram, Phys. Rev. D **12**, 2043 (1975).
3. M. B. Saddi, B. Singh, and B. S. Sandhu, Nuclear Technology **175**, 168 (2011).
4. D. Seipt and B. Kämpfer, Phys. Rev. D **85**, 1017001 (R) (2012).
5. F. Mackenroth and A. Di Piazza, Phys. Rev. Lett. **110**, 070402 (2013).
6. E. Lötstedt and U. D. Jentschura, Phys. Rev. A **87**, 033401 (2013).
7. V. Dinu and G. Torgrimsson, Phys. Rev. D **99**, 096018 (2019).
8. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, S. A. Novikov, and R. V. Koneev, J. Phys. B **54**, 155601 (2021).
9. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, New York (1985), Ch. 10, p. 419.
10. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).
11. P. Beiersdorfer, J. Phys. B **48**, 144017 (2015).
12. L. Li, L. Zhang, Z. Xu et al., Plasma Sci. Technol. **23**, 075102 (2021).
13. M. Martinez-Chicharro, V. Grinberg, J. M. Torrejon et al., Mon. Not. R. Astron. Soc. **501**, 5646 (2021).
14. P. Pradhan, D. P. Huenemoerder, R. Ignace, A. M. T. Pollock, and J. S. Nichols, Astrophys. J. **915**, 114 (2021).
15. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, Phys. Rev. A **98**, 063424 (2018).
16. G. M. Fichtenholtz, *A Course of Differential and Integral Calculus*, Vol. 2, Nauka, Moscow (1969).
17. P. Lambropoulos, Adv. Atom. Mol. Phys. **12**, 87 (1976).
18. H. B. Bebb and A. Gold, Phys. Rev. **143**, 1 (1966).
19. M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Functional Analysis*, Vol. 1, Academic Press, New York, London (1972).
20. S. A. Novikov and A. N. Hopersky, J. Phys. B **44**, 235001 (2011).
21. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York (1971).
22. A. Dreuw and M. Head-Gordon, Chem. Rev. **105**, 4009 (2005).
23. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, Phys. Rep. **140**, 75 (1986).
24. A. N. Hopersky and V. A. Yavna, *Scattering of Photons by Many-Electron Systems*, Springer, Berlin (2010).
25. V. M. Kaganer, I. Petrov, and L. Samoylova, Acta Cryst. A **77**, 1 (2021).
26. L. Wollenweber, T. R. Preston, A. Descamps et al., Rev. Sci. Instrum. **92**, 013101 (2021).

- 27.** C. Bostedt, S. Boutet, D. M. Fritz et al., *Rev. Mod. Phys.* **88**, 015007 (2016).
- 28.** K. Ueda, E. Sokell, S. Schippers et al., *J. Phys. B* **52**, 171001 (2019).
- 29.** M. A. Levine, R. E. Marrs, J. R. Henderson, D. A. Knapp, and M. B. Schneider, *Phys. Scripta T* **22**, 157 (1988).
- 30.** M. C. Simon, M. Schwarz, S. W. Epp et al., *J. Phys. B* **43**, 065003 (2010).
- 31.** E. Bulbul, A. Foster, G. V. Brown et al., *Astrophys. J.* **870**, 21 (2019).
- 32.** V. Florescu and V. Djamo, *Phys. Lett. A* **119**, 73 (1986).
- 33.** V. Ve'niard, M. Gavrilu and A. Maquet, *Phys. Rev. A* **35**, 448(R) (1987).
- 34.** A. V. Korol, *J. Phys. B* **26**, 3137 (1993).
- 35.** А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Ф. Старасе, *ЖЭТФ* **122**, 1168 (2002).
- 36.** P. A. Krachkov, R. N. Lee, and A. I. Milstein, *Phys. Rev. A* **91**, 062109 (2015).

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫХОДА ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ И $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$, ИНИЦИИРУЕМЫХ МОЩНЫМ ПИКОСЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

С. Н. Андреев^{a,b}, *В. С. Беляев*^c, *А. П. Матафонов*^c, *В. П. Тараканов*^d,
Б. В. Загреев^c, *В. П. Крайнов*^{e*}, *С. А. Муханов*^a, *А. В. Лобанов*^f

^a *Московский политехнический университет*
107023, Москва, Россия

^b *Московский педагогический государственный университет*
119991, Москва, Россия

^c *Центральный научно-исследовательский институт машиностроения*
141070, Королев, Московская обл., Россия

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

^e *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^f *АО «Научно-производственное объединение измерительной техники»*
141700, Королев, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 13 февраля 2022 г.,
после переработки 9 марта 2022 г.
Принята к публикации 12 марта 2022 г.

Представлены результаты численного моделирования по выходу перспективной ядерной реакции синтеза $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и реперной ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$, инициируемых с помощью мощного пикосекундного лазерного излучения с интенсивностью $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см². Численное моделирование взаимодействия лазерного импульса с первичной алюминиевой мишенью проводилось в двумерной xz -версии PIC-кода (particle in cell) KARAT. Моделирование было разделено на два этапа. На первом этапе вычислялся поток протонов с тыльной стороны алюминиевой мишени, на которую падал лазерный импульс. На втором этапе выполнялось моделирование реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ при взаимодействии пучка протонов с мишенью из бора. Результаты расчетов показали, что полный выход альфа-частиц равен $N_\alpha = 7.2 \cdot 10^8$, количество альфа-частиц с энергией больше 0.5 МэВ, попадающих на детектор, равно $2 \cdot 10^7$, что составляет 2.8 % от их полного выхода, при этом полный выход нейтронов составил величину $Y_n = 10^5$. Результаты численного моделирования по выходу альфа-частиц и нейтронов за импульс в реакциях $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ достаточно хорошо совпадают с экспериментальными результатами.

DOI: 10.31857/S0044451022070045
EDN: ECRYJU

1. ВВЕДЕНИЕ

Перспективность бор-водородной смеси как термоядерного топлива, обладающего важными преимуществами — малым количеством генерируемых

нейтронов с невысокой энергией и дешевизной, вот уже почти полвека обсуждается в научной печати [1, 2].

Активность исследования ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ значительно возросла после проведения экспериментальных исследований, начало которым положила работа 2005 г. [3]. В этой работе впервые в лазерной плазме был получен выход альфа-частиц в результате протекания реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$. Эксперимент был проведен на лазерной установке при

* E-mail: vpkrainov@mail.ru

интенсивности излучения $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см². Выход альфа-частиц был зафиксирован на уровне 10^3 в 1 ср.

Первыми после 2005 г. экспериментами в этом направлении были исследования на лазерной установке Pico 2000 в лаборатории LULI (Laboratoire d'Utilisation des Lasers Intenses) [4]. Установка для исследования реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ позволяет синхронизировать два лазерных пучка, фокусируя их в одной вакуумной камере. Целью работы [4] была демонстрация научного прогресса в осуществлении безнейтронного синтеза. Лазерное излучение первого лазера с энергией в импульсе 400 Дж на длине волны 0.53 мкм при длительности импульса 1.5 нс и пиковой интенсивности излучения $6 \cdot 10^{14}$ Вт/см² фокусировалось на поверхность мишени из бора и вызывало образование плазмы. Лазерное излучение второго лазера с энергией 20 Дж, длиной волны 0.53 мкм, длительностью импульса 1 пс и интенсивностью $6 \cdot 10^{18}$ Вт/см² генерировало в тонкой алюминиевой фольге быстрые протоны. Протоны взаимодействовали с ионами бора плазмы, образованной излучением первого лазера.

При оптимальной задержке между импульсами двух лазеров 1.2 нс выход альфа-частиц достигал максимального значения около 10^7 в 1 ср за лазерный импульс.

Следующим по значимости и по рекордному выходу альфа-частиц следует считать эксперименты, проведенные международным коллективом ученых из Чехии, Италии и Польши на одном из мощнейших лазеров Европы «Астерикс» [5], предназначенном для научных исследований и расположенном в Праге — PALS (Prague Asterix Laser System). В этих экспериментах был получен выход альфа-частиц в реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ около 10^9 в 1 ср за лазерный импульс. Параметры лазерного излучения в этих экспериментах: энергия импульса 500 Дж, длительность импульса порядка 0.3 нс, диаметр пятна фокусировки 80 мкм. Научная значимость этих экспериментов заключается также в том, что использовался лазер умеренной мощности (2 ТВт) и интенсивности ($3 \cdot 10^{16}$ Вт/см²). В следующих экспериментах на этой установке удалось увеличить выход альфа-частиц до 10^{10} в 1 ср за один лазерный импульс [6] за счет оптимизации мишени.

В статье [7] представлены предварительные результаты по генерации альфа-частиц с использованием пикосекундного высокоинтенсивного лазера петаваттного класса. Эксперимент проводился в Институте лазерной техники в Осаке (Япония). Лазерный импульс фокусировался на тонкой пластико-

вой фольге для генерации пучка протонов с тыльной стороны мишени на основе известного механизма TNSA (target normal sheath acceleration). Пучок протонов падал на мишень из нитрида бора, генерируя альфа-частицы в результате ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$. Генерировались альфа-частицы с энергиями 8–10 МэВ и с выходом около $5 \cdot 10^9$ в ср.

Важно отметить, что в работах [4–6] для получения максимального выхода альфа-частиц использовали предварительно созданную плазму. В статье [4] для этой цели использовалось лазерное излучение дополнительного лазера, а в статьях [5, 6] — излучение предимпульса основного лазерного импульса. Для получения максимального выхода альфа-частиц в работе [4] подбирали оптимальную временную задержку между первым лазерным импульсом и основным импульсом, а в работах [5, 6] подбирали величину и длительность предимпульса. В работе [4] показано, что при изменении длительности временной задержки между импульсом наносекундного лазера, который создает предварительную плазму, и основным пикосекундным лазерным импульсом изменяется количество альфа-частиц.

В следующей статье этих авторов [8] было показано, что в случае воздействия на мишень из бора только одного лазерного импульса с повышенной интенсивностью до уровня 10^{19} Вт/см² был зарегистрирован значительный выход альфа-частиц. В экспериментах [8] лазерное излучение (энергия 12 Дж, длина волны 1.056 мкм, длительность импульса 350 фс, интенсивность 10^{19} Вт/см²) генерировало в тонкой алюминиевой фольге быстрые протоны, которые взаимодействовали с ионами бора мишени. Таким образом, как при воздействии быстрых протонов на предварительно созданную плазму, так и при воздействии быстрых протонов на твердотельную мишень регистрируется значительное количество альфа-частиц.

Во всех перечисленных выше работах [3–8] оставался нерешенным вопрос о полном выходе альфа-частиц в результате инициирования реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$, так как регистрируются только те альфа-частицы, которые вышли либо из предварительно созданной плазмы [4–6], либо из твердотельной мишени [3, 8]. При этом нет информации, сколько альфа-частиц не смогло выйти из плазмы или из глубины мишени.

Для решения этой проблемы в работе [9] предложен новый метод измерения абсолютного выхода альфа-частиц в реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$, основанный на одновременном измерении количества нейтронов в реперной ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$.

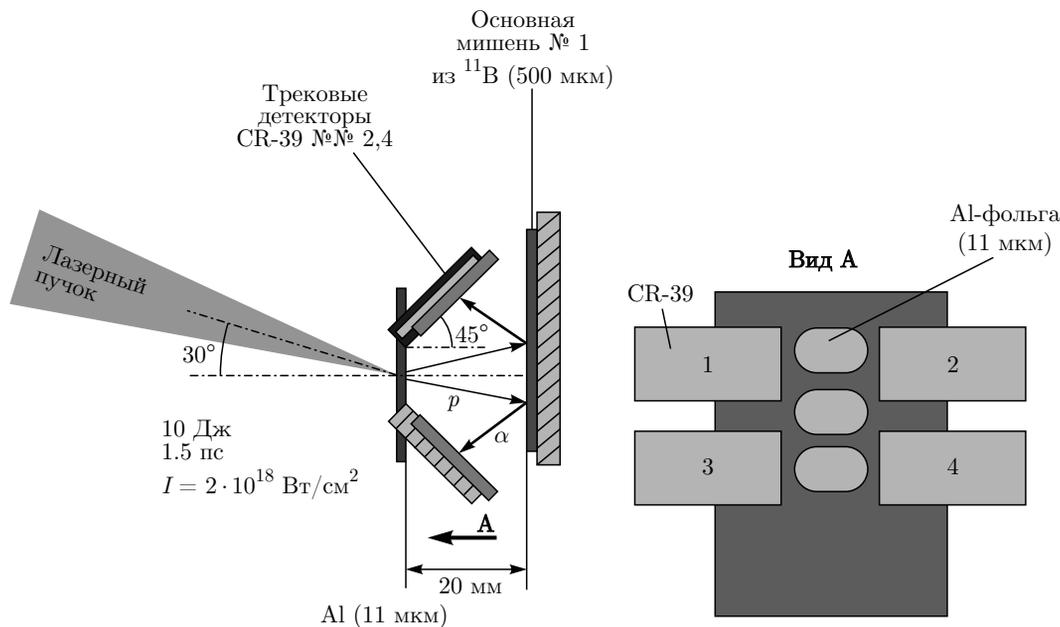


Рис. 1. Детальное изображение расположения трековых детекторов, Al-фольги и мишени из бора

В работе [10] приведены экспериментальные результаты по исследованию реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ одновременно с реперной реакцией $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ при интенсивности лазерного излучения $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см². Это позволило оценить полное количество альфа-частиц в 10^9 частиц в 4π ср.

Также необходимо отметить, что в работах [3–6, 8, 9] для анализа полученных экспериментальных результатов не использовалось численное РС-моделирование ядерной реакции синтеза $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ в мишенях из бора. Предварительные результаты РС-моделирования ядерной реакции синтеза $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ представлены только в работах [7, 10].

Кроме того, во всех представленных работах не использовалось численное РС-моделирование ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ в мишенях из бора.

Но РС-моделирование ядерных реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ исключительно важно, поскольку позволяет понять основные механизмы, связанные с генерацией быстрых протонов, альфа-частиц и нейтронов, с процессами распространения альфа-частиц в мишени из бора и позволяет адекватно интерпретировать экспериментальные результаты.

В связи с этим в настоящей работе представлены результаты РС-моделирования ядерных реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ при интенсивности лазерного излучения $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см².

2. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СХЕМЫ И РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В связи с тем, что численное моделирование ядерных реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ проводилось в соответствии со схемой экспериментов [10], в этом разделе представим краткое описание и результаты этой работы.

Эксперименты проводились на 10 ТВт пикосекундной лазерной установке. Лазерная установка имеет следующие параметры лазерного импульса: энергия до 10 Дж, длина волны 1.055 мкм, длительность 1.5 пс. Система фокусировки на основе внеосевого параболического зеркала с фокусным расстоянием 20 см обеспечивает концентрацию не менее 30 % энергии лазерного пучка в пятно диаметром 10 мкм и, соответственно, пиковую интенсивность $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см².

Генерируемое лазерное излучение установки характеризуется наличием предимпульсов двух типов: пикосекундной и наносекундной длительности. Первый предимпульс возникает за 14 нс до основного импульса, имеет длительность 1.5 пс и контраст более 10^7 по отношению к основному импульсу. Второй предимпульс является импульсом усиленной спонтанной эмиссии. Длительность второго предимпульса на полувысоте составляет 4 нс, при этом контраст более 10^8 .

Для регистрации альфа-частиц, генерируемых в результате инициирования ядерной реакции

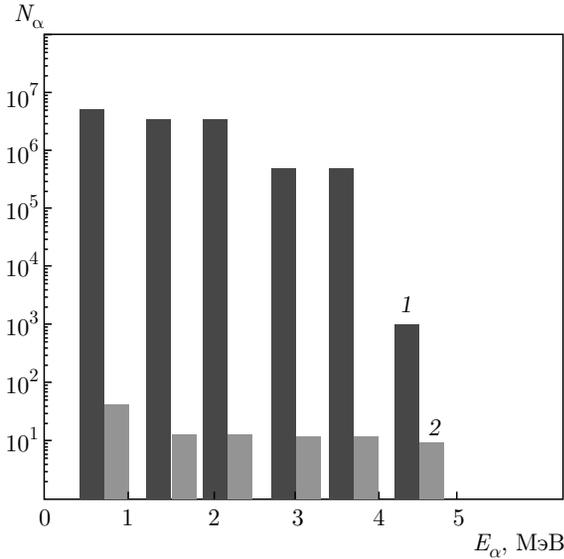


Рис. 2. Интегральный энергетический спектр альфа-частиц (1), зарегистрированных детекторами 1–4 в сравнении со спектром альфа-частиц (2), зарегистрированных фоновыми детекторами 5–8. N_α — количество альфа-частиц в 1 ср, E_α — энергия альфа-частиц

$^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$, использовались детекторы на основе трековых детекторов CR-39 с фильтрами из алюминия различной толщины. Детальное изображение расположения трековых детекторов, Al-фольги и мишени из бора представлено на рис. 1.

Для регистрации нейтронов, генерируемых в результате инициирования ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$, использовались детекторы на гелиевых счетчиках.

Интегральный энергетический спектр для альфа-частиц, зарегистрированных трековыми детекторами CR-39, можно построить, зная толщины их фильтров.

Интегральный спектр зарегистрированных альфа-частиц показан на рис. 2. Видно, что основная часть альфа-частиц имеет энергию меньше 4 МэВ.

По данным с трековых детекторов можно оценить количество альфа-частиц, генерируемых в реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$. С учетом результатов всех экспериментов было определено среднее количество альфа-частиц, равное $5 \cdot 10^6$ в ср (или $\approx 2.5 \cdot 10^7$ альфа-частиц в 2π ср, так как альфа-частицы могут выйти из мишени из бора только в направлении расположения трековых детекторов), которое выходит из мишени из бора и может быть зарегистрировано трековыми детекторами.

При проведении экспериментов с использованием мишени из бора были зарегистрированы нейтро-

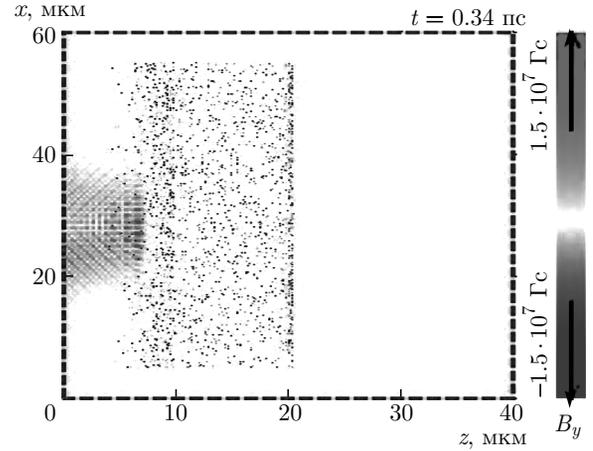


Рис. 3. (В цвете онлайн) Расчетная схема первого этапа численного эксперимента

ны в количестве около 10^5 за один лазерный импульс, генерируемые в результате инициирования ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$.

Определенный с помощью реперной ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ абсолютный выход альфа-частиц за импульс в реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ составляет для указанных параметров лазерного импульса 10^9 в 4π ср. Однако экспериментально измеренное с помощью трековых детекторов CR-39 количество альфа-частиц составил величину $2.5 \cdot 10^7$ в 2π ср. Отсюда можно сделать вывод, что трековые детекторы регистрируют только около 2.5% генерируемых альфа-частиц, а 97.5% альфа-частиц не могут выйти из объема мишени из бора.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

3.1. Постановка задачи

Численное моделирование взаимодействия лазерного импульса с алюминиевой мишенью проводилось в двумерной xz -версии PIC-кода (particle in cell) KARAT [11].

Моделирование было разделено на два этапа. На первом этапе вычислялся поток протонов с тыльной стороны алюминиевой мишени, на которую падал лазерный импульс. На втором выполнялось моделирование реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ при взаимодействии пучка протонов с мишенью из бора.

Расчеты проводились в двумерной xz -версии PIC-кода KARAT. На рис. 3 представлена расчетная схема первого этапа численного эксперимента. Раз-

мер расчетной области: 40 мкм (по оси z) на 60 мкм (по оси x). Все границы расчетной области являются прозрачными для электромагнитного излучения и макрочастиц, моделирующих электроны и ионы плазмы. При попадании макрочастицы на границы расчетной области она исключается из расчета, а ее пространственные координаты и компоненты вектора скорости фиксируются для дальнейшего анализа.

Мишень представляет собой прямоугольную область толщиной 10 мкм (по оси z) и шириной 50 мкм (по оси x), заполненную плазмой, состоящей из макрочастиц, моделирующих электроны e^- и ионы алюминия Al^+ с постоянной концентрацией $n = 10n_{cr} = 1.1 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, где $n_{cr} = 1.1 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ — критическая концентрация для длины волны 1 мкм падающего лазерного излучения. Отметим, что реальная концентрация атомов в алюминиевой мишени составляет по порядку величины $n = 100n_{cr} \approx 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Однако предварительные расчеты показали, что эта величина практически не влияет на характеристики потока ускоренных протонов, при этом очень существенно увеличивает время моделирования.

Перед мишенью располагается слой алюминиевой предплазмы толщиной 6 мкм и шириной 50 мкм, состоящий из электронов e^- и ионов алюминия Al^+ . Профиль концентрации плазмы вдоль оси z изменяется по экспоненциальному закону от величины $1.1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ на левой границе области предплазмы до $2.2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ у поверхности алюминиевой мишени. В поперечном направлении x профиль концентрации предплазмы является однородным. Расстояние по оси z от левой границы расчетной области до левой границы предплазмы составляет 4 мкм. Выбор параметров предплазмы определялся результатами гидродинамических расчетов взаимодействия с алюминиевой мишенью основного мощного импульса с учетом пикосекундного предимпульса за 14 нс до основного импульса и предимпульса усиленного спонтанного излучения (УСИ) длительностью 4 нс на полувысоте. В гидродинамической программе RAPID-SP решаются уравнения двухтемпературной гидродинамики плазмы с электронной и ионной теплопроводностями в одномерной постановке задачи для плоской симметрии [12, 13]. На тыльной поверхности мишени располагается слой толщиной 0.2 мкм и шириной 50 мкм, состоящий из электронов e^- и протонов p^+ с концентрацией $n = 1.1 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Расстояние по оси z от протонного слоя на тыльной поверхности мишени до правой границы расчетной области составляет 20 мкм.

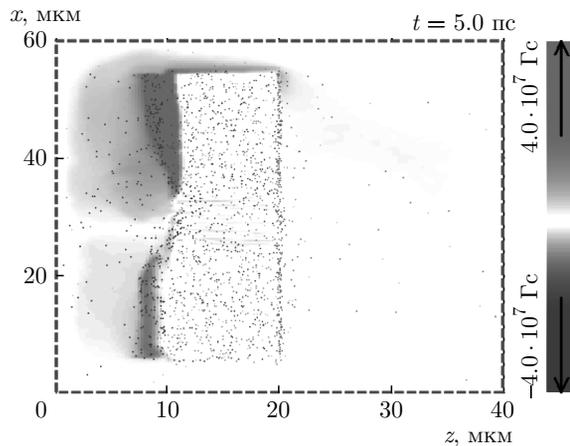


Рис. 4. (В цвете онлайн) Распределение магнитного поля в области мишени в момент времени $t = 5$ пс

Лазерный импульс с длиной волны 1 мкм, длительностью 1 пс и диаметром 10 мкм падает на мишень слева направо под углом 30° к нормали мишени, что соответствует эксперименту [10]. Интенсивность лазерного импульса составляет $2 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$. Максимум интенсивности лазерного излучения на алюминиевой мишени достигается в момент времени 2 пс. Полная длительность расчета составляет 6 пс.

3.2. Результаты моделирования и сравнение с результатами экспериментов

Лазерный импульс проходит через предплазму и отражается от алюминиевой мишени, поскольку концентрация предплазмы существенно ниже критической концентрации $n_{cr} = 1.1 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ для длины волны 1 мкм падающего лазерного излучения. Электроны предплазмы, совершая сложные колебательные движения в поле лазерного импульса, приобретают составляющую скорости в положительном направлении оси z . Эти «горячие» электроны проходят сквозь мишень и формируют вблизи ее тыльной поверхности электростатическое поле, в котором происходит ускорение протонов, находящихся на ней. Амплитуда электростатического поля может достигать величины около $E = 0.5 \cdot 10^{10} \text{ В/см}$, что позволяет протонам приобрести энергию до 4.2 МэВ.

Интересно, что при движении горячих электронов в мишени в ней формируются «вмороженные» магнитные поля с амплитудой, достигающей максимального значения $B = 1.2 \cdot 10^8 \text{ Гс}$ при $t = 2.4$ пс и медленно уменьшающейся в течение нескольких пикосекунд после окончания действия лазерного им-

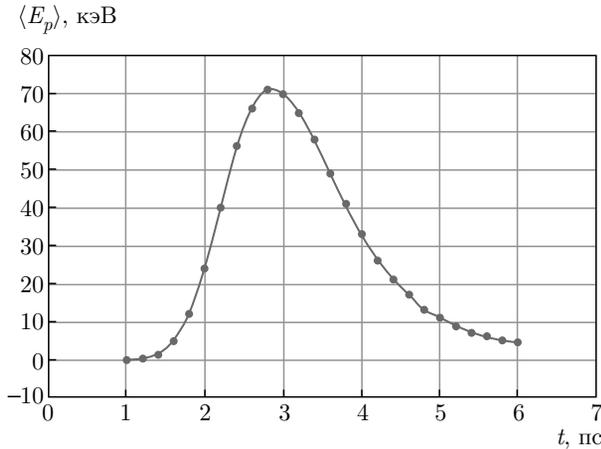


Рис. 5. Средняя кинетическая энергия протонов в зависимости от времени

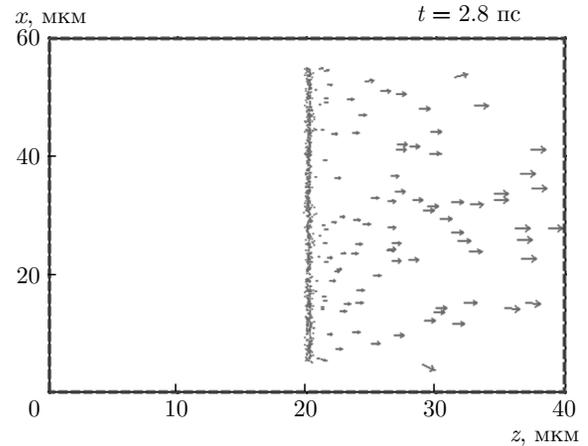


Рис. 6. Пространственное распределение скоростей протонов в момент времени $t = 2.8$ пс

пульса. На рис. 4 в качестве примера показано распределение магнитного поля в момент времени $t = 5$ пс, амплитуда которого в области предплазмы составляет $B = 2.6 \cdot 10^7$ Гс. То есть спустя 2.6 пс после достижения максимума амплитуда «вмороженного» магнитного поля уменьшилась всего в 4.6 раза, оставаясь в области значений десятков мегагауссов. На рис. 4 отчетливо видны магнитные «трубки» разной полярности (синие и красные области), формирующиеся в области воздействия лазерного импульса на алюминиевую мишень и проходящие сквозь всю ее толщину. Полученные в расчете величины магнитного поля близки к значениям, экспериментально измеренным в работе [14].

Отметим, что, как показано в работе [15], применение даже простейшей модели перезамыкания силовых линий магнитного поля к задаче взаимодействия сильного магнитного поля с потоком заряженных частиц обуславливает целесообразность и перспективность применения и развития методов теории перезамыкания применительно к формированию узконаправленных плазменных потоков. Важность и широта такой задачи фундаментального характера требует специального исследования, которое выходит за рамки данной статьи.

Зависимость от времени средней кинетической энергии протонов, находившихся на тыльной поверхности мишени, приводится на рис. 5. Отметим, что усреднение проводилось по всем протонам — как ускоренным под действием электростатического поля и покинувшим мишень, так и тем, которые не приобрели кинетическую энергию, оставаясь на тыльной поверхности мишени.

Как видно из графика на рис. 5, максимум средней кинетической энергии $\langle E_p \rangle_{max} = 71$ кэВ достигается в момент времени $t = 2.8$ пс, т. е. с запаздыванием примерно на 1 пс относительно максимума воздействия лазерного импульса на мишень.

Уменьшение средней энергии протонов при $t > 2.8$ пс связано с двумя факторами: во-первых, с тем, что протоны с наибольшей энергией в первую очередь покидают расчетную область и перестают давать вклад в среднюю энергию, и во-вторых, с тем, что потенциал электростатического поля, возникающего на тыльной поверхности мишени, со временем уменьшается, что приводит к уменьшению эффективности ускорения оставшихся протонов на тыльной поверхности.

На рис. 6 показано пространственное распределение скоростей небольшой случайной выборки протонов, обозначенных красными стрелками, в момент времени $t = 2.8$ пс. Длина стрелки характеризует величину скорости, а направление стрелки указывает направление вектора скорости протона.

Прежде всего стоит отметить тот факт, что ускорение протонов происходит на всей тыльной поверхности, длина которой в нашем расчете в 6 раз больше диаметра $d = 10$ мкм «пятна» лазерного импульса на фронтальной поверхности мишени. Это происходит из-за того, что «горячие» электроны, создающие ускоряющее электростатическое поле на тыльной поверхности мишени, совершая колебательные движения и многократно проходя сквозь мишень и обратно, покрывают своими траекториями практически весь объем мишени, а не только область лазерного воздействия [16].

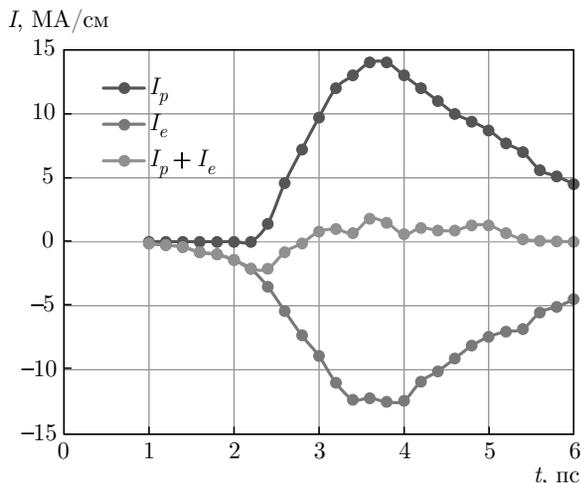


Рис. 7. (В цвете онлайн) Ток электронов (I_e), ток протонов (I_p) и суммарный ток ($I_p + I_e$) на правую границу расчетной области в зависимости от времени t

Как видно из рис. 6, большинство протонов движутся перпендикулярно мишени в положительном направлении оси z , а угол разлета пучка не превышает 15° – 20° , что соответствует экспериментальным результатам, полученным в работе [17]. Однако часть протонов, в основном вблизи верхнего и нижнего краев мишени, имеют составляющие скорости и вдоль оси x . Наличие подобного краевого эффекта приводит к тому, что не все протоны достигают правой границы расчетной области, а попадают на ее верхнюю и нижнюю границы. Долю таких частиц можно уменьшить за счет увеличения длины мишени вдоль оси x , однако это приводит к существенно увеличению длительности расчета.

Для выяснения особенностей формирования пучка протонов, ускоренных с тыльной поверхности алюминиевой мишени, были вычислены токи электронов и протонов, падающих на правую границу расчетной области. На рис. 7 приводятся зависимости от времени тока электронов и протонов, а также их суммы.

Максимальная величина протонного тока достигает значения $I_p = 14$ МА/см (размерность тока МА/см определяется двумерностью постановки задачи) в момент времени $t = 3.8$ пс, в этот же момент максимален и электронный ток $I_e = -12.5$ МА/см. Суммарный ток на правую границу расчетной области $I_p + I_e$ в начале лазерного воздействия принимает отрицательные значения (в токе преобладают электроны), затем меняет знак (преобладает протонный ток), однако при $t > 5.4$ пс суммарный ток практически обращается в нуль, что свидетель-

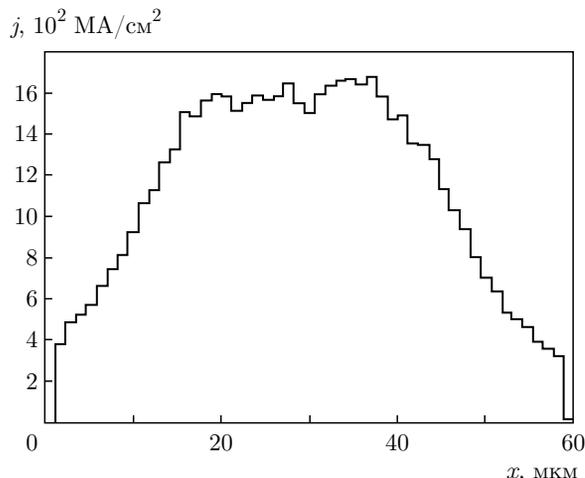


Рис. 8. Линейная плотность j тока протонов на правую границу расчетной области в зависимости от координаты x

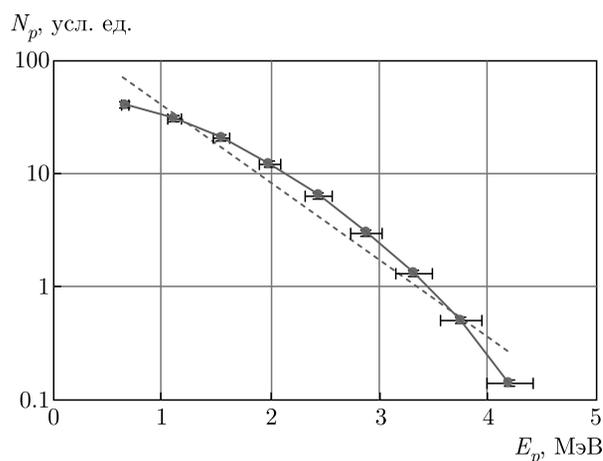


Рис. 9. Интегральный спектр протонов, падающих на правую границу расчетной области. Пунктирной прямой показана экспоненциальная аппроксимация спектра с эффективной температурой $T_p = 620 \pm 100$ кэВ

ствует о достижении состояния квазинейтральности пучка заряженных частиц, ускоренных в результате лазерного воздействия на мишень.

На рис. 21 приводится линейная плотность тока протонов, падающих на правую границу расчетной области, в единицах МА/см² как функция координаты x . Из графика можно определить поперечный размер протонного пучка, падающего на мишень из бора, который по уровню половины амплитуды (FWHM) составляет 40 мкм.

Интегральный спектр протонов, падающих на правую границу расчетной области в интервале времени от $t = 2.5$ пс до $t = 6$ пс, приводится на рис. 30. Пунктирной прямой на графике показана экспоненциальная аппроксимация спектра.

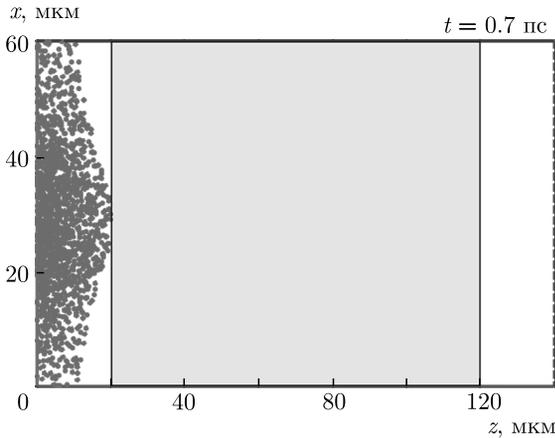


Рис. 10. (В цвете онлайн) Расчетная схема второго этапа численного эксперимента: серая область — мишень из бора, красные точки — пучок протонов, падающий на мишень

Для вычисления абсолютного значения числа протонов использовалось допущение о том, что поперечный размер протонного пучка по оси y совпадает с поперечным размером по оси x и составляет 40 мкм. Количество быстрых протонов с энергией $E_p > 1$ МэВ, полученное в расчете, составляет $N_p = 5.4 \cdot 10^{11}$, а эффективная температура быстрых протонов равна $T_p = 620 \pm 100$ кэВ. Полученные значения количества быстрых протонов и эффективной температуры довольно близки к экспериментальным значениям [9], равным соответственно $N_p = 5 \cdot 10^{11}$ и $T_p = 450$ кэВ.

На втором этапе выполнялось моделирование ядерных реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ при взаимодействии пучка протонов с мишенью из бора. Использовался новый программный блок, включенный в PIC-код KARAT.

Расчетная схема второго этапа численного эксперимента показана на рис. 32. Размер расчетной области вдоль оси x совпадал с размером расчетной области PIC-модели и составлял 60 мкм, а вдоль оси z размер расчетной области составлял 140 мкм.

Для задания пучка протонов в блоке моделирования ядерных реакций использовался массив данных, полученный на первом этапе моделирования для протонов, достигших правой границы. Для каждого протона фиксировались x -координата, компоненты скорости (V_x, V_z) и момент времени попадания на границу. На втором этапе протоны с параметрами, взятыми из указанного массива, запускались с левой границы ($z = 0$) новой расчетной области, с временным сдвигом, соответствующим приходу первого протона на правую границу на первом этапе.

Мишень из бора в виде прямоугольника с размерами 60 мкм вдоль оси x и 100 мкм вдоль оси z моделировалась электрически нейтральной средой с заданной концентрацией атомов бора $n = 2.5 \cdot 10^{23}$ см $^{-3}$. На каждом шаге по времени для каждого протона, движущегося со скоростью V_p в области мишени, по заданным сечениям $\sigma(E_p)$ реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ [9] и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ [9], рассчитывались вероятности $P = \sigma(E_p) V_p n \Delta t$ актов соответствующих реакций и сравнивались со случайным числом $\xi \leq 1$. Если вероятность P оказывалась меньше ξ , то осуществлялся переход к следующему протону, в противном случае запускалась процедура, в результате которой протон исключался из расчета, а из точки его нахождения запускались альфа-частицы с энергиями 0.9 МэВ и 3.9 МэВ [18] в случае реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ (направление запуска альфа-частиц определялось из закона сохранения импульса) или нейтрон с энергией 90 кэВ в случае реакции $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ (ядро углерода в моделировании не участвовало). Полный выход нейтронов определялся возрастающим итогом по количеству прошедших реакций.

Ионизационные потери энергии протонов и альфа-частиц при их движении по своей траектории l в мишени из бора учитывались по известной формуле Бете – Блоха:

$$\frac{dE_{p,\alpha}}{dl} = - \frac{2\pi n Z^2 e^4}{dE_{p,\alpha}} \frac{M_{p,\alpha}}{m_e} \ln \frac{4m_e E_{p,\alpha}}{M_{p,\alpha} l}, \quad (1)$$

где $E_{p,\alpha}$ — энергия протона или альфа-частицы, $M_{p,\alpha}$ и Z — их масса и заряд, m_e и e — масса и заряд электрона, I [эВ] = $13.5 Z_B$ — средний потенциал ионизации атома бора, $Z_B = 5$. Длительность расчета в блоке моделирования ядерных реакций составила 24 пс. В результате проведенных расчетов определено полное количество альфа-частиц $N_\alpha = 7.2 \cdot 10^8$, возникающих при взаимодействии пучка протонов с мишенью из бора, которое достаточно близко к экспериментальному значению абсолютного выхода альфа-частиц 10^9 в 4π ср [10].

На рис. 11 приводится распределение альфа-частиц в расчетной области в различные моменты времени: $t = 4$ пс и $t = 24$ пс, соответствующий окончанию расчета. Как видно из рис. 11, большинство альфа-частиц остаются в глубине мишени. Лишь малая часть альфа-частиц, находящихся вблизи поверхности мишени, может покинуть ее и попасть на трековые детекторы. Отметим, что все нейтроны, возникшие в результате реакции $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ к моменту времени $t = 24$ пс, покинули мишень и расчетную область.

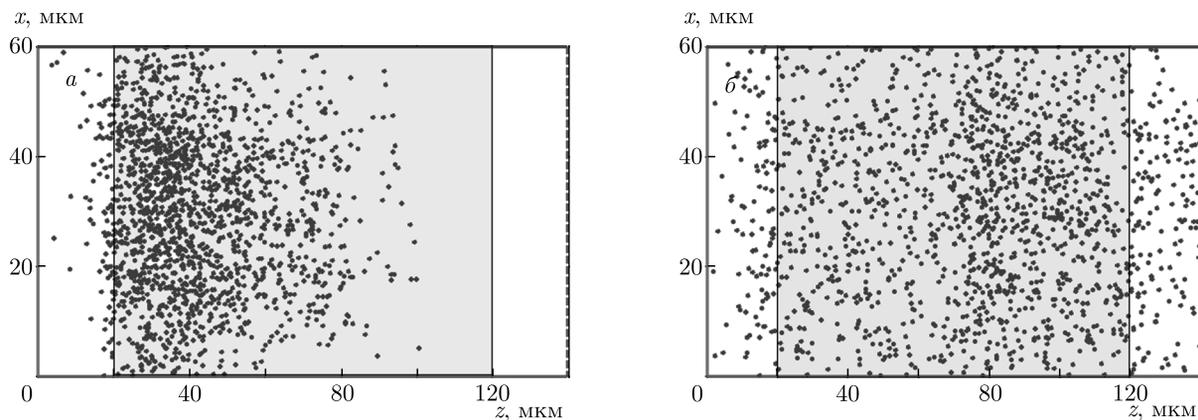


Рис. 11. (В цвете онлайн) Распределение альфа-частиц (фиолетовые точки) в расчетной области в различные моменты времени: $t = 4$ пс (а), 24 пс (б). Серая область — мишень из бора

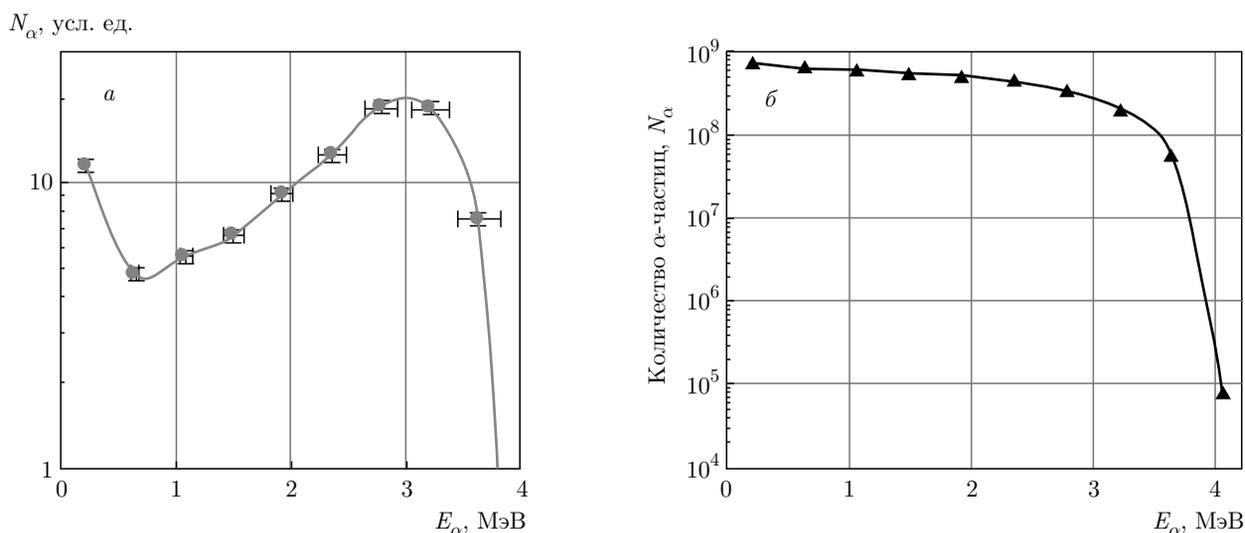


Рис. 12. Дифференциальный (а) и интегральный (б) энергетические спектры альфа-частиц, достигших левой границы расчетной области

Для того чтобы оценить число альфа-частиц, которые могут быть зарегистрированы с помощью трековых детекторов, определялось количество альфа-частиц с энергией $E_\alpha > 0.5$ МэВ, покинувших мишень и попавших на левую границу расчетной области (это предположение соответствует схеме эксперимента, а также учитывает чувствительность трековых детекторов CR-39 в работе [10]). Количество таких альфа-частиц составило $2 \cdot 10^7$, т.е. около 2.8% от полного количества альфа-частиц. Полученная в расчете величина подтверждает экспериментальный вывод о том, что трековые детекторы регистрируют не более 2.5% генерируемых альфа-частиц в π стерадиан в сторону размещения трековых детекторов [10].

Дифференциальный энергетический спектр альфа-частиц, достигших левой границы расчетной области, приводится на рис. 12а. Дифференциальный спектр имеет локальный максимум при энергии $E_\alpha = 3$ МэВ, который соответствует альфа-частицам с энергией 3.9 МэВ, испущенным на глубине около 18 мкм от поверхности мишени (см. рис. 11а). Именно на этом расстоянии протоны с энергией 1 МэВ на поверхности мишени в результате ионизационных потерь будут иметь энергию $E_p = 0.6$ МэВ, резонансную для сечения реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ [9]. Интегральный энергетический спектр альфа-частиц показан на графике рис. 12б. Его форма хорошо соответствует экспериментальному спектру альфа-частиц, приведенному на рис. 2. От-

личие в абсолютных значениях альфа-частиц в расчетном и экспериментальном спектрах объясняется тем, что трековые детекторы регистрируют не более 3% генерируемых альфа-частиц, как упоминалось выше. Расчетный полный выход нейтронов в результате реакции $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ составил $N_n = 10^5$, что совпадает с величиной полного выхода нейтронов, полученной в эксперименте [10]. Таким образом, проведенный расчет подтверждает вывод о том, что на каждый нейтрон, зарегистрированный в эксперименте, приходится порядка 10^4 альфа-частиц, появившихся в результате реакции $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$, при этом не более 2.5% от общего количества альфа-частиц способны покинуть мишень из бора и попасть на трековые детекторы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное моделирование выхода перспективной ядерной реакции синтеза $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и реперной ядерной реакции $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$, инициируемых с помощью мощного пикосекундного лазерного излучения с интенсивностью $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см². Численное моделирование взаимодействия лазерного импульса с первичной алюминиевой мишенью проводилось в двумерной xz -версии PIC-кода KARAT. Моделирование было разделено на два этапа. На первом этапе вычислялся поток протонов с тыльной стороны алюминиевой мишени, на которую падал лазерный импульс. На втором выполнялось моделирование реакций $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ при взаимодействии пучка протонов с мишенью из бора. Результаты расчетов показали следующее.

- При воздействии лазерного импульса на мишень в ней формируются «вмороженные» магнитные поля с амплитудой до $1.2 \cdot 10^8$ Гс, а на тыльной поверхности мишени возникает электростатическое поле с амплитудой до $0.5 \cdot 10^{10}$ В/см.
- Количество быстрых протонов с энергией, превышающей 1 МэВ, составляет $5.4 \cdot 10^{11}$ шт., максимальная энергия протонов в пучке достигает 4.2 МэВ.
- Угол разлета протонов в пучке не превышает 15° – 20° .
- Суммарный заряд пучка близок к нулю, т.е. пучок является квазинейтральным.
- Полный выход альфа-частиц равен $N_\alpha = 7.2 \cdot 10^8$, количество альфа-частиц с энергией большей 0.5 МэВ, попадающих на детектор, равно $2 \cdot 10^7$, что составляет 2.8% от их полного выхода.
- Полный выход нейтронов $Y_n = 10^5$.

Результаты численного моделирования по выходу альфа-частиц и нейтронов за импульс в реакциях $^{11}\text{B}(p, 3\alpha)$ и $^{11}\text{B}(p, n)\text{C}^{11}$ достаточно хорошо совпадают с экспериментальными результатами, полученными при интенсивности лазерного излучения $2 \cdot 10^{18}$ Вт/см².

Благодарности. За организацию и проведение полезных дискуссий по теме исследований авторы выражают благодарность программе 10 «Экспериментальная лабораторная астрофизика и геофизика» НЦФМ.

Финансирование. Работа выполнена в рамках темы государственного задания МПГУ «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике» при поддержке Министерства просвещения РФ (номер государственной регистрации: АААА-А20-120061890084-9) и при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-29-21021). Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (№ FSMG-2021-0005).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, Наука, Москва (1999), т. 2.
2. А. Б. Кукушкин, В. И. Коган, *Физика плазмы* **5**, 1264 (1979) [Sov. J. Plasma Phys. **5**, 708 (1979)].
3. V. S. Belyaev, A. P. Matafonov, V. I. Vinogradov, V. P. Krainov, V. S. Lisitsa, A. S. Roussetski, G. N. Ignatyev, and V. P. Andrianov, *Phys. Rev. E* **72**, 026406 (2005).
4. C. Labaune, C. Baccou, S. Depierreux, C. Goyon, G. Loisel, V. Yahia, and J. Rafelski, *Nature Commun.* **4**, 2506 (2013).
5. A. Picciotto, D. Margarone, A. Velyhan, P. Bellutti, J. Krasa, A. Szydlowsky, G. Bertuccio, Y. Shi, A. Mangione, J. Prokupek, A. Malinowska, E. Krousky, J. Ullschmied, L. Laska, M. Kucharik, and G. Korn, *Phys. Rev. X* **4**, 031030 (2014).
6. L. Giuffrida, F. Belloni, D. Margarone, G. Petringa, G. Milluzzo, V. Scuderi, A. Velyhan, M. Rosinski, A. Picciotto, M. Kucharik, J. Dostal, R. Dudzak, J. Krasa, V. Istokskaja, R. Catalano, S. Tudisco et al., *Phys. Rev. E* **101**, 013204 (2020).
7. D. Margarone, A. Morace, J. Bonvalet, Y. Abe, V. Kantarelou, D. Raffestin, L. Giuffrida, P. Nicolai, M. Tosca, A. Picciotto, G. Petringa, G. A. P. Cirrone,

- Y. Fukuda, Y. Kuramitsu, H. Nabara, Y. Arikawa et al., *Front. Phys.* **8**, 343 (2020).
8. С. Вассоу, С. Депьерреу, В. Яхия, С. Невилл, С. Гойон, Р. Де Ангелис, Ф. Консоли, Ж. Е. Дукрет, Г. Буту, Ж. Рафелски, и С. Лобаун, *Laser Particle Beams* **33**, 117 (2015).
 9. В. С. Беляев, А. П. Матафонов, В. П. Крайнов, А. Ю. Кедров, Б. В. Загреев, А. С. Русецкий, Н. Г. Борисенко, А. И. Громов, А. В. Лобанов, В. С. Лисица, *ЯФ* **83**, 370 (2020) [*Phys. Atom. Nucl.* **83**, 641 (2020)].
 10. В. С. Беляев, А. П. Матафонов, С. Н. Андреев, В. П. Тараканов, В. П. Крайнов, В. С. Лисица, А. Ю. Кедров, Б. В. Загреев, А. С. Русецкий, Н. Г. Борисенко, А. И. Громов, А. В. Лобанов, *ЯФ* **85**, 34 (2022).
 11. V. P. Tarakanov, *EPJ Web Conf.* **149**, 04024 (2017).
 12. N. N. Demchenko and V. B. Rozanov, *ECLIM 2002*, *Proc. SPIE* **5228**, 427 (2003).
 13. Н. Н. Демченко, С. Ю. Гуськов, В. Б. Розанов, А. И. Громов, В. С. Беляев, Д. В. Ковков, А. В. Лобанов, А. Ю. Кедров, А. П. Матафонов, В. П. Крайнов, *ЖЭТФ* **155**, 204 (2019).
 14. В. С. Беляев, В. И. Виноградов, А. С. Курилов, А. П. Матафонов и др., *ЖЭТФ* **126**, 819 (2004).
 15. В. С. Беляев, Б. В. Загреев, А. Ю. Кедров, А. Г. Кольчугин, В. П. Крайнов, А. П. Матафонов, *ЖЭТФ* **160**, 474 (2021).
 16. S. N. Andreev and V. P. Tarakanov, *Plasma Phys. Rep.* **35**, 1013 (2009).
 17. V. Belyaev and A. Matafonov, *Acta Technica* **56**, Special issue, T438 (2011).
 18. S. Stave, M. W. Ahmed, R. H. France III, S. S. Henshaw, B. Müller, B. A. Perdue, R. M. Prior, M. C. Spraker, and H. R. Weller, *Phys. Lett. B* **696**, 26 (2011).

ТЕНЗОР ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА МИНКОВСКОГО В НЕЛИНЕЙНОЙ ОПТИКЕ СРЕД С НЕЛОКАЛЬНОСТЬЮ ОПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА

*П. С. Рыжиков**, *В. А. Макаров*

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

Поступила в редакцию 26 февраля 2022 г.,

после переработки 12 марта 2022 г.

Принята к публикации 14 марта 2022 г.

Из уравнений Максвелла, записанных для напряженностей и индукций электрического и магнитного полей в непоглощающей нелинейной среде произвольной симметрии, проявляющей нелокальность оптического отклика, и соотношений внутренней симметрии тензоров, описывающих локальный и нелокальный отклики такой среды, получены аналитические выражения для плотностей энергии и импульса и плотностей потоков энергии и импульса электромагнитного поля. Найденные выражения образуют единый тензор энергии-импульса, соответствующий тензору энергии-импульса Минковского.

DOI: 10.31857/S0044451022070057

EDN: EDDOWV

1. ВВЕДЕНИЕ

Законы сохранения энергии и импульса играют важную роль в становлении различных разделов физики [1]. В нелинейной оптике, в частности, закон сохранения энергии используется для получения дополнительных соотношений, связывающих компоненты тензоров локальных и нелокальных оптических восприимчивостей в среде без диссипации [2–4], а закон сохранения импульса тесно связан с условием синхронизма волновых векторов взаимодействующих волн [2, 5–8]. Математические формулировки этих законов задают соответственно связь плотности энергии с плотностью потока энергии и плотности импульса с плотностью потока импульса. Формулы для этих величин хорошо известны в линейной электродинамике сред с пространственной и временной дисперсией [9–13], а также в оптике нелинейных сред без дисперсии [14]. Возникший в последнее время интерес к особенностям распространения структурированного света, в котором интенсивность и параметры поляризации падающего излучения сложным образом меняются в плоско-

сти поперечного сечения пучка, ставит задачу нахождения аналитических выражений для плотностей энергии и импульса и плотностей потоков энергии и импульса электромагнитного поля, учитывающих нелокальный характер нелинейного оптического отклика среды. При распространении света в этом случае широко проявляются эффекты зависящего от интенсивности изменения поляризации света в процессе распространения, по-разному протекающие в различных точках поперечного сечения пучка [15]. Нелокальность оптического отклика также позволяет происходить процессам, которые в силу симметрии среды не могут протекать в средах без пространственной дисперсии [16, 17].

Аналитические выражения или численные данные, получаемые в результате решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, следующие из строящейся математической модели изучаемого нелинейного оптического явления, иногда проверяются их авторами на соответствие закону сохранения энергии, очень редко на соответствие закону сохранения импульса и практически никогда на соответствие закону сохранения момента импульса. Часто эти решения находятся приближенными методами, возможность и корректность применения которых в некоторых случаях не обсуждается. Поэтому непротиворечивость получаемых результатов упомянутым выше законам сохранения

* E-mail: ryzhikov.ps14@physics.msu.ru

является убедительным аргументом в пользу создаваемой теории, важнейшим критерием ее истинности. В связи с этим, несомненно, актуально нахождение в настоящее время отсутствующих аналитических выражений для плотности энергии, плотности потока энергии, плотности импульса и плотности потока импульса электромагнитного поля в нелинейных средах, демонстрирующих нелокальность оптического отклика на внешнее световое поле. Нахождение двух последних формул также необходимо для последующего определения аналитических выражений для плотности углового момента и плотности потока углового момента, преобразование которых при распространении структурированного света интенсивно обсуждается в последнее время [18]. Нахождение компонент тензора энергии-импульса электромагнитного поля в нелокальных нелинейных средах является также небольшим, но важным шагом в построении квантовой теории взаимодействия излучения с веществом.

2. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ И ИМПУЛЬСА В ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

Считая в уравнениях Максвелла индукцию магнитного поля \mathbf{B} равной его напряженности \mathbf{H} , а индукцию электрического поля \mathbf{D} связанной с его напряженностью \mathbf{E} материальным уравнением, запишем непосредственно следующие из них равенства [12, 19–22]:

$$\mathbf{E}\partial_t\mathbf{D} + \mathbf{B}\partial_t\mathbf{V} + \operatorname{div}[\mathbf{E} \times \mathbf{B}] = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t[\mathbf{D} \times \mathbf{V}] + \mathbf{D} \times \nabla \times \mathbf{E} + \mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{B} = 0. \quad (2)$$

Из соотношений (1), (2) можно получить уравнения

$$\partial_t U + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0, \quad (3)$$

$$\partial_t g_i + \partial_j G_{ij} = 0, \quad (4)$$

отражающие законы сохранения соответственно энергии и импульса электромагнитного поля. В уравнениях (3), (4) U — плотность энергии, \mathbf{S} — вектор Пойнтинга, \mathbf{g} — плотность импульса, \hat{G} — тензор плотности потока импульса, или тензор напряжений, индексы « i » и « j » принимают значения x , y и z . Формулы (3), (4) можно записать в виде одного уравнения с помощью тензора энергии-импульса $T_{\alpha\beta}$, где индексы « α » и « β » принимают значения 0, x , y и z [23]. Его компоненты связаны с U , \mathbf{S} , \mathbf{g} и \hat{G} равенствами

$$T_{00} = U, \quad T_{i0} = S_i, \quad T_{0j} = g_j, \quad T_{ij} = G_{ij}.$$

В случае линейных сред, проявляющих нелокальность оптического отклика на внешнее световое поле, следующие из соотношений (1), (2) формулы для U , \mathbf{S} , \mathbf{g} и \hat{G} хорошо известны [9, 11–13]. Целью настоящей работы является нахождение удовлетворяющих уравнениям (3), (4) аналитических выражений для поправок $U^{(n)}$, $S_i^{(n)}$, $g_j^{(n)}$ и $G_{ij}^{(n)}$ к этим величинам, обусловленных доминирующим проявлением нелинейности n -го порядка. Каждая из них состоит из двух слагаемых,

$$U^{(n)} = U^{(n)loc} + U^{(n)nloc}, \quad S_i^{(n)} = S_i^{(n)loc} + S_i^{(n)nloc}, \\ g_j^{(n)} = g_j^{(n)loc} + g_j^{(n)nloc}, \quad G_{ij}^{(n)} = G_{ij}^{(n)loc} + G_{ij}^{(n)nloc},$$

обусловленных соответственно локальной $\chi_{ii_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}$ и нелокальной $\gamma_{ii_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}$ нелинейными восприимчивостями n -го порядка. Эти поправки позволяют записать дополнительные слагаемые в известные выражения для компонент тензора энергии-импульса в линейной среде без диссипации энергии, связанные с проявлением нелокального нелинейного оптического отклика n -го порядка по полю.

3. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ В НЕЛИНЕЙНОЙ СРЕДЕ

Электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ в среде, наиболее сильно проявляющей оптическую нелинейность n -го порядка ($n \geq 2$), определяется напряженностями полей распространяющихся в ней волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{m=1}^{n+1} \mathbf{E}^{(m)}(\mathbf{r}, t) + \text{c.c.} = \sum_{m=1}^{n+1} \tilde{\mathbf{E}}^{(m)}(\mathbf{r}, t, \omega_m) \times \\ \times \exp(-i\omega_m t + i\mathbf{k}^{(m)} \cdot \mathbf{r}) + \text{c.c.} \quad (5)$$

Здесь $\omega_{n+1} = \omega_1 + \omega_2 + \dots + \omega_n$, $\omega_{1,2,\dots,n}$ — их частоты, в общем случае не равные друг другу и не являющиеся кратными, $\mathbf{k}^{(1),(2),\dots,(n+1)}$ — волновые векторы распространяющихся волн. Частотный спектр медленно меняющихся во времени амплитуд $\tilde{\mathbf{E}}^{(m)}(\mathbf{r}, t, \omega_m)$ каждой из $n+1$ распространяющихся волн будем считать достаточно узким, обеспечивающим возможность пренебрежения частотной дисперсией среды вблизи ω_m . Действительность напряженности электрического поля приводит к равенству $\mathbf{E}^{(m)} = \mathbf{E}^{(-m)*}$.

Индукция нелинейной среды

$$\mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E} + \hat{\gamma}\nabla\mathbf{E} + \mathbf{P}^{loc} + \mathbf{P}^{nloc}, \quad (6)$$

где локальная \mathbf{P}^{loc} и нелокальная \mathbf{P}^{nloc} части нелинейной поляризации среды имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{loc,nloc}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{m=1}^{n+1} \mathbf{P}^{loc,nloc}(\omega_m, \mathbf{r}, t) + \text{c.c.} = \\ &= \sum_{m=1}^{n+1} \tilde{\mathbf{P}}^{loc,nloc}(\mathbf{r}, t, \omega_m) \times \\ &\quad \times \exp\left(-i\omega_m t + i\mathbf{k}^{(m)} \cdot \mathbf{r}\right) + \text{c.c.} \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{\gamma}$ — тензоры линейной диэлектрической проницаемости и нелокальной восприимчивости среды. Входящая в выражение (7) локальная часть $\mathbf{P}^{loc}(\omega_m)$ комплексной поляризации среды на частоте ω_m задается уравнениями [2, 7, 8, 24]

$$\begin{aligned} P_i^{loc}(\omega_m) &= \chi_{ii_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\omega_m; -\Omega_m^{(1)}, -\Omega_m^{(2)}, \omega_{n+1}) \times \\ &\quad \times E_{i_n}^{(n+1)} \prod_{k=1}^{m-1} E_{i_k}^{(k)*} \prod_{k=m+1}^n E_{i_{k-1}}^{(k)*} \quad (8) \end{aligned}$$

при $m = 1, 2, \dots, n$ и

$$P_i^{loc}(\omega_{n+1}) = \chi_{ii_1 \dots i_n}^{(n)}(\omega_{n+1}; \Omega_{n+1}^{(1)}) \prod_{k=1}^n E_{i_k}^{(k)} \quad (9)$$

при $m = n + 1$. По дважды встречающимся индексам, обозначающим декартовы координаты, здесь и далее проводится суммирование. Нелокальная часть $\mathbf{P}^{nloc}(\omega_m)$ комплексной поляризации среды на частоте ω_m в первом приближении по параметру пространственной дисперсии записывается в виде (см. работы [4, 25] и ссылки в них)

$$\begin{aligned} P_i^{nloc}(\omega_m) &= \Gamma_{ijp}(\omega_m; \omega_{n+1}) \partial_p E_j^{(n+1)} + \\ &\quad + \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) \Gamma_{ijp}(\omega_m; -\omega_s) \partial_p E_n^{(s)*} \quad (10) \end{aligned}$$

при $m = 1, 2, \dots, n$ и

$$P_i^{nloc}(\omega_{n+1}) = \sum_{m=1}^n \Gamma_{ijp}(\omega_{n+1}; \omega_m) \partial_p E_j^{(m)} \quad (11)$$

при $m = n + 1$. Здесь введены не зависящие от пространственных производных напряженности электрического поля вспомогательные тензоры

$$\begin{aligned} \Gamma_{ijk}(\omega_{n+1}, \omega_m) &= \\ &= \gamma_{ii_1 i_2 \dots i_{n-1} j k}^{(n)}(\omega_{n+1}; \Omega_m^{(1)}, \Omega_m^{(2)}, \omega_m) \times \\ &\quad \times \prod_{p=1}^{m-1} E_{i_p}^{(p)} \prod_{p=m+1}^n E_{i_{p-1}}^{(p)}, \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{ijk}(\omega_m, -\omega_s) &= \\ &= \gamma_{ii_1 \dots i_{n-1} j k}^{(n)}(\omega_m; \omega_{n+1}, -\Omega_{ms}^{(1)}, -\Omega_{ms}^{(2)}, -\Omega_{ms}^{(3)}, -\omega_s) \times \\ &\quad \times E_{i_1}^{(n+1)} \prod_{p=1}^{\min(m,s)-1} E_{i_{p+1}}^{(p)*} \prod_{p=\min(m,s)+1}^{\max(m,s)-1} E_{i_p}^{(p)*} \times \\ &\quad \times \prod_{p=\max(m,s)+1}^n E_{i_{p-1}}^{(p)*}. \quad (13) \end{aligned}$$

Индексы « m » и « s » в этих формулах принимают значения от единицы до n . В выражениях (8), (9), (12) и (13) для сокращения записи введены следующие множества частот:

$$\begin{aligned} \Omega_m^{(1)} &= (\omega_1, \dots, \omega_{m-1}), \\ \Omega_m^{(2)} &= (\omega_{m+1}, \dots, \omega_n), \\ \Omega_{ms}^{(1)} &= (\omega_1, \dots, \omega_{\min(m,s)-1}), \\ \Omega_{ms}^{(2)} &= (\omega_{\min(m,s)+1}, \dots, \omega_{\max(m,s)-1}), \\ \Omega_{ms}^{(3)} &= (\omega_{\max(m,s)+1}, \dots, \omega_n). \end{aligned} \quad (14)$$

В них элементы (частоты) строго упорядочены по возрастанию индекса. Если индекс последней частоты меньше индекса первой, то множество является пустым, а соответствующее ему произведение полей в формулах (8), (9), (12) и (13) считается равным единице. Заметим, что $\Gamma_{ijk}(\omega_m, \omega_{n+1}) = -\Gamma_{jik}^*(-\omega_{n+1}, -\omega_m)$. Вектор индукции магнитного поля имеет вид аналогичный (5):

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{m=1}^{n+1} \mathbf{B}^{(m)}(\mathbf{r}, t) + \text{c.c.} = \\ &= \sum_{m=1}^{n+1} \tilde{\mathbf{B}}^{(m)}(\mathbf{r}, t, \omega_m) \exp(-i\omega_m t + i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}). \quad (15) \end{aligned}$$

4. КОМПОНЕНТЫ ТЕНЗОРА ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА В НЕЛИНЕЙНОЙ СРЕДЕ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИЕЙ

Связывающее \mathbf{D} и \mathbf{E} материальное уравнение в нелинейной среде с пространственной дисперсией имеет достаточно сложный вид. В связи с этим при сведении выражений (1), (2) к виду (3), (4) оказывается удобным избавиться в (1) от слагаемого, содержащего $\partial_t \mathbf{D}$, переписав уравнения (1), (2) для декартовых компонент \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{B} в следующем виде:

$$\begin{aligned} \partial_t(D_i E_i) - D_i \partial_t E_i + \frac{1}{2} \partial_t(B_i^2) + \\ + \partial_i(e_{ijk} E_j B_k) = 0, \quad (16) \end{aligned}$$

$$\partial_t(e_{pki}D_kB_i) + D_k\partial_pE_k + \frac{1}{2}\partial_p(B_k^2) - \partial_k(D_kE_p + B_kB_p) = 0. \quad (17)$$

Здесь e_{pki} — тензор Леви-Чивиты, индексы « i », « j », « p » и « k » принимают значения x, y и z . При получении (4) было учтено, что $\partial_iD_i = 0$ и $\partial_iB_i = 0$.

Подставим \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{P} в (3), (4) и проведем усреднение по времени, после которого сразу видно, что $S_p^{(n)loc} = 0$, а

$$g_p^{(n)loc} = e_{pki} \langle P_k^{loc} B_i \rangle = e_{pki} \sum_{m=1}^{n+1} P_k^{loc}(\omega_m) B_i^{(m)*} + \text{c.c.} \quad (18)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по времени, а $P_k^{loc}(\omega_m)$ задается формулами (8) и (9). Из (3), (4) также следует, что полученные после усреднения по времени добавки $U^{(n)loc}$ и $G_{pk}^{(n)loc}$ удовлетворяют уравнениям

$$\partial_t U^{(n)loc} = \sum_{m=1}^{n+1} \left\{ \partial_t [P_i^{loc}(\omega_m) E_i^{(m)*}] - P_i^{loc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*} \right\} + \text{c.c.}, \quad (19)$$

$$\partial_k G_{pk}^{(n)loc} = \sum_{m=1}^{n+1} \left\{ P_k^{loc}(\omega_m) \partial_p E_k^{(m)*} - \partial_k [E_p^{(m)*} P_k^{loc}(\omega_m)] \right\} + \text{c.c.} \quad (20)$$

Для их нахождения необходимо преобразовать в этих уравнениях слагаемые $P_i^{loc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*}$ и $P_k^{loc}(\omega_m) \partial_p E_k^{(m)*}$. Это можно сделать, используя известные свойства внутренней симметрии тензора $\chi_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\omega_{n+1}; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$ в среде без диссипации, позволяющие переставлять местами его индексы вместе с соответствующей перестановкой частот [2].

Подставим формулы (8), (9) в $P_i^{loc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*}$ и $P_p^{loc}(\omega_m) \partial_k E_p^{(m)*}$, далее переобозначим в каждом из $n + 1$ слагаемых индексы таким образом, чтобы во всех слагаемых одной и той же частоте соответствовал одинаковый индекс. Далее проведем в каждом из них перестановку индексов и частот в тензоре $\hat{\chi}^{(n)}$ так, чтобы во всех слагаемых они присутствовали в одном и том же порядке. При этом получившиеся $n + 1$ слагаемых оказываются результатом дифференцирования $E_i^{(n+1)*} P_i^{loc}(\omega_{n+1})$ по времени или координатам. Благодаря симметрии тензора $\hat{\chi}^{(n)}$ при одновременной перестановке индексов и соответствующих им частот, это выражение также оказывается равным $E_i^{(m)*} P_i^{loc}(\omega_m)$

при любой частоте ω_m , что позволяет переписать $E_i^{(n+1)*} P_i^{loc}(\omega_{n+1})$ в виде суммы

$$\sum_{m=1}^{n+1} \frac{E_i^{(m)*} P_i^{loc}(\omega_m)}{n+1}.$$

В итоге имеем

$$\sum_{m=1}^{n+1} P_i^{loc}(\omega_m) \partial_{j,t} E_i^{(m)*} + \text{c.c.} = \frac{1}{n+1} \partial_{j,t} \sum_{m=1}^{n+1} E_i^{(m)*} P_i^{loc}(\omega_m) + \text{c.c.} \quad (21)$$

Соотношение (21) позволяет легко найти $U^{(n)loc}$ и $G_{ij}^{(n)loc}$ из уравнений (5), (6):

$$U^{(n)loc} = \frac{n}{n+1} \sum_{m=1}^{n+1} P_i^{loc}(\omega_m) E_i^{(m)*} + \text{c.c.}, \quad (22)$$

$$G_{pk}^{(n)loc} = \sum_{m=1}^{n+1} \left(\frac{\delta_{pk}}{n+1} P_i^{loc}(\omega_m) E_i^{(m)*} - P_k^{loc}(\omega_m) E_p^{(m)*} \right) + \text{c.c.} \quad (23)$$

Усреднение по времени выражений, полученных после подстановки \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{P} в уравнения (3) и (4), позволяет записать соотношения, которым должны удовлетворять $U^{(n)nloc}$, $S_p^{(n)nloc}$, $g_p^{(n)nloc}$ и $G_{pk}^{(n)nloc}$:

$$\begin{aligned} \partial_t U^{(n)nloc} + \partial_p S_p^{(n)nloc} &= \\ &= \sum_{m=1}^{n+1} \left\{ \partial_t [P_i^{nloc}(\omega_m) E_i^{(m)*}] - P_i^{nloc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*} \right\} + \text{c.c.}, \quad (24) \end{aligned}$$

$$\partial_t g_p^{(n)nloc} = \partial_t \sum_{m=1}^{n+1} e_{pkn} P_k^{nloc}(\omega_m) B_n^{(m)*} + \text{c.c.}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \partial_k G_{pk}^{(n)nloc} &= \sum_{m=1}^{n+1} \left\{ P_k^{nloc}(\omega_m) \partial_p E_k^{(m)*} - \partial_k [E_p^{(m)*} P_k^{nloc}(\omega_m)] \right\} + \text{c.c.} \quad (26) \end{aligned}$$

Из (25) легко получить, что

$$g_p^{(n)nloc} = \sum_{m=1}^{n+1} e_{pki} P_k^{nloc}(\omega_m) B_i^{(m)*} + \text{c.c.} \quad (27)$$

Для нахождения $U^{(n)nloc}$ и $S_i^{(n)nloc}$ преобразуем содержащее $P_i^{nloc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*}$ слагаемое в (24), в котором присутствуют как производные по времени, так

и производные по пространственным координатам. Оказывается, что его можно представить в виде

$$\sum_{m=1}^{n+1} P_i^{nloc}(\omega_m) \partial_t E_i^{(m)*} = \partial_t F + \partial_k R_k. \quad (28)$$

При этом скаляр

$$F = \frac{1}{n+1} \sum_{m=1}^{n+1} P_i^{nloc}(\omega_m) E_i^{(m)*} + \text{c.c.} \quad (29)$$

войдет в выражение для $U^{(n)loc}$, а проекция R_k вспомогательного вектора \mathbf{R} , задаваемая формулой

$$R_k = \frac{1}{n+1} \sum_{m=1}^n \left[\Gamma_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) E_j^{(m)} \partial_t E_i^{(n+1)*} + \Gamma_{ijk}(-\omega_m; -\omega_{n+1}) E_j^{(n+1)*} \partial_t E_i^{(m)} + \sum_{s=1}^n (1-\delta_{ms}) \Gamma_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) E_j^{(s)} \partial_t E_i^{(m)} \right] + \text{c.c.}, \quad (30)$$

войдет в формулу для $\mathbf{S}^{(n)loc}$. В справедливости равенства (28) можно убедиться, непосредственно подставляя (29) и (30) в (28) и далее применяя соотношения внутренней симметрии тензора $\hat{\gamma}^{(n)}$ [4]:

$$\gamma_{i_1 i_2 \dots i_n m}^{(n)}(\omega_{n+1}; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{l-1}, \omega_{l+1}, \omega_{l+2}, \dots, \omega_n, \omega_l) + \gamma_{i_n i_1 i_2 \dots i_{n-1} i m}^{(n)}(-\omega_l; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{l-1}, \omega_{l+1}, \omega_{l+2}, \dots, \omega_n, -\omega_{n+1}) = 0, \quad (31)$$

$$\gamma_{i_1 i_2 \dots i_l \dots i_n m}^{(n)}(\omega_{n+1}; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_l, \dots, \omega_{n-1}, \omega_n) + \gamma_{i_l i_1 i_2 \dots i_{l-1} i_n i_{l+1} \dots i m}^{(n)}(-\omega_l; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{l-1}, \omega_n, \omega_{l+1}, \omega_{l+2}, \dots, \omega_{n-1}, -\omega_{n+1}) + \gamma_{i_n i_1 i_2 \dots i_{l-1} i i_{l+1} \dots i m}^{(n)}(-\omega_n; \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{l-1}, -\omega_{n+1}, \omega_{l+1}, \omega_{l+2}, \dots, \omega_{n-1}, \omega_l) = 0. \quad (32)$$

В результате получаем следующие выражения для $U^{(n)loc}$ и $S_i^{(n)loc}$:

$$U^{(n)loc} = \frac{n}{n+1} \sum_{m=1}^{n+1} P_i^{nloc}(\omega_m) E_i^{(m)*} + \text{c.c.}, \quad (33)$$

$$S_k^{(n)loc} = -\frac{1}{n+1} \left\{ \sum_{m=1}^n \left[\partial_t E_i^{(n+1)*} \Gamma_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) E_j^{(m)} + \partial_t E_i^{(m)} \Gamma_{ijk}(-\omega_m; -\omega_{n+1}) E_j^{(n+1)*} + \sum_{s=1}^n (1-\delta_{ms}) \times \partial_t E_i^{(m)} \Gamma_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) E_j^{(s)} \right] + \text{c.c.} \right\}, \quad (34)$$

Для нахождения $G_{pk}^{(n)loc}$ аналогичным образом преобразуем содержащее $P_k^{nloc}(\omega_m) \partial_p E_k^{(m)*}$ слагаемое в (26). Оказывается его удается представить в виде производной от суммы двух слагаемых:

$$\sum_{m=1}^{n+1} P_k^{nloc}(\omega_m) \partial_p E_k^{(m)*} = \partial_k (\delta_{pk} F + N_{pk}). \quad (35)$$

В (35) компоненты вспомогательного тензора \hat{N} имеют вид

$$N_{pk} = \frac{1}{n+1} \sum_{m=1}^n \left[\Gamma_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) E_j^{(m)} \partial_p E_i^{(n+1)*} + \Gamma_{ijk}(-\omega_m; -\omega_{n+1}) E_j^{(n+1)*} \partial_p E_i^{(m)} + \sum_{s=1}^n (1-\delta_{ms}) \Gamma_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) E_j^{(s)} \partial_p E_i^{(m)} \right] + \text{c.c.} \quad (36)$$

В справедливости (35) также можно убедиться, подставляя (29) и (36) в (35) и далее применяя соотношения внутренней симметрии тензора $\hat{\gamma}^{(n)}$ (уравнения (31), (8)). Скаляр F и тензор N_{pk} войдут в формулу для $G_{pk}^{(n)loc}$:

$$G_{pk}^{(n)loc} = \sum_{m=1}^{n+1} \left(\frac{\delta_{pk}}{n+1} P_i^{nloc}(\omega_m) E_i^{(m)*} - P_k^{nloc}(\omega_m) E_p^{(m)*} \right) + \frac{1}{n+1} \left\{ \sum_{m=1}^n \left[\partial_p E_i^{(n+1)*} \Gamma_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) E_j^{(m)} + \partial_p E_i^{(m)} \Gamma_{ijk}(-\omega_m; -\omega_{n+1}) E_j^{(n+1)*} + \sum_{s=1}^n (1-\delta_{ms}) \times \partial_p E_i^{(m)} \Gamma_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) E_j^{(s)} \right] \right\} + \text{c.c.} \quad (37)$$

Сравнивая выражения (18) и (22) с (27) и (33), можно заметить, что плотности энергии и импульса, связанные с локальным и нелокальным нелинейными оптическими откликами среды, различаются только формой зависимости от напряженности электрического поля входящих в них компонент вектора поляризации среды. Первая сумма в выражении (37) также отличается от (23) только различием вида формул для входящих в них \mathbf{P}^{loc} и \mathbf{P}^{nloc} . Однако остальная часть выражения (37) и формула (34) являются соответственно дополнительными потоками энергии и импульса, появляющимися только в средах с нелокальным характером нелинейного оптического отклика на внешнее световое поле. Подобная ситуация имеет место и в линейных средах. В них учет нелокальности оптического отклика сводится только к замене входящих в плотности

энергии и импульса выражений для поляризации среды на более сложные выражения, учитывающие пространственную дисперсию. При этом в формулах для плотностей потоков энергии и импульса в линейных средах дополнительно возникают принципиально новые, связанные с пространственной дисперсией, слагаемые [9, 11].

5. КОМПОНЕНТЫ ТЕНЗОРА ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА В ПРИБЛИЖЕНИИ МЕДЛЕННО МЕНЯЮЩИХСЯ АМПЛИТУД ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ВОЛН

При решении многих задач нелинейной оптики используется метод медленно меняющихся амплитуд, в рамках которого амплитуды взаимодействующих волн $\tilde{\mathbf{E}}^{(m)}(\mathbf{r}, t, \omega_m)$ (см. (5)) удовлетворяют неравенствам

$$|\partial_t \tilde{\mathbf{E}}^{(m)}| \ll |\omega_m \tilde{\mathbf{E}}^{(m)}|, \quad |\partial_j \tilde{\mathbf{E}}^{(m)}| \ll |k_j^{(m)} \tilde{\mathbf{E}}^{(m)}|.$$

В этом случае имеющими более высокий порядок малости слагаемыми в формулах (27), (33), (34) и (37) можно пренебречь и переписать их с помощью медленно меняющихся амплитуд $\tilde{\mathbf{E}}^{(m)}$:

$$\begin{aligned} U^{(n)loc} &= \\ &= \frac{i n}{n+1} \sum_{m=1}^n \left[k_k^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_i^{(n+1)*} \tilde{E}_j^{(m)} - \right. \\ &- k_k^{(n+1)} \tilde{\Gamma}_{ijk}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{E}_j^{(n+1)*} + \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) \times \\ &\quad \left. \times k_k^{(s)} \tilde{\Gamma}_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{E}_j^{(s)} \right] + \text{c.c.}, \quad (38) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_k^{(n)loc} &= \\ &= -\frac{i}{n+1} \left\{ \sum_{m=1}^n \left[\omega_{n+1} \tilde{E}_i^{(n+1)*} \tilde{\Gamma}_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_j^{(m)} - \right. \right. \\ &- \omega_m \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijk}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_j^{(n+1)*} - \omega_m \tilde{E}_i^{(m)} \times \\ &\quad \left. \left. \times \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) \tilde{\Gamma}_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_j^{(s)} \right] \right\} + \text{c.c.}, \quad (39) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_p^{(n,loc)} &= \\ &= i \sum_{m=1}^n e_{pik} \left(k_l^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijl}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_j^{(m)} \tilde{B}_k^{(n+1)*} - \right. \\ &- k_l^{(n+1)} \tilde{\Gamma}_{ijl}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_j^{(n+1)*} \tilde{B}_k^{(m)} + \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) \times \\ &\quad \left. \times k_l^{(s)} \tilde{\Gamma}_{ijl}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_j^{(s)} \tilde{B}_k^{(m)} \right) + \text{c.c.}, \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{pk}^{(n,loc)} &= \\ &= i \sum_{m=1}^n \left\{ \frac{1}{n+1} \delta_{pk} \left[k_l^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijl}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_i^{(n+1)*} \tilde{E}_j^{(m)} + \right. \right. \\ &+ \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) k_l^{(s)} \tilde{\Gamma}_{ijl}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{E}_j^{(s)} - \\ &- k_l^{(n+1)} \tilde{\Gamma}_{ijl}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{E}_j^{(n+1)*} \left. \right] - \\ &- \left[k_l^{(m)} \tilde{\Gamma}_{kjl}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_p^{(n+1)*} \tilde{E}_j^{(m)} - \right. \\ &- \left(k_l^{(n+1)} \tilde{\Gamma}_{kjl}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_j^{(n+1)*} - \right. \\ &- \left. \left. \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) k_l^{(s)} \tilde{\Gamma}_{kjl}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_j^{(s)} \right) \tilde{E}_p^{(m)} \right] - \\ &- \frac{1}{n+1} \sum_{m=1}^{n+1} \left[k_p^{(n+1)} \tilde{E}_i^{(n+1)*} \tilde{\Gamma}_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m) \tilde{E}_j^{(m)} - \right. \\ &- k_p^{(m)} \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijk}^*(\omega_m; \omega_{n+1}) \tilde{E}_j^{(n+1)*} - \sum_{s=1}^n (1 - \delta_{ms}) \times \\ &\quad \left. \times k_p^{(m)} \tilde{E}_i^{(m)} \tilde{\Gamma}_{ijk}(-\omega_m; \omega_s) \tilde{E}_j^{(s)} \right] \left. \right\} + \text{c.c.} \quad (41) \end{aligned}$$

В этих формулах $\tilde{\Gamma}_{ijk}(\omega_{n+1}; \omega_m)$ и $\tilde{\Gamma}_{ijk}(-\omega_m; \omega_s)$ имеют вид соответственно (12) и (13) с точностью до замены в них E на \tilde{E} . При записи выражений (38)–(41) возможная расстройка волновых векторов $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}(\omega_{n+1}) - \mathbf{k}(\omega_1) - \mathbf{k}(\omega_2) - \dots - \mathbf{k}(\omega_n)$, часто возникающая в реальном эксперименте, считалась равной нулю. Ее учет ($\Delta \mathbf{k} \neq 0$) не вызывает принципиальных трудностей, но делает формулы (38)–(41) существенно более громоздкими.

6. ОДНО ИЗ СЛЕДСТВИЙ ПОЛУЧЕННЫХ ФОРМУЛ

Помимо энергии и импульса, важной характеристикой распространяющегося в нелинейной среде излучения является его угловой момент (момент импульса), закон изменения которого в общем случае приводит к равенству [26]

$$\partial_t J_i + \partial_j M_{ij} = \tau_i. \quad (42)$$

Здесь J_i — i -я компонента вектора плотности углового момента, M_{ij} — плотность потока углового момента, τ_i — i -я компонента вектора плотности вращательного момента, обусловленного анизотропией среды. Если последняя обладает симметрией относительно вращения вокруг некоторой оси, то компонента вектора плотности вращающего момента,

направленная вдоль этой оси, должна быть равна нулю. Поэтому в изотропной среде $\tau_i \equiv 0$. В электродинамике $J_i = e_{ijk}x_j g_k$ (x_j — координаты радиус-вектора), а $M_{ij} = e_{ikl}x_k G_{lj}$ [27, 28]. После подстановки этих выражений в (42) с учетом равенства (4) i -я компонента вектора плотности вращательного момента оказывается равной $\tau_i = e_{ikl}G_{lk}$ [20], из чего в оптике сред, не обладающих пространственной дисперсией, следует утверждение, что если тензор плотности потока импульса \hat{G} несимметричен, то угловой момент не сохраняется [29].

Тензор плотности потока импульса (37) оказывается несимметричным в изотропной гиротропной среде с пространственной дисперсией квадратичной нелинейности. Но это не означает, например, верность утверждения о несохранении углового момента при генерации суммарной частоты ($n = 2$, $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ в выписанных выше формулах). Чтобы убедиться в этом, подставим в (37) явный вид тензора $\gamma_{ijkl}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2)$:

$$\begin{aligned} \gamma_{ijkl}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) &= \gamma_1(\omega_3, \omega_1, \omega_2)\delta_{ij}\delta_{kl} + \\ &+ \gamma_2(\omega_3, \omega_1, \omega_2)\delta_{ik}\delta_{jl} + \gamma_3(\omega_3, \omega_1, \omega_2)\delta_{il}\delta_{jk}. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь $\gamma_{1,2,3}(\omega_3, \omega_1, \omega_2)$ — функции частот. С помощью полученного выражения величину τ_i можно записать в виде пространственной производной:

$$\tau_i = e_{ikl}G_{lk} = \partial_j Q_{ij},$$

где

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= \frac{1}{3}e_{ikj} \times \\ &\times \left\{ [\gamma_3(\omega_3; \omega_1, \omega_2) + \gamma_3(\omega_3; \omega_2, \omega_1)] E_k^{(3)*} E_p^{(1)} E_p^{(2)} + \right. \\ &+ [\gamma_3(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3) + \gamma_3(-\omega_1; -\omega_3, \omega_2)] E_k^{(1)} E_p^{(3)*} E_p^{(2)} + \\ &+ [\gamma_3(-\omega_2; -\omega_3, \omega_1) + \gamma_3(-\omega_2; \omega_1, -\omega_3)] E_k^{(2)} E_p^{(3)*} E_p^{(1)} \left. \right\} - \\ &- e_{ikl} \left[\gamma_2(\omega_3; \omega_1, \omega_2) E_l^{(3)*} E_j^{(1)} E_k^{(2)} + \right. \\ &+ \gamma_2(\omega_3; \omega_2, \omega_1) E_l^{(3)*} E_k^{(1)} E_j^{(2)} + \\ &+ \gamma_3(\omega_3; \omega_1, \omega_2) E_j^{(3)*} E_l^{(1)} E_k^{(2)} + \\ &+ \left. \gamma_3(\omega_3; \omega_2, \omega_1) E_j^{(3)*} E_k^{(1)} E_l^{(2)} \right] + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (44)$$

В результате уравнение (42) принимает вид

$$\partial_t J_i + \partial_j (M_{ij} - Q_{ij}) = 0,$$

т.е. угловой момент света в изотропной среде с нелокальностью квадратичного отклика, естественно, сохраняется, но формула для плотности потока углового момента оказывается более сложной,

чем в средах без пространственной дисперсии. Нахождение таких поправок для сред, демонстрирующих нелинейность более высокого порядка и обладающих симметрией относительно вращения вокруг только одной оси, достаточно сложная задача, требующая дальнейшей работы.

7. КОМПОНЕНТЫ ТЕНЗОРА ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА В СРЕДАХ С КВАДРАТИЧНОЙ И КУБИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ

В качестве примера приведем формулы (38), (39), (40) и (41) для практически важных частных случаев генерации суммарной частоты $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$, $\mathbf{k}^{(3)} = \mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)}$ ($n = 2$) и частоты $\omega_4 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3$, $\mathbf{k}^{(4)} = \mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{k}^{(3)}$ ($n = 3$), из которых легко могут быть получены соответствующие выражения для энергии, векторов потока энергии и импульса, а также тензора плотности потока импульса для других широко распространенных нелинейных оптических эффектов (генерация второй и третьей гармоник, когерентное антистоксово рассеяние света (КАРС) и др.).

При $n = 2$

$$\begin{aligned} P_i^{nloc}(\omega_3) &= \gamma_{ijlk}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) E_j^{(1)} \partial_k E_l^{(2)} + \\ &+ \gamma_{ijlk}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) E_j^{(2)} \partial_k E_l^{(1)}, \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} P_i^{nloc}(\omega_{1,2}) &= \gamma_{ijlk}^{(2)}(\omega_{1,2}; \omega_3, -\omega_{2,1}) E_j^{(3)} \partial_k E_l^{(2,1)*} + \\ &+ \gamma_{ijlk}^{(2)}(\omega_{1,2}; -\omega_{2,1}, \omega_3) E_j^{(2,1)*} \partial_k E_l^{(3)} \end{aligned} \quad (46)$$

и формулы (38)–(41) принимают вид

$$\begin{aligned} U^{(2)nloc} &= 2i \left(\gamma_{iljp}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) k_p^{(1)} + \right. \\ &+ \left. \gamma_{ijlp}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) k_p^{(2)} \right) \tilde{E}_i^{(3)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} + \text{c.c.}, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} S_k^{(2)nloc} &= -i [\omega_1 \gamma_{jik}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3) + \\ &+ \omega_2 \gamma_{jik}(-\omega_2; \omega_1, -\omega_3)] \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_i^{(3)*} + \text{c.c.}, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} g_p^{(2)nloc} &= ie_{pik} \left\{ \left[k_l^{(2)} \gamma_{ijml}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) + \right. \right. \\ &+ \left. k_l^{(1)} \gamma_{imjl}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) \right] \tilde{B}_k^{(3)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_m^{(2)} + \\ &+ \left[k_l^{(2)} \gamma_{ijml}^{(2)}(-\omega_1; -\omega_3, \omega_2) - \right. \\ &- \left. k_l^{(3)} \gamma_{imjl}^{(2)}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3) \right] \tilde{B}_k^{(1)} \tilde{E}_j^{(3)*} \tilde{E}_m^{(2)} + \\ &+ \left[k_l^{(1)} \gamma_{ijml}^{(2)}(-\omega_2; -\omega_3, \omega_1) - \right. \\ &- \left. k_l^{(3)} \gamma_{imjl}^{(2)}(-\omega_2; \omega_1, -\omega_3) \right] \times \\ &\times \left. \tilde{B}_k^{(2)} \tilde{E}_j^{(3)*} \tilde{E}_m^{(1)} \right\} + \text{c.c.}, \end{aligned} \quad (49)$$

$$\begin{aligned}
 G_{pk}^{(2)nlloc} = & i \left\{ \left[\delta_{pk} \left[\gamma_{iljm}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) k_m^{(1)} + \gamma_{ijlm}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) k_m^{(2)} \right] - \left[\gamma_{iljk}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) k_p^{(1)} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \gamma_{ijlk}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) k_p^{(2)} \right] \right\} \tilde{E}_i^{(3)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} - \left[\left(\gamma_{kijl}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) k_m^{(2)} + \gamma_{kljm}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) k_m^{(1)} \right) \times \right. \\
 & \left. \times \tilde{E}_p^{(3)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} + \left[\gamma_{kijl}^{(2)}(-\omega_1; -\omega_3, \omega_2) k_m^{(2)} - \gamma_{kljm}^{(2)}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3) k_m^{(3)} \right] \tilde{E}_j^{(3)*} \tilde{E}_p^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} + \right. \\
 & \left. + \left[\gamma_{kijl}^{(2)}(-\omega_2; -\omega_3, \omega_1) k_m^{(1)} - \gamma_{kljm}^{(2)}(-\omega_2; \omega_1, -\omega_3) k_m^{(3)} \right] \tilde{E}_j^{(3)*} \tilde{E}_l^{(1)} \tilde{E}_p^{(2)} \right\} + \text{c.c.} \quad (50)
 \end{aligned}$$

При получении формул (47), (48), (49) и (50) из соотношений (38), (39), (40) и (41) с целью достижения максимально компактной записи первых использовались симметричные соотношения (31), (8), которые в случае среды с квадратичной нелинейностью записываются в виде

$$\gamma_{ijkp}^{(2)}(\omega_3; \omega_2, \omega_1) = -\gamma_{kjip}^{(2)}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3), \quad (51)$$

$$\gamma_{ijkp}^{(2)}(\omega_3; \omega_1, \omega_2) + \gamma_{kjip}^{(2)}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_3) + \gamma_{kijp}^{(2)}(-\omega_2; -\omega_3, \omega_1) = 0. \quad (52)$$

В среде с кубической нелинейностью ($n = 3$) материальные уравнения (10) и (11), выражения для энергии, векторов потока энергии и импульса, а также тензора плотности потока импульса задаются формулами

$$\begin{aligned}
 P_i^{nlloc}(\omega_4) = & \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) E_j^{(1)} E_l^{(2)} \partial_k E_m^{(3)} + \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) E_j^{(2)} E_l^{(3)} \partial_k E_m^{(1)} + \\
 & + \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_4; \omega_3, \omega_1, \omega_2) E_j^{(3)} E_l^{(1)} \partial_k E_m^{(2)}, \quad (53)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_i^{nlloc}(\omega_{1,2,3}) = & \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_{1,2,3}; \omega_4, -\omega_{2,3,1}, -\omega_{3,1,2}) E_j^{(4)} E_l^{(2,3,1)*} \partial_k E_m^{(3,1,2)*} + \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_{1,2,3}; -\omega_{3,1,2}, \omega_4, -\omega_{2,3,1}) \times \\
 & \times E_j^{(3,1,2)*} E_l^{(4)} \partial_k E_m^{(2,3,1)*} + \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_{1,2,3}; -\omega_{2,3,1}, -\omega_{3,1,2}, \omega_4) E_j^{(2,3,1)*} E_l^{(3,1,2)*} \partial_k E_m^{(4)}, \quad (54)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 U^{(3)nlloc} = & 3i \left[\gamma_{ilmjp}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) k_p^{(1)} + \gamma_{ijmlp}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_3, \omega_2) k_p^{(2)} + \gamma_{ijlmp}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) k_p^{(3)} \right] \times \\
 & \times \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} + \text{c.c.}, \quad (55)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_k^{(3)nlloc} = & -i \left[\omega_1 \gamma_{ilmjk}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) + \omega_2 \gamma_{ijmlk}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_3, \omega_2) + \omega_3 \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) \right] \times \\
 & \times \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} + \text{c.c.}, \quad (56)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 g_p^{(3)nlloc} = & ie_{pik} \left\{ \left[\gamma_{ijlmn}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) k_n^{(3)} + \gamma_{ilmjn}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) k_n^{(1)} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \gamma_{imjln}^{(3)}(\omega_4; \omega_3, \omega_1, \omega_2) k_n^{(2)} \right] B_k^{(4)*} E_j^{(1)} E_l^{(2)} E_m^{(3)} + \left[\gamma_{ijlmn}^{(3)}(-\omega_1; -\omega_4, \omega_2, \omega_3) k_n^{(3)} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \gamma_{ilmjn}^{(3)}(-\omega_1; \omega_2, \omega_3, -\omega_4) k_n^{(4)} + \gamma_{imjln}^{(3)}(-\omega_1; \omega_3, -\omega_4, \omega_2) k_n^{(2)} \right] B_k^{(1)} E_j^{(4)*} E_l^{(2)} E_m^{(3)} + \right. \\
 & \left. + \left[\gamma_{ijlmn}^{(3)}(-\omega_2; \omega_1, -\omega_4, \omega_3) k_n^{(3)} + \gamma_{ilmjn}^{(3)}(-\omega_2; -\omega_4, \omega_3, \omega_1) k_n^{(1)} - \gamma_{imjln}^{(3)}(-\omega_2; \omega_3, \omega_1, -\omega_4) k_n^{(4)} \right] \times \right. \\
 & \left. \times B_k^{(2)} E_j^{(1)} E_l^{(4)*} E_m^{(3)} - \left[\gamma_{ijlmn}^{(3)}(-\omega_3; \omega_1, \omega_2, -\omega_4) k_n^{(4)} - \gamma_{ilmjn}^{(3)}(-\omega_3; \omega_2, -\omega_4, \omega_1) k_n^{(1)} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \gamma_{imjln}^{(3)}(-\omega_3; -\omega_4, \omega_1, \omega_2) k_n^{(2)} \right] B_k^{(3)} E_j^{(1)} E_l^{(2)} E_m^{(4)*} \right\} + \text{c.c.}, \quad (57)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{pk}^{(3)nlac} = & i \left\{ \delta_{pk} \left[\gamma_{ilmjn}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) k_n^{(1)} + \gamma_{ijmln}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_3, \omega_2) k_n^{(2)} + \gamma_{ijlmn}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) k_n^{(3)} \right] - \right. \\
& - \left[\gamma_{ilmjk}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) k_p^{(1)} + \gamma_{ijmlk}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_3, \omega_2) k_p^{(2)} + \gamma_{ijlmk}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) k_p^{(3)} \right] \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} - \\
& - \left[\gamma_{klmjn}^{(3)}(\omega_4; \omega_2, \omega_3, \omega_1) k_n^{(1)} + \gamma_{kjmln}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_3, \omega_2) k_n^{(2)} + \gamma_{kjlmn}^{(3)}(\omega_4; \omega_1, \omega_2, \omega_3) k_n^{(3)} \right] \tilde{E}_p^{(\Sigma)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} \\
& - \left[\gamma_{kmiln}^{(3)}(-\omega_1; \omega_3, -\omega_4, \omega_2) k_n^{(2)} + \gamma_{klimn}^{(3)}(-\omega_1; \omega_2, -\omega_4, \omega_3) k_n^{(3)} - \gamma_{klmin}^{(3)}(-\omega_1; \omega_2, \omega_3, -\omega_4) k_n^{(4)} \right] \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_p^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} - \\
& - \left[\gamma_{kmijn}^{(3)}(-\omega_2; \omega_3, -\omega_4, \omega_1) k_n^{(1)} + \gamma_{kijmn}^{(3)}(-\omega_2; -\omega_4, \omega_1, \omega_3) k_n^{(3)} - \gamma_{kmjin}^{(3)}(-\omega_2; \omega_3, \omega_1, -\omega_4) k_n^{(4)} \right] \times \\
& \times \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_p^{(2)} \tilde{E}_m^{(3)} - \left[\gamma_{kiljn}^{(3)}(-\omega_3; -\omega_4, \omega_2, \omega_1) k_n^{(1)} + \gamma_{kijln}^{(3)}(-\omega_3; -\omega_4, \omega_1, \omega_2) k_n^{(2)} - \right. \\
& \left. - \gamma_{kjlin}^{(3)}(-\omega_3; \omega_1, \omega_2, -\omega_4) k_n^{(4)} \right] \tilde{E}_i^{(4)*} \tilde{E}_j^{(1)} \tilde{E}_l^{(2)} \tilde{E}_p^{(3)} \Big\} + \text{c.c.} \quad (58)
\end{aligned}$$

Заметим, что подстановки $k_l^{(3)} = k_l^{(1)} + k_l^{(2)}$ в (49), (50) и $k_l^{(4)} = k_l^{(1)} + k_l^{(2)} + k_l^{(3)}$ в (57), (58) не делают эти формулы более компактными.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами получены аналитические выражения, дополняющие ранее известные формулы для плотностей энергии и импульса, а также для плотностей их потоков слагаемыми, возникающими благодаря наличию нелокальности нелинейного оптического отклика непоглощающей среды на внешнее световое поле. Эти дополнительные слагаемые позволяют обобщить на случай нелинейной среды с пространственной дисперсией формулы для компонент тензора энергии-импульса Минковского. Полученные выражения для плотности энергии и импульса отличаются от ранее известных аналогичных формул, корректных для не проявляющей нелокальность оптического отклика среды, только учетом зависимости входящей в них нелинейной поляризации от пространственных производных напряженности электрического поля. Плотность потока импульса, помимо этого отличия, включает дополнительное слагаемое, связанное с тензором, определяющим нелокальный нелинейный оптический отклик толщи среды. Подобное слагаемое также присутствует и в выражении для плотности потока энергии. Таким образом, нелокальность нелинейного оптического отклика среды приводит к возникновению дополнительных потоков энергии и импульса электромагнитного поля.

Результаты работы позволяют начать поиск связанных с пространственной дисперсией оптической нелинейности возможных дополнительных слагаемых в выражениях для плотности углового момента и его потока. Уже сейчас можно сказать, что,

например, в частном случае изотропной среды с нелокальностью квадратичного по полю оптического отклика такие слагаемые возникают.

Благодарности. Авторы благодарны К. С. Григорьеву за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, УФН **188**, 1347 (2018).
2. R. Boyd, *Nonlinear Optics*, Elsevier, Amsterdam (2020).
3. P. S. Pershan, Phys. Rev. **130**, 919 (1963).
4. P. S. Ryzhikov and V. A. Makarov, Laser Phys. Lett. **19**, 035401 (2022).
5. D. Andrews, Symmetry **12**, 1466 (2020).
6. N. Bloembergen, J. Opt. Soc. Amer. **70**, 1429 (1980).
7. С. А. Ахманов, Р. В. Хохлов, *Проблемы нелинейной оптики*, Изд-во Академии наук, Москва (1964).
8. N. Bloembergen, *Nonlinear Optics*, World Sci. Publ. (1965).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Том 8. Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
10. А. А. Рухадзе, В. П. Силин, УФН **74**, 223 (1961).
11. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов*, Наука, Москва (1965).
12. И. Н. Топтыгин, К. Левина, УФН **186**, 2 (2016).

13. Yu. A. Kirochkin and K. N. Stepanov, *ЖЭТФ* **104**, 3955 (1993).
14. S. Serulnik and Y. Ben-Aryeh, *Quantum Opt. B* **3**, 63 (1991).
15. V. A. Makarov, in *Quantum Photonics: Pioneering Advances and Emerging Applications*, ed. by R. W. Boyd, S. G. Lukishova, and V. N. Zadkov, Springer, Berlin (2019), Vol. 217, p. 317.
16. С. Н. Волков, Н. И. Коротеев, В. А. Макаров, *ЖЭТФ* **113**, 1261 (1998).
17. K. S. Grigoriev, N. Yu. Kuznetsov, E. B. Cherepet-skaya, and V. A. Makarov, *Opt. Express* **25**, 6253 (2017).
18. H. Sroor, C. Moodley, V. Rodríguez-Fajardo et al., *J. Opt. Soc. Amer. A* **38**, 1443 (2021).
19. P. W. Milonni and R. W. Boyd, *Adv. Opt. Photon.* **2**, 519 (2010).
20. I. Campos-Flores, J. L. Jimenez-Ramirez, and J. Roa-Neri, *J. Electromagn. Analysis and Appl.* **9**, 203 (2017).
21. A. Shevchenko and M. Kaivola, *J. Phys. B* **44**, 175401 (2011).
22. M. Mansuripur and A. Zakharian, *Opt. Comm.* **283**, 3557 (2012).
23. D. E. Soper, *Classical Field Theory*, Dover Publ. New York (2008).
24. Y. R. Shen, *Principles of Nonlinear Optics*, Wiley, New York (1984).
25. S. V. Popov, Yu. P. Svirko, and N. I. Zheludev, *Susceptibility Tensor for Nonlinear Optics*, Taylor & Francis, New York (2015).
26. J. Schwichtenberg, *Physics from Symmetry*, Springer, Berlin (2018).
27. S. M. Barnett, *J. Opt.* **13**, 064010 (2011).
28. K. Y. Bliokh, J. Dressel, and F. Nori, *New J. Phys.* **16**, 093037 (2014).
29. O. Yamashita, *Opt. Comm.* **284**, 2532 (2011).

РОЛЬ ПРОТЯЖЕННОГО ФИЛАМЕНТАЦИОННОГО ФОКУСА ПРИ АБЛЯЦИИ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ В ВОДНОЙ СРЕДЕ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

*Н. А. Смирнов**, *С. И. Кудряшов*, *А. А. Ионин*

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

Поступила в редакцию 3 марта 2022 г.,

после переработки 17 марта 2022 г.

Принята к публикации 23 марта 2022 г.

Проводилась лазерная абляция кремниевой мишени в дистиллированной воде одиночными фемто-пикосекундными импульсами при фокусировке объективом с числовой апертурой $NA = 0.25$ в зависимости от положения фокуса относительно поверхности мишени. Представлена визуализация плазменного канала в воде для используемой числовой апертуры. Проведена характеристика абляционного рельефа поверхности с помощью сканирующей электронной и зондовой микроскопии. Получены и проанализированы значения максимальных глубин и объемов кратеров в зависимости от положения линейного и протяженного нелинейного фокуса.

DOI: 10.31857/S0044451022070069

EDN: EDFOAB

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерные ультракороткие импульсы (УКИ) получили распространение при обработке поверхности широкого круга материалов, таких как металлы [1, 2], полупроводники [3–5], диэлектрики [5–7], полимеры [8]. К основным преимуществам лазерных УКИ можно отнести уменьшение зоны теплового воздействия, уменьшение загрязнения поверхности [9, 10], возможность получения субволновых поверхностных структур с периодом, значительно меньшим длины волны возбуждающего лазерного излучения, $\Lambda < \lambda_{laser}/2$ [11, 12].

В связи с тем, что пиковые мощности лазерного излучения достигают высоких значений (петаватт), при распространении УКИ в прозрачной среде могут проявляться нелинейные эффекты, такие как самофокусировка, филаментация, пробой плазмы. Рассмотрим более подробно явление самофоку-

сировки, которое является пороговым эффектом и рассчитывается для гауссова пучка по формуле

$$P_{cr} = \frac{3.77\lambda^2}{8\pi n_0 n_2},$$

где n_0 — линейный коэффициент преломления, n_2 — коэффициент керровской (кубической) нелинейности среды. Как видно из данной формулы, критическая мощность зависит как от параметров лазерного излучения (длина волны), так и от среды, в которой происходит распространение лазерного излучения. Для того чтобы избежать филаментации, можно уменьшить длительность лазерного импульса, понизив тем самым пиковую мощность излучения до значений ниже критической мощности самофокусировки P_{cr} . При превышении критической мощности более чем в десять раз может возникнуть множественная филаментация — филаменты образуются и исчезают случайным образом как в продольном, так и в поперечном направлении. Для воды порог самофокусировки значительно ниже чем для воздушной среды: при длине волны лазерного излучения 1030 нм он равен 2–6 МВт для воды и 2–5 ГВт для воздуха [13–15]. При этом вода получила широкое распространение в качестве буферной среды при лазерной генерации коллоидных растворов [16–19]. Кроме того, при воздействии лазерных УКИ в водной среде получают модификацию по-

* E-mail: cna1992@mail.ru

верхности с улучшенными трибологическими и химическими свойствами по сравнению с модификацией на воздухе [20, 21].

В ряде работ продемонстрирована ключевая роль самофокусировки и филаментации при выносе вещества с поверхности материала в процессе микрообработки поверхности в водной среде [22–26]. При этом в данных работах абляция возникала в области геометрического (линейного) фокуса и не учитывалось смещение нелинейного лазерного фокуса, которое зависит от приложенной пиковой мощности [13]. Ранее в работах [27, 28] исследовалась эффективность абляции (вынос массы и оптическая плотность коллоидных растворов наночастиц) при многоимпульсной обработке фемтосекундными лазерными импульсами (120 фс) в зависимости от положения геометрического фокуса (использовались длиннофокусные линзы $NA < 0.03$) относительно поверхности мишени. Было показано, что наибольшая эффективность достигается при фокусировке несколько выше поверхности. Данный факт авторы связывали с возникновением нелинейного фокуса вследствие самофокусировки в воде. При этом в данных работах не проводилось сравнение с дофиламентационным режимом ($P < P_{cr}$). Также в литературе отсутствуют аналогичные эксперименты для жесткой фокусировки лазерного излучения ($NA \geq 0.2$), когда пространственные характеристики и плотность плазмы в плазменном канале значительно меняются [11, 29, 30].

В данной работе проводилась абляция кремниевой мишени для длительностей импульса 0.3 и 10 пс в водной среде в зависимости от положения фокуса для объектива $NA = 0.25$. Наличие и смещение фокуса лазерного излучения продемонстрированы с помощью визуализации плазменного канала в жидкости при разных значениях пиковой мощности излучения. Абляционный рельеф поверхности проведен с помощью сканирующего электронного микроскопа. Были получены значения максимальной глубины и объема кратера в зависимости от положения геометрического фокуса.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В данном эксперименте проводилась одноимпульсная абляция свежих участков полированной пластины монокристаллического нелегированного кремния (ориентация [110]) толщиной 375 мкм с естественным оксидным слоем 2–3 нм. Абляция происходила в дистиллированной воде, слой жидкос-

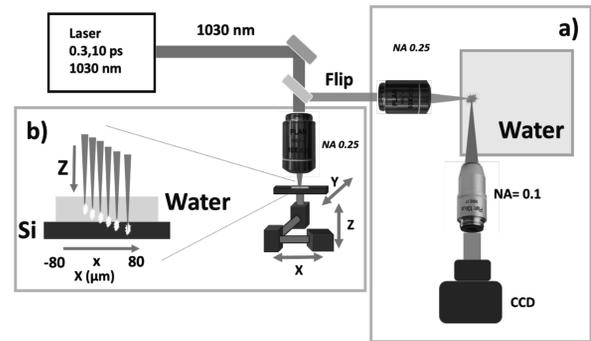


Рис. 1. Схема эксперимента: а — абляция мишени при сканировании через весь образец; б — визуализация плазменного канала в дистиллированной воде

ти над поверхностью мишени составлял примерно 1 мм. В качестве источника лазерного излучения в работе был использован волоконный лазер Satsuma (Amplitude Systemes) с активной средой на ионах Yb^{3+} (длина волны основной гармоники 1030 нм, ширина спектра на полувысоте 7 нм, частота следования импульсов 1 Гц–500 кГц). Длительность лазерных УКИ изменялась с помощью выходного компрессора и составляла 0.3 и 10 пс. Длительность лазерных УКИ измерялась с помощью сканирующего интерференционного автокоррелятора AA-20DD (Авеста-проект, диапазон 0.01–30 пс). Энергия УКИ в моде TEM_{00} плавно менялась с помощью тонкопленочного отражательного ослабителя. Лазерное излучение первой гармоники фокусировалось на поверхности образца через объектив $NA = 0.25$ в пятно (по уровню интенсивности $1/e$) радиусом около 2.5 мкм. Образец перемещался с помощью моторизованной трехкоординатной платформы с минимальным шагом 1 мкм. Визуализация топологии поверхности осуществлялась с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Tescan VEGA. Топология поверхности абляционного рельефа была получена на сканирующем атомно-силовом микроскопе (АСМ) с разрешением сканирования 120 нм.

Визуализация плазменного канала проводилась для фемтосекундного лазерного излучения с длительностью импульса 0.3 пс и длиной волны 1030 нм. Схема эксперимента представлена на рис. 1а. Лазерное излучение первой гармоники фемтосекундного волоконного лазера фокусировалось в воде через объектив с числовой апертурой $NA = 0.25$. В перпендикулярной (боковой) геометрии визуализировался плазменный канал через объектив с числовой апертурой $NA = 0.1$ на цветную CCD-камеру.

Абляция мишени проводилась для первой гармоники лазерного излучения в режиме сканирования

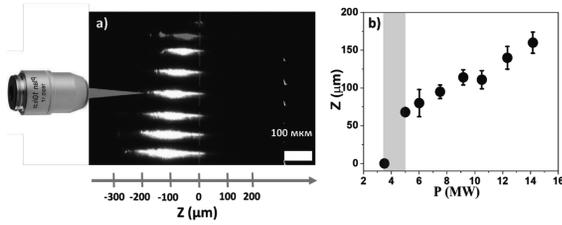


Рис. 2. а) Снимки плазменных каналов от пиковой мощности в лазерном импульсе. б) Смещение центра плазменного канала от пиковой мощности в импульсе (выделенная область (3.8–5 МВт) соответствует началу смещения филамента)

образца одновременно по двум координатам x и z со скоростью соответственно 25 мкм/с и 12.5 мкм/с (рис. 1б). Частота следования лазерных импульсов составляла 1 Гц. В эксперименте использовались импульсы длительностью 0.3 пс с мощностью, соответствующей филаментационному режиму ($P \geq P_{cr}$), и 10 пс с $P < P_{cr}$.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для подтверждения возникновения филаментации визуализировалась продольная структура плазменного канала в зависимости от приложенной пиковой мощности в лазерном импульсе. На рис. 2а представлены изображения структуры плазменного канала для разных пиковых мощностей. Частота следования лазерных импульсов в эксперименте составляла 10 кГц, выбор которой связан с тем, что при меньшей частоте чувствительности камеры не хватает, чтобы детектировать свечение плазменного канала. Штриховой линией показано положение линейного фокуса. При увеличении энергии в лазерном импульсе мы наблюдаем смещение плазменного канала в сторону фокусирующей оптики. Данная несимметричность плазменного канала говорит о возникновении самофокусировки и результирующей филаментации. На рис. 2б показано смещение центра плазменного канала в зависимости от пиковой мощности в лазерном импульсе. Начало резкого смещения происходит в районе 2–5 МВт.

Начало движения можно интерпретировать как превышение над критической мощностью самофокусировки. Движение начинается в области 3.8–5 МВт. Полученные результаты хорошо согласуются с литературными значениями критической мощности для воды ($P_{cr} \approx 2–5$ МВт для данной

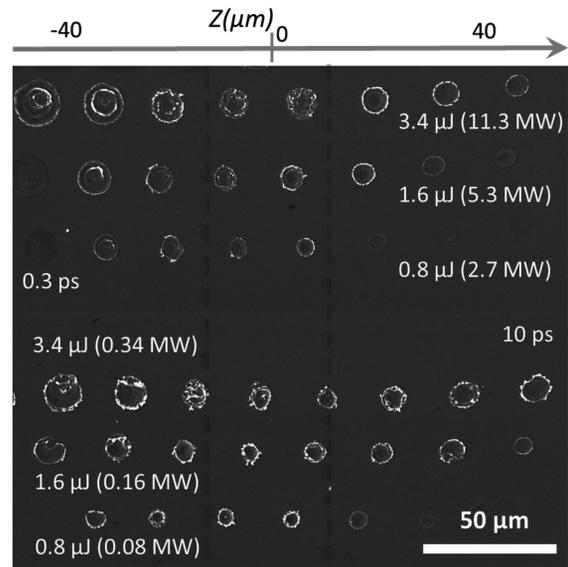


Рис. 3. СЭМ-снимки абляционного рельефа на поверхности мишени кремния для разных положений геометрического фокуса относительно поверхности мишени

длины волны). Длина плазменного канала в нашем эксперименте составляет 50–350 мкм в зависимости от энергии в лазерном импульсе.

На рис. 3 представлены снимки абляционного рельефа на поверхности мишени кремния в зависимости от положения фокуса. Эксперименты проводились при энергиях 0.8, 1.6, 3.4 мкДж и длительностях импульса 0.3 и 10 пс. Штриховыми линиями отмечены две длины Рэлея для данной фокусировки, равные приблизительно 50 мкм. Отрицательные значения, отложенные сверху рисунка, соответствуют положению геометрического фокуса над поверхностью мишени; положительные значения соответствуют случаю, когда фокус находится ниже поверхности мишени. Все полученные кратеры имеют округлую форму. При этом для абляции при длительности лазерного импульса 0.3 пс и фокусировке выше поверхности мишени наблюдаются точечная структура внутри кратера и внешняя кольцевая структура, которая больше себя проявляет при большей энергии лазерных импульсов. Данная морфология кратеров может быть связана с возникновением филаментации и конической эмиссии [31].

Рассмотрим глубины и объемы полученных кратеров в зависимости от положения геометрического фокуса (рис. 4). Пиковая мощность используемых импульсов длительности 10 пс составляет 0.08–0.34 МВт, что значительно меньше, чем мощность самофокусировки в жидкости ($P_{cr} = 2–5$ МВт

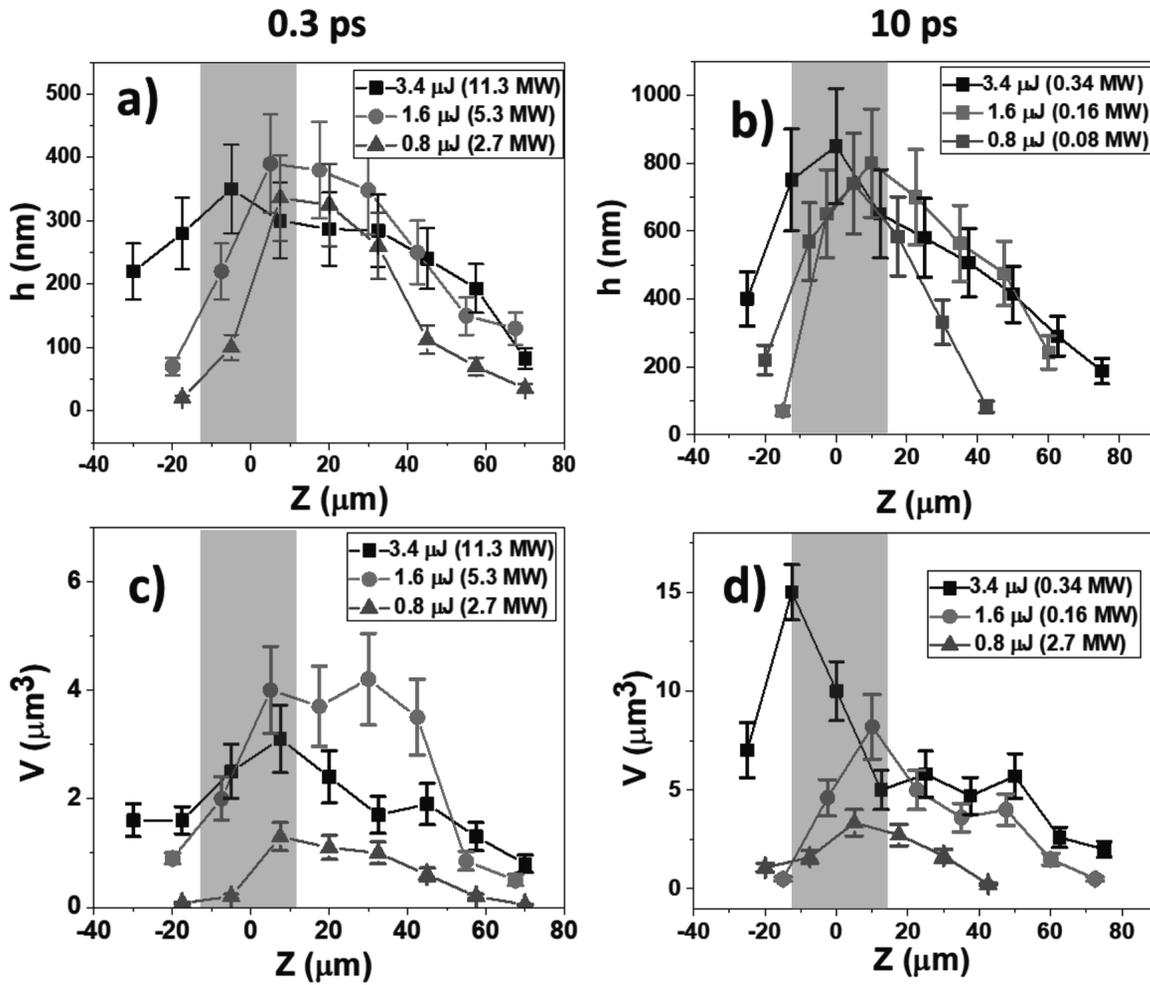


Рис. 4. (В цвете онлайн) Глубины и объемы кратеров в случаях длительности импульса 0.3 пс (а, в) и 10 пс (б, г)

для длины волны 1030 нм). В связи с этим подразумевается лишь геометрический фокус, положение которого не меняется от мощности в выбранном диапазоне. На рис. 4 геометрический фокус по оси абсцисс находится в нулевой точке (отмечен синей областью). Наблюдается симметричное убывание глубины кратера, что связано с уменьшением пиковой мощности в фокальном пятне; максимум находится в области геометрического фокуса.

Объемы кратеров при энергиях 1.6 и 0.8 мкДж ведут себя аналогичным образом: для большей энергии наблюдается смещение максимальной глубины кратера влево, что соответствует ситуации, когда фокус находится выше мишени. Данный факт можно связать с тем, что, как показано в работах [22, 32], оптимальная плотность энергии имеет небольшую величину. При больших энергиях в импульсе более

выгодным для выноса вещества с поверхности материала является увеличение фокального пятна.

При абляции лазерными УКИ длительностью 0.3 пс глубины и объемы полученных кратеров значительно меньше, чем для импульсов длительностью 10 пс. При этом область, где глубина и объем кратеров остаются практически постоянными, увеличивается, что, по всей видимости, связано с проявлением филаментации. Полученные данные хорошо коррелируют с результатами работы [23], где наблюдали аналогичные зависимости для глубин и объемов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучена лазерная абляция кремниевой мишени в дистиллированной воде фемтопико-

секундными импульсами длительностью 0.3 и 10 пс при фокусировке объективом с числовой апертурой $NA = 0.25$ в режиме одноимпульсного воздействия в зависимости от положения геометрического фокуса относительно поверхности мишени. С помощью визуализации в боковой геометрии обнаружена филаментация фемтосекундных лазерных импульсов в виде плазменного канала вблизи геометрического фокуса. Продемонстрирован отрицательный вклад филаментации на процесс абляции, выраженный в уменьшении максимальных глубин и объемов кратеров в 2–3.5 раза по сравнению с дофиламентационным режимом.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. M. Ahmed, C. Grambow, and A. M. Kietzig, *Micromachines* **5**, 1219 (2014).
2. A. A. Nastulyavichus, S. I. Kudryashov, I. N. Saraeva et al., *Laser Phys. Lett.* **17**, 016003 (2019).
3. N. H. Rizvi, *RIKEN Rev.* No. 50 (2003).
4. L. Rihakova and H. Chmelickova, *Adv. Mater. Sci. and Engin.* **2015**(2), 1 (2015).
5. S. Singh and G. L. Samuel, *Application of Lasers in Manufacturing*, Springer, Berlin (2019).
6. R. R. Gattass and E. Mazur, *Nature Photon.* **2**(4), 219 (2008).
7. П. А. Данилов, С. И. Кудряшов, А. Е. Рупасов и др., *Письма в ЖЭТФ* **113**, 650 (2021).
8. L. Ding, R. Blackwell, J. F. Künzler et al., *Opt. Express* **14**, 11901 (2006).
9. А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, А. А. Самохин, *УФН* **187**, 159 (2017).
10. K. H. Leitz, B. Redlingshöfer, Y. Reg et al., *Phys. Proc.* **12**, 230 (2011).
11. Z. Li, Q. Wu, X. Jiang et al., *Appl. Surf. Sci.* **580**, 152107 (2022).
12. P. Nürnberger, H. M. Reinhardt, H. C. Kim et al., *Appl. Surf. Sci.* **425**, 682 (2017).
13. A. Couairon and A. Mysyrowicz, *Phys. Rep.* **441**, 47 (2007).
14. S. Butkus, E. Gaižauskas, D. Paipulas et al., *Appl. Phys. A* **114**, 81 (2014).
15. I. N. Saraeva, S. I. Kudryashov, A. A. Rudenko et al., *Appl. Surf. Sci.* **470**, 1018 (2019).
16. S. I. Kudryashov, A. A. Nastulyavichus, A. K. Ivanova et al., *Appl. Surf. Sci.* **470**, 825 (2019).
17. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 20 (2022).
18. D. Zhang, B. Gokce, and S. Barcikowski, *Chem. Rev.* **117**, 3990 (2017).
19. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, *ЖЭТФ* **154**, 92 (2018).
20. M. Trtica, J. Stasic, and D. Batani, *Appl. Surf. Sci.* **428**, 669 (2018).
21. H. Wang, F. Pöhl, and K. Yan, *Appl. Surf. Sci.* **471**, 869 (2019).
22. Н. А. Смирнов, С. И. Кудряшов, П. А. Данилов и др., *Письма в ЖЭТФ* **108**, 393 (2018).
23. N. A. Smirnov, S. I. Kudryashov, A. A. Rudenko et al., *Appl. Surf. Sci.* **562**, 150243 (2021).
24. A. Nastulyavichus, N. Smirnov, and S. Kudryashov, *Chin. Phys. B* (2022), <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac5602>.
25. P. A. Danilov, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov et al., *Opt. Mater. Express* **10**, 2717 (2020).
26. N. A. Smirnov, S. I. Kudryashov, P. A. Danilov et al., *Opt. Quant. Electron.* **52**, 1 (2020).
27. J. P. Sylvestre, A. V. Kabashin, E. Sacher et al., *Appl. Phys. A* **80**, 753 (2005).
28. A. Menéndez-Manjón, P. Wagener, and S. Barcikowski, *J. Phys. Chem. C* **115**, 5108 (2011).
29. Ю. Э. Гейнц, А. А. Землянов, А. А. Ионин и др., *ЖЭТФ* **138**, 822 (2010).
30. F. V. Potemkin, E. I. Mareev, A. A. Podshivalov et al., *New J. Phys.* **17**, 053010 (2015).
31. Q. Cui, J. Yao, J. Ni et al., *J. Mod. Opt.* **59**, 1569 (2012).
32. G. Raciukaitis, M. Brikas, P. Gecys et al., *J. Laser Micro/Nanoengin.* **4**, 186 (2009).

РАДИАЦИОННО-СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЕ ВОВЛЕЧЕНИЕ МОЛЕКУЛ В РЕЗОНАНС С ЛАЗЕРНЫМ ИК-ПОЛЕМ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СРЕДЕ

В. Б. Лаптев, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Е. А. Рябов*

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

Поступила в редакцию 9 марта 2022 г.,

после переработки 23 марта 2022 г.

Принята к публикации 24 марта 2022 г.

Представлены результаты исследований по радиационно-столкновительному вовлечению молекул, не поглощающих лазерное ИК-излучение, в резонанс с лазерным полем при их облучении с поглощающими излучение лазера молекулами в двухкомпонентной среде. Эксперименты проводились на примере смеси молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ (при соотношении давлений 1/1). Возбуждение молекул осуществлялось импульсным излучением CO_2 -лазера. Проведено два типа экспериментов: 1) облучение молекул в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения, который формировался перед твердой поверхностью при падении на нее сверхзвукового импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока и 2) облучение молекул в статических условиях при комнатной температуре газа в кювете. Показано, что в случае облучения колебательно охлажденных молекул в скачке уплотнения, когда их полосы ИК-поглощения узкие ($7\text{--}8\text{ см}^{-1}$ на полувысоте), происходит эффективное вовлечение молекул CF_2HCl , изначально не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем. Обнаружена их эффективная диссоциация (с выходом диссоциации $\beta \geq 10\text{--}15\%$) при облучении смеси $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ в случае отстройки частоты CO_2 -лазера от центра полосы ИК-поглощения колебательно охлажденных в скачке уплотнения молекул CF_2HCl более чем на $15\text{--}25\text{ см}^{-1}$. В случае облучения молекул при комнатной температуре газа в кювете, когда полосы ИК-поглощения молекул довольно широкие ($25\text{--}30\text{ см}^{-1}$), также наблюдается радиационно-столкновительное вовлечение молекул CF_2HCl в процесс взаимодействия с лазерным полем, но с менее ярко выраженным характером.

DOI: 10.31857/S0044451022070070

EDN: EDUYOQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время проводится много исследований, направленных на разработку низкоэнергетических методов молекулярного лазерного разделения изотопов (МЛРИ) (MLIS — molecular laser isotope separation) [1–19]. Основной целью этих исследований является поиск эффективных и экономичных методов для разделения изотопов, в том числе изотопов урана, а также других тяжелых элементов [1, 2, 16–19]. Из большого числа предложенных на сегодня лазерных методов разделения изотопов наилучшие результаты были получены с применением

ем метода многофотонной ИК-диссоциации молекул излучением мощных импульсных CO_2 -лазеров [20–26]. На основе этого метода в России (в г. Калининграде) в недавнем прошлом было открыто и успешно функционировало производство по обогащению тяжелого изотопа углерода-13 (^{13}C) с использованием в качестве рабочего вещества молекул CF_2HCl (фреона-22) [24–26]. Однако в этом методе требуются довольно высокие плотности энергии лазерного излучения ($\Phi \geq 3\text{--}5\text{ Дж/см}^2$), поскольку для диссоциации молекул, подобных CF_2HCl , необходимо колебательно возбудить их до энергий порядка 2.4 эВ и более [1, 2, 20–28]. Это во многих случаях приводит к уменьшению изотопической селективности процесса, что особенно критично в случае селективной диссоциации молекул, характеризующихся небольшими изотопическими сдвигами в спектрах ИК-поглощения (WF_6 , MoF_6 , UF_6) [1, 2].

* E-mail: gmakarov@isan.troitsk.ru

В качестве низкоэнергетических методов МЛРИ (с энергией активации процесса не более 0.3–0.5 эВ [1, 2, 17]) сегодня рассматриваются хорошо изученные методы изотопно-селективного подавления кластеризации молекул при газодинамическом расширении на выходе из сопла и изотопно-селективной диссоциации небольших ван-дер-ваальсовых кластеров (в частности, димеров) [1, 2, 9–17], а также комбинация этих методов [1, 2, 17]. В настоящее время в США для разделения изотопов урана разрабатывается технология SILEX (Separation of Isotopes by Laser Excitation) [29–31]. Принципы этой технологии не раскрываются, однако с большой вероятностью можно полагать, что в ее основе лежат низкоэнергетические процессы [32]. Технология SILEX, по утверждениям разработчиков, применима также для разделения изотопов других элементов (кремния, бора, серы, углерода, кислорода и др.) [1, 29].

В работах [1, 33] было показано, что альтернативу низкоэнергетическим методам МЛРИ может составить подход, в котором изотопно-селективная диссоциация молекул проводится в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения, формирующегося перед твердой поверхностью при падении на нее сверхзвукового импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока. Этот подход был предложен и развит в работах [34–38], в которых в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения исследовалась изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул SF_6 [34–37] и CF_3I [38] (см. также обзорную работу [39]).

Указанные молекулы характеризуются сравнительно большими изотопическими сдвигами в спектрах ИК-поглощения. В случае SF_6 и CF_3I изотопные сдвиги в спектрах поглощения возбуждаемых лазером колебаний ν_3 (SF_6) и ν_1 (CF_3I) составляют соответственно $\Delta\nu_{is} \approx 17 \text{ см}^{-1}$ (относительно изотопов ^{32}S и ^{34}S) [40, 41] и $\Delta\nu_{is} \approx 27 \text{ см}^{-1}$ (относительно изотопов ^{12}C и ^{13}C) [42]. Эти величины значительно превышают ширины полос ИК-поглощения молекул в охлажденном молекулярном потоке. Принципиально другая ситуация реализуется в случае молекул, имеющих небольшие изотопические сдвиги в спектрах возбуждаемых лазером колебаний, когда спектры поглощения разных изотопологов практически полностью перекрываются. Малая величина изотопического сдвига в спектрах ИК-поглощения молекул, содержащих изотопы тяжелых элементов, является одной из основных проблем в контексте получения высоких значений селективности при лазерном разделении изотопов методом ИК-диссоциации молекул.

Недавно в работах [43–47] в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения исследовалась изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул CF_3Br и CF_2HCl . Указанные молекулы имеют небольшие изотопические сдвиги (по отношению к изотопам брома и хлора) в спектрах ИК-поглощения ($\Delta\nu_{is} \approx 0.25 \text{ см}^{-1}$ в случае молекул CF_3Br [48] и $\Delta\nu_{is} \approx 0.05 \text{ см}^{-1}$ в случае молекул CF_2HCl [49]), что представляет большой интерес в плане изотопно-селективной многофотонной ИК-диссоциации молекул UF_6 . Показано, что при небольших плотностях энергии возбуждения можно реализовать изотопно-селективную диссоциацию указанных молекул [43–46]. Обнаружено эффективное вовлечение молекул, не поглощающих лазерное ИК-излучение, в резонанс с лазерным полем при их облучении в смеси с поглощающими излучение лазера молекулами в двухкомпонентной среде [47]. Эксперименты проводились со смесью молекул CF_2HCl/CF_3Br (при соотношении давлений 1/1).

В данной работе нами приведены результаты более детального исследования обнаруженного в работе [47] радиационно-столкновительного вовлечения молекул, не поглощающих лазерное ИК-излучение, в резонанс с лазерным полем в двухкомпонентной молекулярной среде. В ходе исследований облучение молекул ИК-лазером проводилось как в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения в условиях низкой колебательной температуры молекул, так и в статических условиях при комнатной температуре газа в кювете. Описаны экспериментальная установка и суть метода, рассматриваются причины наблюдаемого явления. Результаты работы демонстрируют возможность проведения изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул, находящихся первоначально вне резонанса с лазерным излучением, в смеси с поглощающими излучение лазера молекулами при сравнительно низких плотностях энергии возбуждения и значительном повышении, вследствие этого, селективности диссоциации.

2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ В СКАЧКЕ УПЛОТНЕНИЯ

В процессе быстрого охлаждения молекулярного газа при расширении из сопла термодинамическое равновесие между различными степенями свободы молекул нарушается из-за разницы во временах поступательной, вращательной и колебательной релаксации: $\tau_{tr} \leq \tau_{rot} \leq \tau_{vib}$. [50]. Степень отклонения

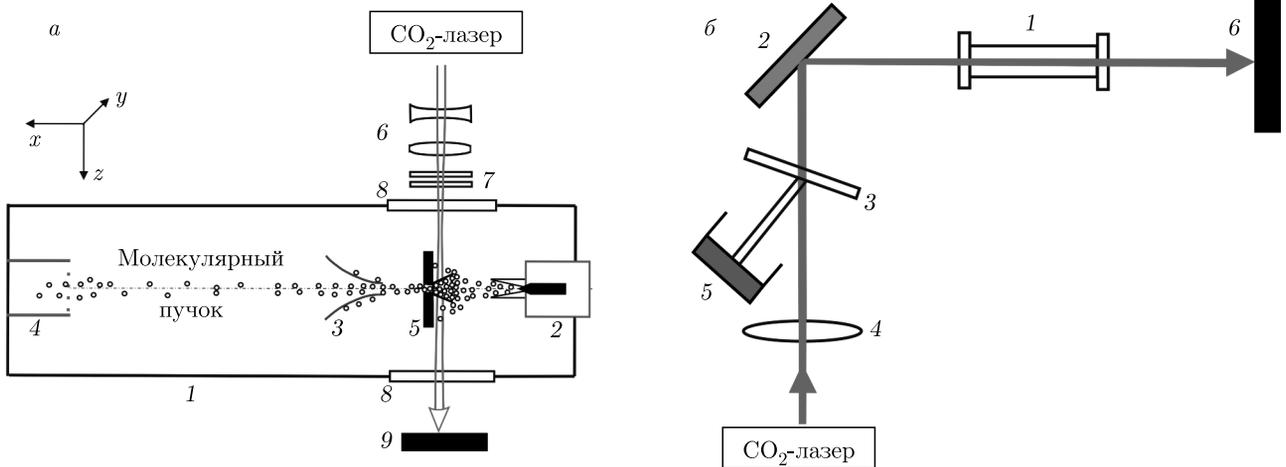


Рис. 1. *а)* Схема экспериментальной установки с молекулярным пучком: 1 — высоковакуумная камера; 2 — импульсное сопло; 3 — скиммер; 4 — квадрупольный масс-спектрометр; 5 — подложка с усеченной тетраэдрической пирамидой для формирования ударной волны; 6 — цилиндрические линзы; 7 — ослабители; 8 — окна из NaCl; 9 — поглотитель излучения. *б)* Схема облучения молекул ИК-лазером в кювете при комнатной температуре: 1 — оптическая кювета; 2 — плоское зеркало; 3 — разделительная пластинка; 4 — фокусирующая линза ($f = 140$ см); 5 — пироэлектрический приемник; 6 — поглотитель излучения

от локального равновесия зависит от числа столкновений z_{col} , необходимых для релаксации данной степени свободы. Для многоатомных молекул обычно выполняется соотношение: $\tau_{tr} \leq \tau_{rot} \leq \tau_{vib}$ [50]. Поэтому в газодинамически охлажденном молекулярном потоке для поступательной, вращательной и колебательной температур многоатомных молекул обычно реализуются [50] условия

$$T_{1,tr} \leq T_{1,rot} \leq T_{1,vib}. \quad (1)$$

В прямом скачке уплотнения [51, 52], который формируется при падении сверхзвукового газодинамически охлажденного молекулярного потока на твердую поверхность, из-за разницы в скоростях поступательной вращательной и колебательной релаксаций [53], реализуются обратные неравновесные условия [1, 34–36, 39]

$$T_{2,tr} \geq T_{2,rot} \geq T_{2,vib}. \quad (2)$$

При этом, из-за большого времени колебательно-поступательной релаксации молекул (например, для CF_3Br $\tau_{V-T} \approx 135$ мкс · Торр [54], для CF_2HCl $\tau_{V-T} \approx 65$ мкс · Торр [55]), колебательная температура молекул в скачке уплотнения в случае использования импульсного потока разреженного газа может практически не отличаться от колебательной температуры молекул в падающем потоке ($T_{2,vib} \approx T_{1,vib}$), в то время как поступательная и

вращательная температуры молекул в скачке уплотнения (из-за малого времени их поступательной и вращательной релаксации порядка 10–100 нс · Торр [50]) значительно выше, чем в невозмущенном потоке:

$$T_{2,tr} > T_{1,tr}, \quad T_{2,rot} > T_{1,rot}. \quad (3)$$

Таким образом, в скачке уплотнения создаются новые неравновесные условия, которые характеризуются тем, что колебательная температура молекул существенно меньше поступательной и вращательной температур. В условиях наших экспериментов колебательная температура молекул CF_2HCl и CF_3Br в падающем на поверхность потоке, вероятно, составляла $T_{1,vib} \leq 150$ К, а поступательная и вращательная температуры — $T_{1,tr} \approx T_{1,rot} \leq 50$ К [1, 35].

3. ЭКСПЕРИМЕНТ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

3.1. Экспериментальная установка

Схема установки с молекулярным пучком показана на рис. 1*а*. Она включает высоковакуумную камеру с импульсным источником молекулярного пучка, квадрупольный масс-спектрометр КМС-01/250 для детектирования частиц пучка и перестраиваемый по частоте импульсный CO_2 -лазер с энерги-

ей в импульсе до 4 Дж для возбуждения молекул. Импульс излучения лазера состоял из пика длительностью около 100 нс (на полувысоте) и хвостовой частью длительностью ≈ 0.5 мкс, в которой содержалось примерно 50% полной энергии импульса. Экспериментальная установка включает также персональный компьютер для управления масс-спектрометром, систему синхронизации лазерного импульса с импульсом молекулярного пучка и систему сбора и обработки данных. Камеры источника молекулярного пучка и масс-спектрометра откачивались турбомолекулярными насосами до давления соответственно не более 10^{-5} Торр и 10^{-7} Торр.

Молекулярный пучок CF_3Br (либо CF_2HCl или смеси молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$) генерировался в камере источника в результате сверхзвукового расширения указанных газов через импульсное сопло General Valve с диаметром выходного отверстия 0.8 мм. С целью увеличения интенсивности молекулярного пучка к соплу прикреплялся расходящийся конус длиной 20 мм и углом раствора 15° . Длительность импульса открывания сопла изменялась в диапазоне от 310 до 475 мкс (на полувысоте). Давление газа над соплом изменялось в диапазоне от 3.9 до 8.0 атм. Камера масс-спектрометра отделялась от камеры источника пучка скиммером (конусной диафрагмой) диаметром 1.05 мм, расположенном на расстоянии 150 мм от сопла. Сформированный таким образом пучок попадал в ионизационную камеру КМС. Расстояние от среза сопла до ионизационной камеры КМС составляло 350 мм.

Лазерное излучение пересекало молекулярный пучок под углом примерно 90° . Размеры лазерного пучка в области пересечения с молекулярным пучком составляли 8×6 мм². Расстояние от сопла до середины зоны облучения молекулярного потока составляло около 46 мм. CO_2 -лазер был настроен на частоту генерации 1084.635 см⁻¹ (линия излучения $9R(30)$). Эта линия излучения лазера попадает между Q -ветвями спектра поглощения колебания ν_1 молекул $\text{CF}_3^{79}\text{Br}$ (1084.769 см⁻¹) и $\text{CF}_3^{81}\text{Br}$ (1084.521 см⁻¹) [48]. Указанная линия генерации лазера отстроена от Q -ветви колебания ν_3 молекулы CF_2HCl примерно на 15.4 см⁻¹ [56] в красную область.

Для формирования скачка уплотнения на расстоянии $x = 50$ мм от сопла располагалась перпендикулярно направлению молекулярного потока подложка из дюралюминия толщиной 6 мм и диаметром 50 мм. В центре подложки имелось полированное конусное отверстие с входным диаметром (со стороны сопла) 1.2 мм и выходным диаметром

5.0 мм. При падении интенсивного импульсного молекулярного потока на эту пластинку перед ней формировался скачок уплотнения (ударная волна) [51, 52] с неоднородными и неравновесными условиями [35, 36]. Характерный размер фронта скачка уплотнения, который по порядку величины равен длине свободного пробега молекул [51, 52], в условиях рассматриваемых экспериментов составлял 5–7 мм [35, 36, 39]. С целью получения более интенсивного скачка уплотнения к пластинке прикреплялась со стороны сопла сходящая усеченная четырехгранная пирамида высотой 12 мм. Две грани пирамиды были изготовлены из тонких пластинок NaCl , прозрачных для излучения лазера. Молекулы пучка, а также образующиеся в результате возбуждения лазером и последующей диссоциации молекул продукты, находящиеся в скачке уплотнения, выходили через конусное отверстие в пластинке, формировали вторичный молекулярный пучок [35, 39] и попадали в ионизатор масс-спектрометра.

Схема эксперимента по облучению молекул в статических условиях при комнатной температуре показана на рис. 16. Облучение молекул лазерным ИК-излучением осуществлялось в оптической кювете длиной 11.2 см. Облучались как чистые газы CF_2HCl и CF_3Br при давлениях в кювете 0.5, 1.0 и 2.0 Торр, так и смеси газов $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ при соотношении давлений 1/1 и общем давлении 1.0 и 2.0 Торр. Расходы газов в кювете в результате облучения молекул определялись на основе измерений интенсивности ИК-спектров поглощения колебаний ν_3 и ν_8 молекул CF_2HCl и колебания ν_1 молекул CF_3Br до и после облучения с помощью ИК-спектрофотометра SPECORD-M82.

3.2. Суть наблюдаемого эффекта и метод исследования

Суть эффекта вовлечения молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным ИК-полем, поясняется на рис. 2. На рис. 2а показаны полоса ИК-поглощения колебания ν_1 (частота 1084.5 см⁻¹ [48]) резонансно поглощающих излучение CO_2 -лазера молекул CF_3Br при низкой ($T \approx 50$ К) температуре [48], а также полосы ИК-поглощения колебаний ν_3 (1100 см⁻¹) и ν_8 (1118 см⁻¹) [56] молекул CF_2HCl в жидком аргоне при температуре $T \approx 110$ К. Стрелкой показано также расположение линии генерации CO_2 -лазера ($9R(30)$, частота 1084.635 см⁻¹), на которой осуществлялось облучение молекул. Частота излучения лазера находится в резонансе с полосой ИК-поглощения колебания ν_1 молекул CF_3Br (падает между Q -ветвями моле-

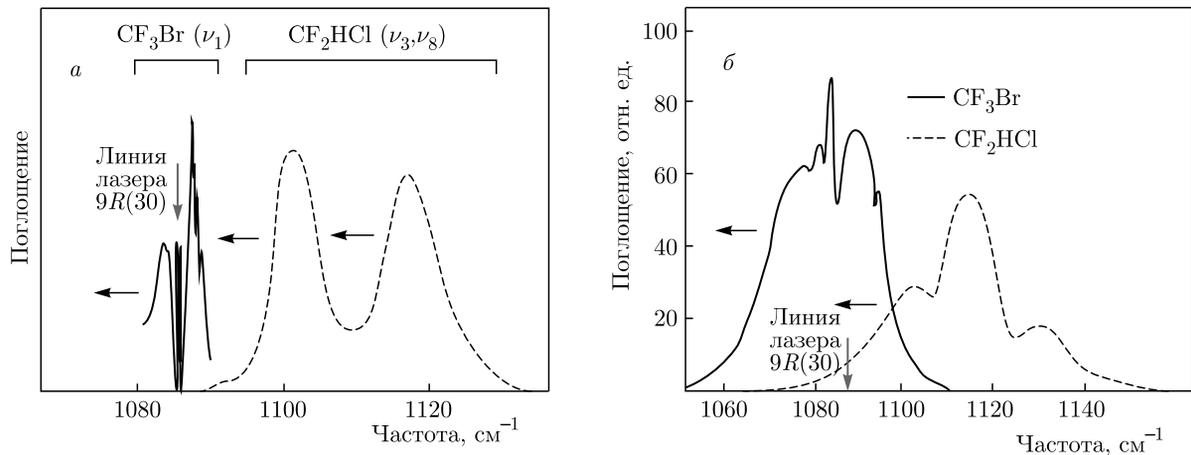


Рис. 2. а) Полоса ИК-поглощения колебания ν_1 (частота 1084.5 см^{-1} [48]) резонансно поглощающих излучение CO_2 -лазера молекул CF_3Br при температуре $T \approx 50 \text{ К}$ [48] и полосы ИК-поглощения колебаний ν_3 (1100 см^{-1}) и ν_8 (1118 см^{-1}) молекул CF_2HCl в жидком аргоне при температуре $T \approx 110 \text{ К}$ [56]. б) Полоса ИК-поглощения колебания ν_1 (частота 1084.5 см^{-1} [57]) резонансно поглощающих излучение CO_2 -лазера молекул CF_3Br и полосы ИК-поглощения колебаний ν_3 (1100 см^{-1}) и ν_8 (1118 см^{-1}) молекул CF_2HCl [56] при комнатной температуре. Вертикальными стрелками на рис. а и б показано расположение линии генерации CO_2 -лазера ($9R(30)$, частота — 1084.635 см^{-1}), на которой осуществляется облучение молекул. Горизонтальными стрелками показано направление смещения полос ИК-поглощения молекул в низкочастотную область при их колебательном возбуждении

кул $\text{CF}_3^{81}\text{Br}$ и $\text{CF}_3^{79}\text{Br}$), и она довольно далеко отстроена от ближайшей полосы ИК-поглощения молекул CF_2HCl (отстройки от полос поглощения колебаний ν_3 и ν_8 молекул CF_2HCl составляют соответственно не менее 15 см^{-1} и 33 см^{-1}). На рис. 2б показаны полосы ИК-поглощения колебания ν_1 молекул CF_3Br [57], а также полосы ИК-поглощения колебаний ν_3 и ν_8 молекул CF_2HCl при комнатной температуре. Заметим, что полосы поглощения колебаний ν_3 и ν_8 молекул CF_2HCl при комнатной температуре не разрешаются (перекрываются).

Резонансное возбуждение лазером молекул CF_3Br в смеси с молекулами CF_2HCl приводит к колебательному возбуждению молекул CF_2HCl за счет процесса колебательно-колебательного обмена энергией с возбужденными молекулами CF_3Br . В результате этого полосы ИК-поглощения молекул CF_2HCl смещаются из-за ангармонизма колебаний в красную область (в сторону частоты излучения лазера, возбуждающего молекулы, см. рис. 1а) [20, 27]. Это приводит к тому, что изначально не поглощающие излучение лазера молекулы CF_2HCl за счет столкновений с возбужденными молекулами CF_3Br начинают вовлекаться в резонанс с лазерным полем. В дальнейшем становится возможным их радиационное резонансное возбуждение и диссоциация лазерным излучением.

При лазерной ИК-диссоциации молекул CF_2HCl образуются радикалы CF_2 и молекулы HCl . В результате последующей рекомбинации радикалов CF_2 образуются молекулы C_2F_4 [58]. Энергия диссоциации молекул CF_2HCl составляет 47.9 ± 4.0 ккал/моль [59]. При диссоциации молекул CF_3Br образуются радикалы CF_3 и атомы Br , а конечными продуктами диссоциации и последующих химических реакций являются молекулы C_2F_6 и Br_2 [60]. Энергия диссоциации молекул CF_3Br значительно больше, чем у молекул CF_2HCl . Она составляет 66.9 ± 3.0 ккал/моль [59].

Выходы диссоциации β_{35} и β_{79} молекул CF_2HCl и CF_3Br при облучении в скачке уплотнения определялись на основе измерений интенсивности времяпролетных спектров соответственно молекулярного иона $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ ($m/z = 86$ а. е. м.) и ионного фрагмента $\text{CF}_2^{79}\text{Br}^+$ ($m/z = 129$ а. е. м.). Времяпролетные спектры указанных ионов измерялась как в отсутствие возбуждения молекул в формирующемся перед поверхностью скачке уплотнения, так и при их возбуждении лазером [43–46]. В случае молекул CF_2HCl

$$S_L = S_0(1 - \beta_{35}\Gamma), \quad (4)$$

где S_0 и S_L — времяпролетные ионные сигналы $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ соответственно в отсутствие возбуждения молекул и при их возбуждении лазером, Γ —

отношение облучаемого объема ко всему объему молекулярного потока. В экспериментах нами анализировался состав лишь облучаемой лазерным излучением части молекулярного потока. Поэтому в нашем случае реализовывалось условие $\Gamma = 1$.

В экспериментах, проведенных по облучению молекул при комнатной температуре газа в кювете, выходы диссоциации молекул CF_2HCl и CF_3Br определялись на основе соотношения (например, для CF_2HCl)

$$p_N = p_0(1 - \beta_{\text{CF}_2\text{HCl}})^N, \quad (5)$$

где p_0 и p_N — давления молекулярного газа CF_2HCl в кювете соответственно до и после облучения лазерными импульсами, N — число импульсов облучения, $\Gamma \approx 0.11$ — отношение облучаемого лазером объема кюветы к полному ее объему (см. рис. 1б).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Результаты, полученные при облучении молекул в скачке уплотнения

При облучении смеси молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ в скачке уплотнения нами наблюдались вовлечение молекул CF_2HCl , не находящихся в резонансе с ИК-излучением CO_2 -лазера, в резонанс с лазерным полем и их эффективная диссоциация. В то же время при облучении чистого газа CF_2HCl при такой же плотности энергии излучения лазера (при $\Phi \leq 0.5$ Дж/см²) диссоциация молекул практически не имела места. На рис. 3 приведены зависимости выхода диссоциации β_{35} молекул $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}$ от плотности энергии Φ возбуждающего лазерного излучения. Эти зависимости измерялись по величине молекулярного ионного сигнала $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ при возбуждении молекул в ударной волне в двух различных случаях. В первом случае (1) ударная волна формировалась молекулярным потоком чистого газа CF_2HCl , а во втором случае (2) — молекулярным потоком смеси газов $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br} = 1/1$. В обоих случаях общее давление газа над соплом составляло 4.0 атм. Видно, что в широком диапазоне плотностей энергии ($\Phi = 0.1$ – 2.5 Дж/см²) выход диссоциации молекул CF_2HCl намного (в 5–8 раз) больше, когда они возбуждаются в смеси с молекулами CF_3Br , чем при возбуждении чистого газа CF_2HCl . Увеличение выхода диссоциации молекул CF_2HCl в смеси с CF_3Br обусловлено [61] эффективной передачей им колебательной энергии от молекул CF_3Br ,

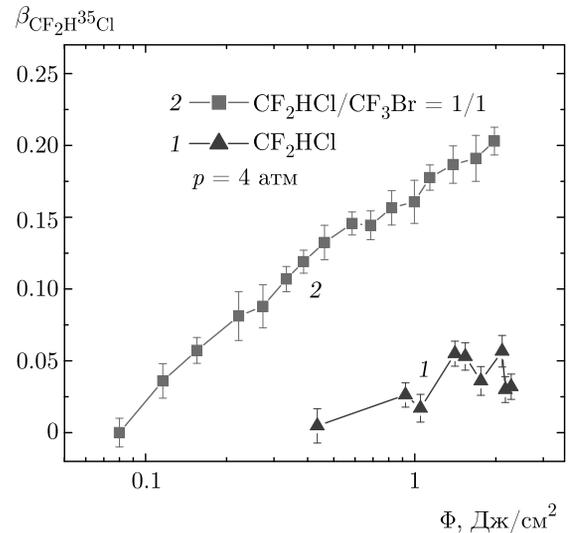


Рис. 3. Зависимости выхода диссоциации молекул $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}$ от плотности энергии лазерного излучения в случаях облучения молекул CF_2HCl в ударной волне в чистом газе (1) и в смеси $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br} = 1/1$ (2). Молекулы возбуждались на линии $9R(30)$ лазера (на частоте 1084.635 см⁻¹). В обоих случаях давление газа над соплом 4.0 атм. Длительность импульса открывания сопла 410 мкс

возбужденных лазером, и дальнейшим их радиационным возбуждением.

В случае облучения молекул в смеси резонансно поглощенная молекулами CF_3Br энергия лазерного излучения за счет колебательно-колебательного обмена энергией с молекулами CF_2HCl уже в течение возбуждающего лазерного импульса приводит к колебательному возбуждению молекул CF_2HCl и довольно сильному красному смещению полос их ИК-поглощения [20, 27]. Константы ангармонизма колебаний ν_3 и ν_8 CF_2HCl составляют соответственно $X_{33} = -5.0$ см⁻¹ и $X_{88} = -3.5$ см⁻¹ [56]. В результате смещения полос поглощения молекул CF_2HCl в низкочастотную область они вовлекаются в резонанс с лазерным полем. Последующее радиационно-столкновительное возбуждение молекулярной смеси приводит к эффективной ИК-диссоциации преимущественно молекул CF_2HCl , поскольку они имеют более низкую энергию диссоциации, чем молекулы CF_3Br . Поэтому при небольших плотностях энергии возбуждения ($\Phi \leq 1.0$ Дж/см²) реализуются условия, когда молекулы CF_2HCl в смеси диссоциируют, в то время как молекулы CF_3Br не будут подвергаться диссоциации [45, 46].

Оценки показывают [39, 44], что концентрации молекул CF_2HCl в падающем потоке и скачке уплотнения в условиях проведенных экспериментов (дав-

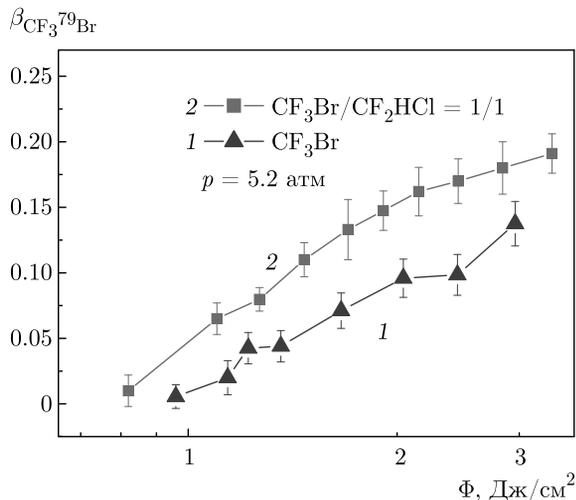


Рис. 4. Зависимости выхода диссоциации молекул $CF_3^{79}Br$ от плотности энергии лазерного излучения в случае облучения чистого газа CF_3Br в ударной волне (1) и в случае облучения смеси молекул $CF_2HCl/CF_3Br = 1/1$ (2). Молекулы возбуждались на линии $9R(30)$ лазера. Давление газа над соплом 5.2 атм. Длительность импульса открывания сопла 390 мкс

ление газа над соплом 4.2 атм, длительность импульса открывания сопла 410 мкс, число молекул, выходящих из сопла за импульс, $1.7 \cdot 10^{17}$) составляют соответственно $5.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и $6.3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Следовательно, уже при небольшом давлении газа в скачке уплотнения (1.5–2.0 Торр) происходит довольно быстрый обмен энергией между молекулами (за времена, меньшие длительности лазерного импульса ≈ 1 мкс), приводящий к эффективному вовлечению в процесс поглощения излучения лазера нерезонансных молекул. Столь быстрый процесс обмена энергией может быть связан с довольно высокой поступательной и вращательной температурами газа в скачке уплотнения ($T_{2,tr} \approx T_{2,rot} \approx 550\text{--}620 \text{ K}$ [39]) и дальнедействующим дипольно-дипольным взаимодействием колебательно возбужденных молекул [46, 61].

Тот факт, что дальнедействующее дипольно-дипольное взаимодействие колебательно возбужденных молекул имеет место в наших экспериментах, подтверждается тем, что при облучении молекул в смеси возрастает выход диссоциации не только молекул CF_2HCl , но и молекул CF_3Br . На рис. 4 показаны измеренные по ионному сигналу $CF_2^{79}Br^+$, зависимости выхода диссоциации β_{79} молекул $CF_3^{79}Br$ от плотности энергии возбуждающего лазерного излучения в случае использования молекулярных потоков CF_3Br (1)

и $CF_2HCl/CF_3Br = 1/1$ (2). Суммарное давление газа над соплом составляло 5.2 атм. Молекулы возбуждались на линии $9R(30)$ лазера. Видно, что в исследуемом диапазоне плотностей энергии ($\Phi \approx 0.75\text{--}3.0 \text{ Дж/см}^2$) выход диссоциации молекул CF_3Br в случае возбуждения в смеси с молекулами CF_2HCl значительно (в 1.5–2 раза) больше, чем в случае возбуждения без CF_2HCl .

4.2. Результаты, полученные в случае облучения молекул в статических условиях при комнатной температуре газа в кювете

Как видно на рис. 2, условия для вовлечения молекул CF_2HCl в процесс взаимодействия с лазерным ИК-полем совершенно разные в случаях облучения молекул в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения и в статических условиях при комнатной температуре газа. В условиях скачка уплотнения молекулы CF_2HCl (из-за их сравнительно низкой колебательной температуры) первоначально не находятся в резонансе с лазерным излучением. В условиях комнатной температуры газа в кювете молекулы CF_2HCl (вследствие их довольно высокой колебательной температуры) уже изначально поглощают лазерное излучение. Поэтому в случае облучения молекул в кювете при комнатной температуре эффект вовлечения молекул в процесс взаимодействия с лазерным полем должен быть менее ярко выраженным, что и наблюдалось в наших экспериментах.

Облучение молекул при комнатной температуре газа в кювете проводилось при фиксированной плотности энергии лазерного излучения $\Phi = 2.0 \pm \pm 0.1 \text{ Дж/см}^2$. Излучение лазера фокусировалось в кювету длиннофокусной линзой с фокусным расстоянием $f = 140 \text{ см}$. Сечение лазерного пучка было примерно одинаковым по длине кюветы и составляло $S_{irr} \approx 0.22 \text{ см}^2$. Внутренний диаметр кюветы 1.6 см, сечение примерно 2.09 см^2 . Особое внимание уделялось тому, чтобы расходы газов в кювете в ходе облучения составляли не более 30–35% от начального давления (отношение конечного и начального давлений $p_N/p_0 \geq 0.65\text{--}0.7$, N — число импульсов облучения) для того чтобы вторичные химические реакции (возможно, имеющие место в кювете) не сильно влияли на результаты измерений. В большинстве случаев число импульсов облучения составляло $N = 50$. Полученные результаты приведены в таблице.

Анализ результатов показывает, что выход диссоциации молекул CF_2HCl в чистом газе при дав-

Таблица. Результаты исследований по измерению выхода диссоциации молекул CF_2HCl и CF_3Br при их облучении в смеси друг с другом, а также в отдельности интенсивным излучением импульсного CO_2 -лазера в кювете при комнатной температуре. Плотность энергии возбуждающего лазерного излучения $\Phi = 2.0 \pm 0.1$ Дж/см². Число импульсов облучения в большинстве случаев равно 50

Состав и давление облучаемого газа	Отношение конечного и начального давлений, p_N/p_0	Выход диссоциации молекул CF_2HCl , $\beta_{\text{CF}_2\text{HCl}}$, %	Выход диссоциации молекул CF_3Br , $\beta_{\text{CF}_3\text{Br}}$, %
CF_2HCl , 1 Торр	0.768	5.2	—
	0.728	6.2	—
	0.789	4.7	—
	0.719	6.2	—
	0.762	5.1	—
	0.696	6.54	—
	0.837	3.36	—
	0.682	7.87	—
CF_2HCl , 2 Торр	0.722	6.72	—
CF_3Br , 1 Торр	0.678	7.63	—
	0.612	—	4.6 ± 0.1
	0.900	—	1.99 ± 0.09
Смесь: $\text{CF}_2\text{HCl} + \text{CF}_3\text{Br}$, 0.5 Торр + 0.5 Торр	0.992	—	1.69 ± 0.05
	$\text{CF}_2\text{HCl} - 0.879$, $\text{CF}_3\text{Br} - 0.864$	2.43	2.75
Смесь: $\text{CF}_2\text{HCl} + \text{CF}_3\text{Br}$, 1.0 Торр + 1.0 Торр	$\text{CF}_2\text{HCl} - 0.660$, $\text{CF}_3\text{Br} - 0.812$	7.8	3.92
	$\text{CF}_2\text{HCl} - 0.760$, $\text{CF}_3\text{Br} - 0.870$	5.2	2.62
	$\text{CF}_2\text{HCl} - 0.615$, $\text{CF}_3\text{Br} - 0.855$	8.76	2.83
	$\text{CF}_2\text{HCl} - 0.655$, $\text{CF}_3\text{Br} - 0.807$	7.95	4.04

лении 1 Торр, усредненный по шести измерениям, составляет $\beta_{\text{CF}_2\text{HCl}} = 5.66 \pm 0.75\%$ ($\pm 13\%$ от среднего) с максимальным разбросом от 3.36 до 7.87% (в 2.34 раза), а усредненный по девяти измерениям — $\beta_{\text{CF}_2\text{HCl}} = 5.77 \pm 1.32\%$ ($\pm 23\%$) с тем же максимальным разбросом. В то же время выход диссоциации молекул CF_2HCl при облучении в смеси с молекулами CF_3Br (1 Торр $\text{CF}_2\text{HCl} + 1$ Торр CF_3Br), усредненный по четырем измерениям, составляет $\beta_{\text{CF}_2\text{HCl}} = 7.42 \pm 1.55\%$ ($\pm 21\%$) с максимальным разбросом от 5.18 до 8.76% (в 1.69 раза). Выход диссоциации CF_2HCl при увеличении давления с 1 до 2 Торр увеличился в 1.14 раза, или в 1.32 раза относительно среднего значения. Следова-

тельно, выход диссоциации молекул CF_2HCl в смеси с молекулами CF_3Br в 1.29 раза или на 1.54% (7.42%–5.66%) больше выхода диссоциации в чистом газе.

Выход диссоциации молекул CF_3Br в случае их облучения в смеси с молекулами CF_2HCl также возрастает по сравнению с выходом диссоциации при облучении чистого газа. Так, в случае облучения чистого газа CF_3Br при давлении 1 Торр выход диссоциации, усредненный по трем измерениям, составил $\beta_{\text{CF}_3\text{Br}} = 2.76 \pm 1.60\%$ ($\pm 58\%$). При этом максимальный разброс в выходах диссоциации был от 1.69 до 4.6% (разница в 2.72 раза). А выход диссоциации молекул CF_3Br при облучении в смеси

с молекулами CF_2HCl (1 Торр CF_3Br + 1 Торр CF_2HCl), усредненный по четырем измерениям, равен $\beta_{\text{CF}_3\text{Br}} = 3.35 \pm 0.73\%$ ($\pm 22\%$). При этом максимальный разброс выходов диссоциации составил от 2.62 до 4.04% (в 1.54 раза).

4.3. Обсуждение результатов

Результаты исследований, выполненных по облучению CF_2HCl и CF_3Br при комнатной температуре в кювете, показывают, что эффект вовлечения молекул CF_2HCl в резонанс с лазерным полем при облучении в смеси с поглощающими ИК-излучение молекулами CF_3Br также имеет место, как и в случае облучения колебательно охлажденных молекул. Однако этот эффект существенно менее выражен вследствие того, что при комнатной температуре молекулы CF_2HCl уже изначально поглощают излучение лазера на частоте линии $9R(30)$. На наш взгляд, исследуемый эффект был бы более четко выражен в случае облучения молекул на линиях $9R(10)$ или $9R(12)$ лазера, отстроенных примерно на $11\text{--}13\text{ см}^{-1}$ в красную область от линии $9R(30)$, на частоте которых молекулы CF_2HCl при комнатной температуре практически не поглощают ИК-излучение (см. рис. 2б). Эффект вовлечения молекул в процесс взаимодействия с лазерным полем более четко проявляется в случае облучения молекул при меньшей плотности энергии лазерного излучения (при $\Phi \leq 1.0\text{ Дж/см}^2$). Это следует из приведенных на рис. 3 данных: чем меньше плотность энергии возбуждения, тем сильнее различие в выходах диссоциации молекул в случае их облучения в смеси и в отдельности.

Следует отметить, что механизм увеличения эффективности ИК-диссоциации молекул в смеси в общих чертах аналогичен механизму увеличения эффективности ИК-диссоциации молекул в однокомпонентной среде по мере увеличения температуры и/или давления газа [62, 63]. В работе [62] на примере CF_3Br было показано, что определяющий вклад в выход многофотонной ИК-диссоциации дают молекулы, стартующие из достаточно узких ($100\text{--}150\text{ см}^{-1}$) зон термически заселенных колебательных состояний. Средняя колебательная энергия этих состояний заметно выше тепловой даже при возбуждении молекул в центре полосы линейного поглощения, и она увеличивается (для CF_3Br вплоть до 2500 см^{-1}) по мере отстройки излучения на длинноволновый край полосы. Основная часть молекул, сосредоточенная в основном в термически возбужденных низкочастотных колебательных

состояниях, слабо взаимодействует с полем и не дает вклада в выход диссоциации («резервуар»). При повышении собственного давления газа увеличивается скорость колебательно-колебательного обмена между возбужденными молекулами и молекулами «резервуара». Это приводит к попаданию молекул из «резервуара» в зону колебательных состояний, взаимодействующую с излучением. С помощью такой модели в работе [63] объяснялся резкий рост выхода диссоциации при превышении определенного собственного давления газа. В нашем случае, по-видимому, имеет место такой же механизм. При лазерном возбуждении молекул CF_3Br за счет колебательно-колебательного обмена они передают колебательную энергию молекулам CF_2HCl , в результате чего те достигают взаимодействующих с излучением колебательных состояний, что приводит к увеличению их выхода диссоциации по сравнению с выходом диссоциации в чистом газе CF_2HCl .

По нашему мнению, именно процессы столкновений возбужденных молекул между собой, включая взаимные столкновения двух типов молекул в смеси, приводят совместно с процессами резонансного для обоих типов молекул радиационного возбуждения к столь сильному увеличению выходов диссоциации при их облучении в смеси по сравнению со случаем их облучения в отдельности. Это относится и к молекулам CF_3Br . Роль колебательно-колебательного обмена энергией между молекулами, в том числе разного типа, особенно велика в условиях наличия почти резонансных колебательных уровней молекул [64], что и реализовывалось в наших экспериментах. Кроме того, сравнительно большая концентрация молекул в скачке уплотнения и их высокая поступательная и вращательная температура [35, 36] способствуют более эффективному процессу образования конечных продуктов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено (на примере молекул CF_2HCl и CF_3Br) индуцированное мощным ИК-лазером радиационно-столкновительное вовлечение молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем при их облучении с поглощающими излучение лазера молекулами в двухкомпонентной молекулярной среде. Облучение молекул проводилось в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения (ударной волны), а также в статических условиях при комнатной температуре газа в кювете.

Показано, что в случае облучения колебательно-охлажденных молекул CF_2HCl в смеси с моле-

кулами CF_3Br в скачке уплотнения, когда полосы ИК-поглощения молекул узкие (не более $7\text{--}8\text{ см}^{-1}$), происходит эффективное вовлечение молекул CF_2HCl , изначально не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем. Это происходит из-за колебательного возбуждения молекул CF_2HCl в результате быстрого столкновительного колебательно-колебательного обмена с резонансно возбуждаемыми лазером молекулами CF_3Br . Такое колебательное возбуждение приводит к заселению высоколежащих колебательных состояний молекул CF_2HCl . Ангармоническое взаимодействие, в свою очередь, приводит к красному сдвигу частоты переходов и попаданию этих состояний в резонанс с лазерным излучением.

Обнаружена эффективная диссоциация молекул CF_2HCl (с выходом диссоциации $\beta_{35} \geq 10\text{--}15\%$) при облучении смеси $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ (при соотношении давлений 1/1) в случае отстройки частоты CO_2 -лазера от центра полосы ИК-поглощения колебательно охлажденных в скачке уплотнения молекул CF_2HCl более чем на $15\text{--}25\text{ см}^{-1}$, причем при довольно низких плотностях энергии возбуждения ($\Phi \leq 0.5\text{--}1.0\text{ Дж/см}^2$), т. е. в условиях, когда в чистом газе CF_2HCl диссоциация молекул практически не имела места. Установлено, что в случае облучения молекул при комнатной температуре газа в кювете, когда полосы ИК-поглощения молекул широкие ($\geq 25\text{--}30\text{ см}^{-1}$), также наблюдается радиационно-столкновительное вовлечение молекул CF_2HCl в процесс взаимодействия с лазерным полем, но с менее ярко выраженным характером.

Показано, что за счет радиационно-столкновительного механизма возбуждения молекул в двухкомпонентной молекулярной среде можно существенно увеличить выход диссоциации и образование продуктов при лазерном ИК-возбуждении молекул, а также значительно понизить порог их диссоциации. Это особенно важно при разделении изотопов в молекулах, характеризующихся небольшим изотопным сдвигом в спектрах ИК-поглощения. Можно полагать, что наблюдаемый эффект распространяется также и на другие молекулы.

Рассмотренный подход также расширяет потенциальные возможности лазерной технологии разделения изотопов. В частности, речь идет о возможности использования в качестве рабочего вещества молекул, которые невозможно напрямую возбуждать существующими лазерами. В этом случае можно использовать специальные молекулы-сенситизаторы, столкновительная передача колебательного возбуждения с которых на целевые мо-

лекулы будет «втягивать» их в область действия лазерного излучения.

Результаты исследований по возбуждению молекул в скачке уплотнения четко демонстрируют, что эффективность изотопно-селективной лазерной ИК-диссоциации молекул можно существенно увеличить, если их облучать в смеси с резонансно поглощающим излучением лазера молекулярным газом. Совместное действие радиационного и столкновительного механизмов возбуждения молекул в условиях значительного увеличения резонансных с излучением лазера колебательно-вращательных переходов взаимодействующих между собой молекул приводит к сильному увеличению эффективности их возбуждения и диссоциации.

Полученные результаты демонстрируют возможность проведения изотопно-селективной лазерной ИК-диссоциации молекул, находящихся первоначально вне резонанса с лазерным излучением, в смеси с молекулами, поглощающими излучение лазера, при сравнительно низких плотностях энергии возбуждения и повышении вследствие этого селективности диссоциации. Результаты работы представляют интерес в плане селективного воздействия лазерным излучением на молекулы и могут найти практическое применение при использовании метода изотопно-селективной лазерной ИК-диссоциации молекул для разделения изотопов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Н. Макаров, УФН **185**, 717 (2015).
2. Г. Н. Макаров, УФН **192** (2022), в печати; <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.02.038942>.
3. J. W. Eerkens and J. Kim, *AIChE J.* **56**, 2331 (2010).
4. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **93**, 123 (2011).
5. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **146**, 455 (2014).
6. K. A. Lyakhov, H. J. Lee, and A. N. Pechen, *Separation and Purification Technol.* **176**, 402 (2017).
7. K. A. Lyakhov, A. N. Pechen, and H. J. Lee, *AIP Adv.* **8**, 095325 (2018).
8. J. Guo, Y.-J. Li, J.-P. Ma, X. Tang, and X.-S. Liu, *Chem. Phys. Lett.* **773**, 138572 (2021).
9. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **152**, 627 (2017).

10. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, КЭ **48**, 157 (2018).
11. В. М. Апатин, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **154**, 287 (2018).
12. V. N. Lokhman, G. N. Makarov, A. L. Malinovskii, A. N. Petin, D. G. Poydashev, and E. A. Ryabov, *Laser Phys.* **28**, 105703 (2018).
13. Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, КЭ **48**, 667 (2018).
14. Г. Н. Макаров, УФН **188**, 689 (2018).
15. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Д. Г. Пойдашев, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **155**, 216 (2019).
16. А. Н. Петин, Г. Н. Макаров, КЭ **49**, 593 (2019).
17. Г. Н. Макаров, УФН **190**, 264 (2020).
18. Г. Н. Макаров, КЭ **51**, 643 (2021).
19. Г. Н. Макаров, ЖЭТФ **160**, 786 (2021).
20. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ. Chur (1985).
21. C. D. Cantrell, *Multiple-Photon Excitation and Dissociation of Polyatomic Molecules* (Topics in Current Physics, Vol. 35), Springer-Verlag, Berlin (1986).
22. J. L. Lyman, G. P. Quigley, and O. P. Judd, *Multiple-Photon Excitation and Dissociation of Polyatomic Molecules*, ed. by C. D. Cantrell, Springer, Berlin (1986), p. 34.
23. Г. Н. Макаров, УФН **175**, 41 (2005).
24. В. С. Летохов, Е. А. Рябов, в сб. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, т. I, Физматлит, Москва (2005), с. 445.
25. В. Ю. Баранов, А. П. Дядькин, В. С. Летохов, Е. А. Рябов, в сб. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, т. I, Физматлит, Москва (2005), с. 460.
26. V. Yu. Baranov, A. P. Dyadkin, D. D. Malynta, V. A. Kuzmenko, S. V. Pigulsky, V. S. Letokhov, V. B. Laptev, E. A. Ryabov, I. V. Yarovoi, V. B. Zarin, and A. S. Podorashy, *Proc. SPIE* (Progress in Research and Development of High-Power Industrial CO₂-lasers) **4165**, 314 (2000).
27. А. В. Евсеев, А. А. Пурецкий, В. В. Тяхт, ЖЭТФ **88**, 60 (1985).
28. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, М. В. Сотников, КЭ **23**, 81 (1996).
29. <http://www.silex.com.au>
30. SILEX Process. www.chemeurope.com/en/encyclopedia/Silex_Process.html
31. SILEX Uranium Enrichment, SILEX Annual Report 2019, <http://www.silex.com.au>
32. J. L. Lyman, Report LA-UR-05-3786, Los Alamos National Laboratory (2005).
33. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, КЭ **46**, 248 (2016).
34. G. N. Makarov and A. N. Petin, *Chem. Phys. Lett.* **323**, 345 (2000).
35. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **119**, 5 (2001).
36. G. N. Makarov and A. N. Petin, *Chem. Phys.* **266**, 125 (2001).
37. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Опт. и спектр. **91**, 910 (2001).
38. Г. Н. Макаров, С. А. Мочалов, А. Н. Петин, КЭ **31**, 263 (2001).
39. Г. Н. Макаров, УФН **173**, 913 (2003).
40. R. S. McDowell, B. J. Krohn, H. Flicker, and M. C. Vasquez, *Spectrochim. Acta A* **42**, 351 (1986).
41. G. Baldacchini, S. Marchetti, and V. Montelatici, *J. Mol. Spectr.* **91**, 80 (1982).
42. W. Fuss, *Spectrochim. Acta A* **38**, 829 (1982).
43. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **111**, 361 (2020).
44. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **112**, 226 (2020).
45. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, КЭ **50**, 1036 (2020).
46. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **159**, 281 (2021).
47. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **115**, 292 (2022).
48. A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, P. Toninello, A. Baldacci, and S. Giorgiani, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 2491 (2006).
49. M. Snels and G. D'Amico, *J. Mol. Spectr.* **209**, 1 (2001).

50. J. B. Anderson, in *Gasdynamics, Molecular Beams and Low Density Gasdynamics*, ed. by P. P. Wegener, Marcel Dekker, New York (1974).
51. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
52. Г. Н. Абрамович, *Прикладная газовая динамика*, ч. 1, Наука, Москва (1991).
53. Е. В. Ступоченко, С. А. Лосев, А. И. Осипов, *Релаксационные процессы в ударных волнах*, Наука, Москва (1965).
54. R. Kadibelban, R. Ahrens-Botzong, and P. Hess, *Z. Naturforsch.* **37a**, 271 (1982).
55. V. Tosa, R. Bruzzese, C. De Listo, and D. Tescione, *Laser Chem.* **15**, 47 (1994).
56. J. G. McLaughlin, M. Poliakoff, and J. J. Turner, *J. Mol. Struct.* **82**, 51 (1982).
57. E. Borsella, C. Clementi, R. Fantoni, A. Giardini-Guidoni, and A. Polucci, *Nuovo Cimento* **73A**, 364 (1983).
58. M. Drouin, M. Gauthier, R. Pilon, P. A. Hackett, and C. Willis, *Chem. Phys. Lett.* **60**, 16 (1978).
59. В. Н. Кондратьев (ред.), *Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону*, Наука, Москва (1974).
60. D. S. King and J. C. Stephenson, *Chem. Phys. Lett.* **66**, 33 (1979).
61. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, *Appl. Phys. B* **53**, 108 (1991).
62. В. Б. Лаптев, Е. А. Рябов, Н. П. Фурзиков, *ЖЭТФ* **89**, 1534 (1985).
63. В. Б. Лаптев, Н. П. Фурзиков, *КЭ* **14**, 2467 (1987).
64. В. Н. Mahan, *J. Chem. Phys.* **46**, 98 (1967).

ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ БИХРОМАТИЧЕСКИМ ПОЛЕМ КРАТНЫХ $\omega + 2\omega$ ЧАСТОТ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

М. М. Попова ^{a,b*}, Е. В. Грызлова ^b, М. Д. Киселев ^{a,b,c}, А. Н. Грум-Гржимайло ^b

^a Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

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

^c Тихоокеанский государственный университет
680035, Хабаровск, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2022 г.,
после переработки 24 марта 2022 г.
Принята к публикации 25 марта 2022 г.

Изучены особенности электронной эмиссии из атомов в поле основной и второй гармоник лазера для условий, приближенных к реализованным сейчас на лазерах на свободных электронах. Получены общие выражения для угловой анизотропии и поляризации спина фотоэлектронов. Выражения применены для описания ионизации валентной оболочки атомов инертных газов и проиллюстрированы расчетами для неона. Исследована возможность управления характеристиками электронной эмиссии посредством изменения относительной фазы между гармониками, т. е. реализации одного из видов когерентного контроля.

DOI: 10.31857/S0044451022070082
EDN: EDYBTT

1. ВВЕДЕНИЕ

Концепция квантового когерентного контроля объединяет обширное множество эффектов, в основе которых лежит управление динамикой квантовой системы или ее мониторинг с помощью независимо регулируемых параметров. Когерентный контроль является мощным инструментом для демонстрации фундаментальных принципов квантовой механики и имеет непосредственное практическое приложение для изучения быстротекающих процессов [1, 2], используется в атомной физике [3], физике твердого тела [4], а также химии и биологии [5].

Впервые принцип когерентного контроля, заключающийся в создании двух (или более) путей перехода системы $|i\rangle$ в определенное конечное состояние $|f\rangle$ и управлении интерференцией соответствующих амплитуд, был сформулирован в работах [6, 7], хотя теоретические [8, 9] и экспериментальные

[10] указания на существование этой возможности были известны и раньше.

Простейший способ реализации когерентного контроля над фотоионизацией — использование бихроматического поля, состоящего из двух компонент: основной гармоники частоты ω и n -кратной гармоники частоты $n\omega$. В такой системе когерентный контроль осуществляется за счет того, что параметры гармоник (фазу, интенсивность, поляризацию и т. д.) можно изменять независимо. Электроны с энергией $\varepsilon_f = n\omega - |\varepsilon_{th}|$ (ε_{th} — порог ионизации) могут возникать в результате как однофотонной, так и многофотонной (под- или надпороговой) ионизации атома А с образованием остаточного иона A^+ :

$$A + \left\{ \begin{array}{c} \hbar\omega + \dots + \hbar\omega \\ \hbar(n\omega) \end{array} \right\} \rightarrow A^+ + e^-. \quad (1)$$

В оптическом диапазоне когерентный контроль впервые был продемонстрирован в работе [11]. Интерференция возникала при ионизации атомов ртути когерентным $(\omega + 3\omega)$ -излучением и проявлялась в изменении полного сечения ионизации при изменении фазы между ω - и 3ω -компонентами поля.

* E-mail: mm.popova@physics.msu.ru

В системах со сферической симметрией электроны, возникающие в результате одно- и двухфотонной ионизации $(\omega + 2\omega)$ -полем, обладают разной четностью и интерференция не может проявиться в интегральном по углу сечении, однако существенным образом модифицирует его угловую зависимость. Впервые когерентный контроль с использованием $(\omega + 2\omega)$ -полей был осуществлен в работах [12, 13]. Создание мощных оптических лазеров стимулировало развитие таких важных направлений исследований, как бихроматическая ионизация $(\omega + 2\omega)$ -полем оптического или инфракрасного диапазонов в режиме многофотонного поглощения, генерации гармоник или сильного поля [14–18]. Нарушение сферической симметрии атома, позволяющее наблюдать эффекты когерентного контроля в интегральных по углу характеристиках, может быть индуцировано постоянным электрическим полем [19, 20].

Прогресс в технике генерации когерентного высокочастотного излучения, вызванный развитием лазеров на свободных электронах (ЛСЭ), позволил распространить эти исследования на вакуумно-ультрафиолетовый (ВУФ) и рентгеновский диапазоны. Излучение, генерируемое ЛСЭ, содержит примеси высших гармоник, иногда нежелательные и способные исказить постановку эксперимента. Было показано [21], что в широком диапазоне энергий и интенсивностей излучения даже небольшой примеси порядка 0.1 % может быть достаточно, чтобы вероятность ионизации под воздействием высших гармоник оказалась сравнимой или даже большей вероятности ионизации под действием основной гармоники.

Для первых ЛСЭ когерентность излучения была невелика, и только после разработки схемы затравки (seeding) оказалось возможным генерировать излучение с пространственной и временной когерентностью, достаточной для реализации когерентного контроля. Впервые возможность когерентного контроля в высокочастотном диапазоне была продемонстрирована на ЛСЭ FERMI [22] в эксперименте [23], где исследовалась фотоионизация неона под действием линейно поляризованного $(\omega + 2\omega)$ -излучения. Энергия основной гармоники $\omega = 19.68$ эВ была близка к энергии перехода в возбужденное состояние $2s^2 2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4s [\frac{1}{2}]$ (см. рис. 1), что увеличило вероятность двухфотонной ионизации. Теоретическая интерпретация этого эксперимента была проведена нашей группой и базировалась на ранее изложенном подходе [24]. Подход основан на применении алгебры угловых моментов [25] для представления наблюдаемых величин в

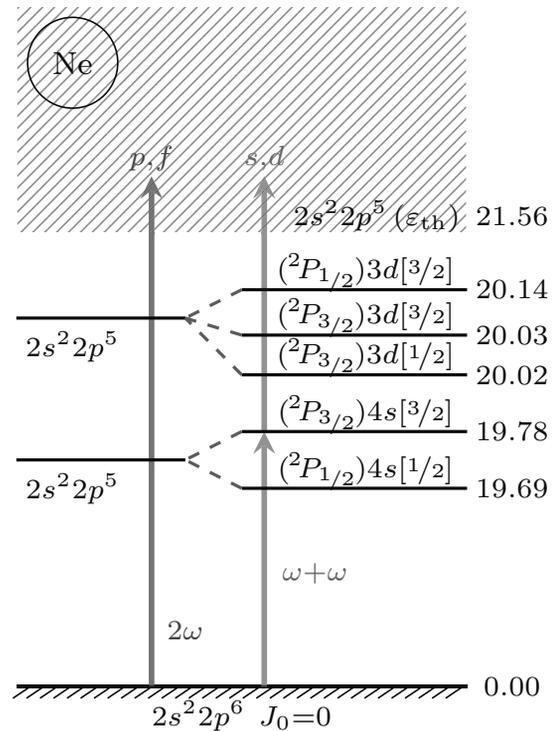


Рис. 1. Схема $(\omega + 2\omega)$ -ионизации атома неона при частоте основной гармоники ω в диапазоне энергий 19.6–20.2 эВ

терминах амплитуд переходов и расчете этих амплитуд в рамках нестационарной теории возмущений с использованием матричных элементов, полученных с помощью современных, широко используемых спектроскопических программных комплексов (например, MCHF [26], BSR [27]). Для проверки применимости теории возмущений использовалось сравнение с результатами численного решения нестационарного уравнения Шредингера (TDSE) [28].

Позднее подход был применен к исследованию когерентного контроля над угловыми распределениями электронов при $(\omega + 2\omega)$ -ионизации в других диапазонах энергии [29], для линейно и циркулярно поляризованных гармоник [30–32]. Также был рассмотрен вопрос о степени спиновой поляризации фотоэлектронов в этом процессе и возможности ей манипулировать [33, 34].

Задача настоящей работы — обобщить подход, развитый нами в работах [24, 30, 31, 33, 34], на случай полей произвольной поляризации и применить его к описанию $(\omega + 2\omega)$ -ионизации нейтрально неона в диапазоне энергий основной гармоники 19.6–20.2 эВ, покрывая тем самым область $4s$ – $3d$ -резонансов $(\omega < \epsilon_{th} < 2\omega)$, см. рис. 1).

Эксперименты в этом направлении активно продолжаются [3, 35–37], поэтому мы ожидаем, что данное обобщение будет полезно для анализа проведенных и подготовки новых экспериментов на ЛСЭ.

2. ТЕОРИЯ

Везде, где не указано иное, используется атомная система единиц.

2.1. Параметры излучения

Если электромагнитное поле \mathbf{E} состоит из двух компонент с центральными частотами ω и 2ω , то его вектор напряженности задается суммой

$$\mathbf{E}_{\omega+2\omega}(t) = E_{\omega}(t)\mathbf{e}_{\omega}e^{-i\omega t} + E_{2\omega}(t)\mathbf{e}_{2\omega}e^{-i(2\omega t+\phi)}, \quad (2)$$

где $E_{\omega(2\omega)}(t)$ — медленно меняющиеся огибающие, определяющие форму импульса, $\mathbf{e}_{\omega(2\omega)}$ — единичные векторы поляризации полей, ϕ — относительная разность фаз между гармониками.

Без потери общности можно ввести декартову систему координат xyz так, чтобы эллипс поляризации основной гармоники ω лежал в плоскости xy с большей полуосью, сонаправленной с осью x (рис. 2 а). Тогда поле ω может быть представлено в виде разложения по базису циклических ковариантных ортов [38] $\mathbf{n}_{\lambda=\pm}: \mathbf{e}_{\omega} = e^{+}\mathbf{n}_{+} + e^{-}\mathbf{n}_{-}$. Для второй гармоники 2ω в этой системе координат возможно появление компоненты $e^0\mathbf{n}_{\lambda=0}$, сонаправленной с осью z . Выбор разложения эллипсов поляризации в циклическом базисе связан с удобством построения статистического тензора электрического поля (см. табл. 1–3).

Траектория движения вектора напряженности суммарного поля замкнута за период $T = 2\pi/\omega$, а ее форма зависит от взаимной ориентации и спиральности эллипсов поляризации гармоник. Примеры результирующего поля для некоторых из них представлены на рис. 2 б–д. Для двух приведенных примеров рис. 2 б, в результирующее поле лежит в плоскости, которая остается плоскостью симметрии и для наблюдаемых фотоэлектронов; для двух других примеров рис. 2 г, д результирующее поле трехмерно.

Частоты полей подобраны так, чтобы энергия фотона 2ω была выше порога ионизации атома ($2\omega > \varepsilon_{th}$), а энергия фотона ω — ниже ($\omega < \varepsilon_{th}$). Тогда, если интенсивность излучения $I \ll I_{at} = 3.61 \cdot 10^{16}$ Вт/см², процесс $(\omega + 2\omega)$ (1) может

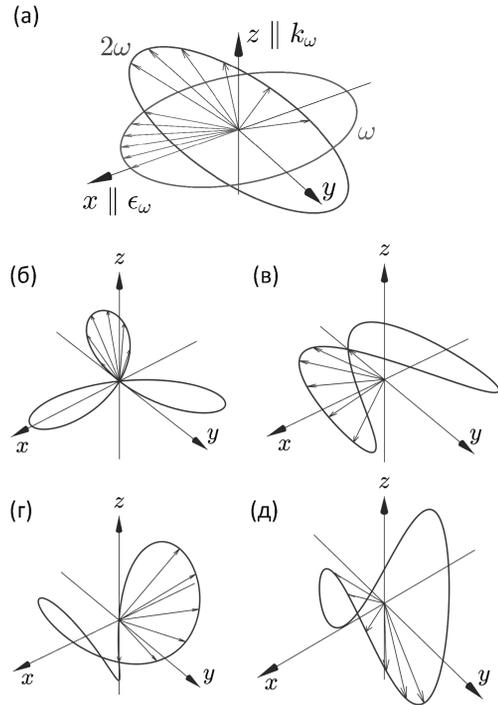


Рис. 2. (а) Система координат; (б–д) огибающие вектора напряженности электромагнитного поля \mathbf{E} для рассматриваемых в статье поляризаций и взаимных ориентаций гармоник, $E_{\omega} = E_{2\omega}$. Стрелки показывают направление и величину мгновенного электрического поля: (б) циркулярно поляризованные в одной плоскости xy гармоники противоположных спиральностей; (в) гармоники, линейно поляризованные в ортогональных (x и y) направлениях при разности фаз $\pi/4$; (г) линейно поляризованная $\mathbf{e}_{\omega} \parallel x$ и циркулярно поляризованная $\mathbf{e}_{2\omega} \in zy$ гармоники; (д) циркулярно поляризованная $\mathbf{e}_{\omega} \in xy$ и линейно поляризованная $\mathbf{e}_{2\omega} \parallel z$ гармоники

быть описан в рамках нестационарной теории возмущений [39]. Кроме того, в области частот и интенсивностей, характерных для современных ЛСЭ ($I \sim 10^{12}–10^{14}$ Вт/см², $\omega \sim 10–100$ эВ), применимо дипольное приближение, а выбор представления (форма длины или скорости) не является критическим [40].

2.2. Описание системы

Пусть набор собственных векторов $\{\psi_k\}$ и собственных значений $\{E_k\}$ невозмущенного гамильтониана известен, в момент времени t_0 система находится в начальном состоянии $\psi_i \in \{\psi_k\}$, а возмущение $U(t)$ переводит систему из состояния ψ_i в состояние $\psi_f \in \{\psi_k\}$. В рамках нестационарной теории возму-

щений амплитуду ионизации можно факторизовать на множитель, зависящий от характеристик импульса, и множитель, определяющий амплитуду ионизации при бесконечно длинном импульсе. За время действия возмущения от начального момента времени t_i до конечного t_f система перейдет в состояние, описываемое матрицей плотности

$$\rho_{ff'} = \sum_{nn'} |\psi_f\rangle \langle \psi_f | U^{(n)} | \psi_i \rangle \times \langle \psi_i | U^{(n')} | \psi_{f'} \rangle \langle \psi_{f'} |, \quad (3)$$

где n — порядок теории возмущений. В (3) вклад каждого последующего члена в вероятность перехода обычно меньше предыдущего. Однако для реализации предложенной схемы когерентного контроля необходимо, чтобы второй и первый порядки были сопоставимы. Это может быть достигнуто уменьшением интенсивности второй гармоники $E_{2\omega}$ относительно интенсивности первой гармоники E_ω . Пусть начальное “нейтральный атом” ψ_i и конечное “ион + свободный электрон с импульсом \mathbf{k}_e ” $\psi_f = \psi_f(\mathbf{k}_e)$ состояния характеризуются полным моментом $J_{i(f)}$, его проекцией $M_{i(f)}$ и другими квантовыми числами $\zeta_{i(f)}$, которые могут потребоваться для дальнейшей идентификации этих состояний.

В первом исчезающем порядке для процесса (1) в сумму (3) будет входить амплитуда перехода от компоненты электромагнитного поля с частотой 2ω :

$$\langle \psi_f | U^{(1)} | \psi_i \rangle = -i \langle \zeta_f J_f M_f | \mathbf{e}_{2\omega} \hat{\mathbf{D}} | \zeta_i J_i M_i \rangle T_{\varepsilon_i, \varepsilon_f}^{(1)}, \quad (4)$$

$$T_{\varepsilon_i, \varepsilon_f}^{(1)} = e^{-i\phi} \int_{t_i}^{t_f} E_{2\omega}(t') e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i - 2\omega t')} dt', \quad (5)$$

отвечающая однофотонной ионизации под действием второй гармоники; а от компоненты с частотой ω — амплитуда

$$\langle \psi_f | U^{(2)} | \psi_i \rangle = (-i)^2 \sum_n \langle \zeta_f J_f M_f | \mathbf{e}_\omega \hat{\mathbf{D}} | \zeta_n J_n M_n \rangle \times \langle \zeta_n J_n M_n | \mathbf{e}_\omega \hat{\mathbf{D}} | \zeta_i J_i M_i \rangle T_{\varepsilon_i, \varepsilon_n, \varepsilon_f}^{(2)}, \quad (6)$$

$$T_{\varepsilon_i, \varepsilon_n, \varepsilon_f}^{(2)} = \int_{t_i}^{t_f} E_\omega(t') e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_n - \omega)t'} \times \int_{t_i}^{t'} E_\omega(t'') e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_i - \omega)t''} dt'' dt', \quad (7)$$

отвечающая двухфотонной ионизации через промежуточные состояния $|\zeta_n J_n M_n\rangle$. Здесь $\varepsilon_{i(n,f)} \in \zeta_{i(n,f)}$ — энергии соответствующих состояний, \sum_n обозначает суммирование по дискретным промежуточным состояниям $|\zeta_n, J_n\rangle$ и интегрирование по состояниям континуума, $\hat{\mathbf{D}}$ — электрический дипольный оператор перехода, представимый в виде разложения по проекциям на циклические ковариантные орты в выбранной системе координат:

$$\mathbf{e}_{\omega(2\omega)} \hat{\mathbf{D}} = \sum_\lambda e_{\omega(2\omega)}^\lambda D_\lambda. \quad (8)$$

Мы полагаем, что остаточный ион не детектируется, поэтому для определения матрицы плотности электрона нужно взять след матрицы плотности (3) по состояниям $|J_c M_c\rangle$ ионного остова. Матрица плотности электрона, как и любой частицы со спином 1/2, представляется в следующем виде:

$$\left\langle \frac{1}{2} m_s | \rho | \frac{1}{2} m'_s \right\rangle = \frac{W}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Подчеркнем, что и матрица плотности (9), и параметры поляризации спина электрона $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ являются функциями энергии фотозлектрона и направления электронной эмиссии $\{\vartheta, \varphi\}$. Свертка (9) по проекции спина электрона дает его угловое распределение $W = W(\vartheta, \varphi)$ — вероятность регистрации электрона в соответствующем направлении.

Построение наблюдаемых из (3) может быть довольно громоздким из-за большого числа комбинаций проекций моментов M_i, M_f и др. Удобнее воспользоваться формализмом статистических тензоров [25], с помощью которых можно а) сразу исключить зависимость от проекций моментов и б) факторизовать динамическую (спектроскопическую) и геометрическую части.

Статистический тензор спина электрона получается из матрицы плотности (9) по определению:

$$\rho_{k_s q_s} = \sum_{m_s m'_s} (-1)^{1/2 - m'_s} \left(\frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} - m'_s k_s q_s \right) \times \left\langle \frac{1}{2} m_s | \rho | \frac{1}{2} m'_s \right\rangle, \quad (10)$$

где введено стандартное обозначение для коэффициентов Клебша – Гордана. Полезно представить обратное к (10) преобразование к угловому распреде-

лению и компонентам спина фотоэлектронов в явном виде:

$$W = \sqrt{2}\rho_{00}, \quad (11)$$

$$P_z = \rho_{10}/\rho_{00}, \quad (12)$$

$$P_x = -(\rho_{11} - \rho_{1-1})/(\sqrt{2}\rho_{00}), \quad (13)$$

$$P_y = -i(\rho_{11} + \rho_{1-1})/(\sqrt{2}\rho_{00}). \quad (14)$$

2.3. Статистические тензоры системы одного и двух фотонов

В отличие от случая статистических тензоров электрона, построение статистического тензора системы фотонов является нетривиальным. Статистический тензор бихроматического электромагнитного поля в дипольном приближении согласно определению имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) &= \\ &= \sum_{M_\gamma, M'_\gamma} (-1)^{J'_\gamma - M'_\gamma} \langle J_\gamma M_\gamma, J'_\gamma - M'_\gamma | k_\gamma q_\gamma \rangle \times \\ &\times \langle J_\gamma M_\gamma | \gamma + 2\gamma \rangle \langle \gamma + 2\gamma | J'_\gamma M'_\gamma \rangle, \quad (15) \end{aligned}$$

где J_γ, M_γ — момент и проекция момента фотона (системы из двух эквивалентных фотонов) $|\gamma\rangle(|2\gamma\rangle)$:

$$|\gamma\rangle = \sum_\lambda e_{2\omega}^\lambda |1\lambda\rangle, \quad (16)$$

$$|2\gamma\rangle = \sum_{M_\gamma, \lambda, \lambda'} e_\omega^\lambda e_\omega^{\lambda'} (1\lambda, 1\lambda' | J_\gamma M_\gamma) |1\lambda\rangle |1\lambda'\rangle. \quad (17)$$

Результирующий момент двух дипольных фотонов J_γ может принимать только значения 0 или 2, что является следствием симметризации волновой функции системы двух бозонов. В статистическом тензоре бихроматического поля можно выделить три части, соответствующие переходу в конечное состояние с определенной энергией ε_f : слагаемое, происходящее от поглощения одного фотона энергии 2ω , что соответствует однофотонной ионизации атома; слагаемое, происходящее от поглощения двух фотонов энергии ω , что соответствует двухфотонной ионизации ($\omega + \omega$); и их интерференция ($\omega + 2\omega$):

$$\rho_{k_\gamma q_\gamma} = \rho_{k_\gamma q_\gamma}^{2\omega, 2\omega} + \rho_{k_\gamma q_\gamma}^{\omega + \omega, \omega + \omega} + \left(\rho_{k_\gamma q_\gamma}^{\omega + \omega, 2\omega} + \rho_{k_\gamma q_\gamma}^{2\omega, \omega + \omega} \right). \quad (18)$$

Компоненты статистических тензоров, представленные в виде разложения по проекциям на орты $\mathbf{n}_{\lambda=0, \pm}$, представлены в табл. 1–3 (индексы “ $\omega(2\omega)$ ” опущены для краткости записи). Следует отметить

Таблица 1. Компоненты статистического тензора дипольного фотона $\rho_{kq}^{2\omega, 2\omega}(J, J')$

$kq \setminus JJ'$	1, 1
00	$1/\sqrt{3}$
10	$(e^+ ^2 - e^- ^2)/\sqrt{2}$
11	$-(e^{-*}e^0 + e^+e^{0*})/\sqrt{2}$
20	$(1 - 3 e^0 ^2)/\sqrt{6}$
21	$(e^0e^{-*} - e^+e^{0*})/\sqrt{2}$
22	e^+e^{-*}

Таблица 2. Интерференционные компоненты статистического тензора поля $\omega + 2\omega$ $\rho_{kq}^{2\omega, \omega + \omega}(J, J')$ (сопряженные коэффициенты соответствуют основной гармонике ω)

$kq \setminus JJ'$	1, 0
10	$2e^0e^{-*}e^{+*}/\sqrt{3}$
11	$2e^+(e^{-*})^2/\sqrt{15}$
$kq \setminus JJ'$	1, 2
10	$-2e^0e^{-*}e^{+*}/\sqrt{15}$
11	$e^{-*}(3e^{-*}e^- + e^{+*}e^+)/\sqrt{15}$
21	$e^{-*}(e^{+*}e^+ - e^{-*}e^-)/\sqrt{3}$
22	$-\sqrt{6}e^0(e^{-*})^2/3$
30	$\sqrt{10}e^0e^{-*}e^{+*}/5$
31	$e^{-*}(e^{-*}e^- + 2e^{+*}e^+)/\sqrt{15}$
32	$e^0(e^{-*})^2/\sqrt{3}$
33	$e^+(e^{-*})^2$

связь между используемой в настоящей работе параметризацией и параметризацией в собственной системе фотона (ось квантования z^0 параллельна импульсу фотона \mathbf{k}_γ , $|\gamma^0\rangle = e_0^+ \mathbf{n}_+^0 + e_0^- \mathbf{n}_-^0$). Она определяется соответствующим поворотом системы координат и выражается через D -функции Вигнера [25]:

$$|\gamma^0\rangle = \sum_\lambda e^\lambda D_{\lambda 0}^1(\varphi_{\mathbf{k}_\gamma}, \vartheta_{\mathbf{k}_\gamma}, 0) |1\lambda\rangle.$$

В собственной системе можно определить степени циркулярной и линейной поляризаций $P_c = \frac{|e_0^+|^2 - |e_0^-|^2}{|e_0^+|^2 + |e_0^-|^2}$ и $P_l = \sqrt{1 - P_c^2}$, эллиптичность поля $\epsilon = \sqrt{(1 - P_l)/(1 + P_l)}$ и спиральность $\lambda = \text{sign}(P_c)$.

Как видно из табл. 1, в собственной системе фотона статистические тензоры с нечетной проекцией запрещены. Для циркулярно поляризованного поля $P^c = 1$, что соответствует $e^+(e^-) = 1$, разрешены только компоненты с $q = 0$.

Таблица 3. Компоненты статистического тензора двух одинаковых дипольных фотонов $\rho_{kq}^{\omega+\omega, \omega+\omega}(J, J')$

$kq \setminus JJ'$	0, 0
00	$4 e^- ^2 e^+ ^2/3$
$kq \setminus JJ'$	0, 2
20	$2\sqrt{2} e^- ^2 e^+ ^2/3$
22	$2e^+e^{-*} e^- ^2/\sqrt{3}$
$kq \setminus JJ'$	2, 2
00	$\sqrt{5}(3 - 4 e^- ^2 e^+ ^2)/15$
10	$-\sqrt{10}(e^- ^2 - e^+ ^2)/5$
20	$\sqrt{14}(3 - 8 e^- ^2 e^+ ^2)/21$
22	$2e^+e^{-*}/\sqrt{21}$
30	$(e^+ ^2 - e^- ^2)/\sqrt{10}$
32	$e^+e^{-*}(e^+ ^2 - e^- ^2)/\sqrt{3}$
40	$(1 + 2 e^- ^2 e^+ ^2)/\sqrt{70}$
42	$e^+e^{-*}/\sqrt{7}$
44	$e^{+2}(e^{-*})^2$

Из табл. 2 видно, что четные проекции у нечетных рангов появляются при обязательном условии $e^0 \neq 0$, что соответствует случаю, когда вторая гармоника распространяется под некоторым углом к основной.

Как видно из табл. 3, полный момент $J = 0$ возможен, только если поле содержит и правую, и левую компоненты, т. е. $P_c \neq 1$. При этом, если поле поляризовано линейно ($e^+ = e^-$, $P_l = 1$), то нечетные ранги исчезают. Если поле циркулярно поляризовано $e^+(e^-) = 1$, то разрешены только ранги с нулевой проекцией.

2.4. Построение наблюдаемых величин

В представлении статистических тензоров углового момента наблюдаемые \mathcal{O} конструируются сверткой тензора конечной системы $\rho_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta'_f J'_f)$ с соответствующими этим наблюдаемым тензорами эффективности детекторов $\varepsilon_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta'_f J'_f)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{O} &= \text{Tr} [\rho(J_f, J_{f'}) \varepsilon(J_f, J'_{f'})^*] \equiv \\ &\equiv \sum_{k_f q_f} \sum_{J_f J'_f} \sum_{\zeta_f \zeta'_f} \rho_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta'_f J'_f) \times \\ &\quad \times \varepsilon_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta'_f J'_f)^*. \quad (19) \end{aligned}$$

Для построения тензора конечной системы “ион + электрон” в соответствии с общими правилами [25] в амплитудах (4) и (6) необходимо выделить приведенные амплитуды ионизации $A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f}$, не зависящие от характеристик поля и проекций моментов:

$$\langle \psi_f | U^{(1)} | \psi_i \rangle = \hat{J}_f^{-1} A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} \langle lm | \mathbf{n}_e \rangle^{\zeta_i \zeta_f} \times \sum_{\lambda} e_{2\omega}^{\lambda}(J_i M_i, 1\lambda | J_f M_f), \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | U^{(2)} | \psi_i \rangle &= \hat{J}_f^{-1} A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} \langle lm | \mathbf{n}_e \rangle^{\zeta_i \zeta_f} \times \\ &\quad \times \sum_{J_\gamma M_\gamma \lambda \lambda'} e_{\omega}^{\lambda} e_{\omega'}^{\lambda'}(J_i M_i, J_\gamma M_\gamma | J_f M_f) \times \\ &\quad \times (1\lambda, 1\lambda' | J_\gamma M_\gamma), \quad (21) \end{aligned}$$

где $\langle lm | \mathbf{n}_e \rangle^{\zeta_i \zeta_f}$ — разложение единичного вектора импульса фотоэлектрона $\mathbf{n}_e = \mathbf{k}_e/k$ по сферическим гармоникам $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, явный вид которого зависит от порядка связи моментов, и $\hat{a} = \sqrt{2a+1}$.

Тогда тензор конечной системы примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \rho_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta'_f J'_f) &= \sum_{\substack{J_i J_\gamma J'_f \\ k_i, \gamma q_i, \gamma}} \rho_{k_i q_i}(\zeta_i J_i, \zeta_i J_i) \times \\ &\quad \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma J'_\gamma) \hat{k}_i \hat{k}_\gamma(k_i q_i, k_\gamma q_\gamma | k_f q_f) \begin{Bmatrix} J_i & J_\gamma & J_f \\ J_i & J'_\gamma & J'_f \\ k_i & k_\gamma & k_f \end{Bmatrix} \times \\ &\quad \times A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} A_{J_i J'_\gamma J'_f}^{\zeta_i \zeta_f*}. \quad (22) \end{aligned}$$

Здесь конструкция в фигурных скобках — это стандартное обозначение $9j$ -символа Вигнера. Зависимость от фазы между полями сохраняется в (22) только для слагаемых, в которых приведенные амплитуды $A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f}$ и $A_{J_i J'_\gamma J'_f}^{\zeta_i \zeta_f*}$ происходят от ионизации различными гармониками, т. е. только для интерференционных членов.

Для дальнейших преобразований в (19) необходимо определить порядок связи моментов. Мы выбрали $j\kappa$ -схему связи, в которой полный момент иона \mathbf{J}_c сначала связывается с орбитальным моментом электрона \mathbf{l} в промежуточное квантовое число $\mathbf{J}_c + \mathbf{l} = \boldsymbol{\kappa}$, а затем — со спином фотоэлектрона в полный момент системы $\mathbf{J} - \boldsymbol{\kappa} + 1/2 = \mathbf{J}$. Приведенная амплитуда однофотонного перехода в $j\kappa$ -связи имеет вид

$$\begin{aligned} A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} &= \\ &= -i \langle \varepsilon_f, (J_c l) \kappa_f \frac{1}{2} : J_f || D || \varepsilon_i, J_i \rangle T_{\varepsilon_i, \varepsilon_f}^{(1)}. \quad (23) \end{aligned}$$

Здесь уже конкретизировано, от каких квантовых чисел зависит амплитуда: $\zeta_i = \{\varepsilon_i\}$, $\zeta_n = \{\varepsilon_n\}$ и $\zeta_f = \{\varepsilon_f, (J_c, l)\kappa_f\}$. Для двухфотонного перехода

$$A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} = (-1)^{J_i + J_n} \hat{J}_\gamma \sum_n \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & J_\gamma \\ J_i & J_f & J_n \end{matrix} \right\} T_{\varepsilon_i, \varepsilon_n, \varepsilon_f}^{(2)} \times \\ \times \langle E, (J_c l) \kappa_f \frac{1}{2} : J_f D \varepsilon_n, J_n \rangle \times \\ \times \langle \varepsilon_n, J_n || D || \varepsilon_i, J_i \rangle. \quad (24)$$

Каждая пара амплитуд, отвечающих за интерференцию одно- и двухфотонных переходов (23) и (24), имеет одинаковую зависимость от фазы между гармониками

$$A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i \zeta_f} A_{J_i J_\gamma J_f}^{\zeta_i' \zeta_f'} \sim \exp \left[\mp i(\phi - \delta_{J_f J_f'}) \right],$$

где знак зависит от того, какая амплитуда — одно- или двухфотонная — сопряжена, а $\delta_{J_f J_f'}$ — разность фаз в соответствующих каналах реакции. По правилам сложения тригонометрических функций каждая компонента статистического тензора, отвечающая за интерференцию, будет иметь зависимость

$$\cos(\phi - \phi_{max}), \quad (25)$$

где фаза ϕ_{max} будет определена ниже.

Полагая, что конечный ион с полным моментом J_c не детектируется, из общего тензора эффективности регистрации частиц в конечном состоянии,

$$\varepsilon_{k_f q_f}(\zeta_f J_f, \zeta_f' J_f') = \sum_{\substack{k_s q_s \\ k_l q_l}} \varepsilon_{k_s q_s} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \varepsilon_{k_l q_l}(\kappa_f, \kappa_f') \times \\ \times \hat{k}_l \hat{k}_s \hat{J}_f \hat{J}_f'(k_l q_l, k_s q_s | k_f q_f) \left\{ \begin{matrix} \kappa_f & \frac{1}{2} & J_f \\ \kappa_f' & \frac{1}{2} & J_f' \\ k_l & k_s & k_f \end{matrix} \right\}, \quad (26)$$

можно выделить часть, связанную с наблюдением электронов в определенном направлении $\{\vartheta, \varphi\}$:

$$\varepsilon_{k_l q_l}(\kappa_f, \kappa_f') = \\ = \hat{k}_f \hat{k}_f' (-1)^{\kappa_f + l' + J_c + k_l} \left\{ \begin{matrix} k_l & l & l' \\ J_c & \kappa_f' & \kappa_f \end{matrix} \right\} \varepsilon_{k_l q_l}(l, l'), \quad (27)$$

где $\varepsilon_{k_l q_l}(l, l')$ — тензор эффективности регистрации электронов в направлении $\{\vartheta, \varphi\}$,

$$\varepsilon_{k_l q_l}(l, l') = (-1)^{l'} \hat{l}'(l_0, l'_0 | k_l 0) \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{k}_l} Y_{k_l q_l}^*(\vartheta, \varphi). \quad (28)$$

Компоненты тензора эффективности регистрации спина электрона в лабораторной системе координат записываются как

$$\varepsilon_{k_s q_s} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = \\ = \sum_{m_s m_s'} (-1)^{1/2 - m_s'} \left(\frac{1}{2} m_s \frac{1}{2} - m_s' k_s q_s \right) \times \\ \times \left\langle \frac{1}{2} m_s | \varepsilon | \frac{1}{2} m_s' \right\rangle, \quad (29)$$

где $\langle \frac{1}{2} m_s | \varepsilon | \frac{1}{2} m_s' \rangle$ — матрица эффективности регистрации спина фотоэлектронов. В идеальном детекторе матрицей эффективности детектора, регистрирующего только электроны с компонентой спина $P_x(y, z)$, является соответствующая матрица Паули [25].

Для анализа угловой зависимости эмиссии электронов и их поляризации \mathbf{P} в (19) удобно выделить динамические параметры $B_{k_i k_\gamma k_l k_s k_f}(J_i J_\gamma, J_i J_\gamma')$, зависящие от характеристик мишени, энергии фотона и параметров импульса, и геометрический фактор, определяемый поляризациями полей и направлением эмиссии $\{\vartheta, \varphi\}$. Их явный вид можно получить прямой подстановкой выражений (22) и (26)–(28) в (19). Тогда статистический тензор спина электрона, детектируемого в направлении $\{\vartheta, \varphi\}$, представляется в виде

$$\rho_{k_s q_s} = \sum_{k_i, \gamma, f, l, q_i, \gamma, f, l} B_{k_i k_\gamma k_l k_s k_f}(J_i J_\gamma, J_i J_\gamma') \times \\ \times \rho_{k_i q_i}(J_i, J_i) \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma J_\gamma') \times \\ \times (k_i q_i, k_\gamma q_\gamma | k_f q_f)(k_l q_l, k_s q_s | k_f q_f) Y_{k_l q_l}(\vartheta, \varphi). \quad (30)$$

Для мишени с $J_i = 0$ полный момент системы $J_f = J_\gamma$, $k_i = 0$ и $k_f = k_\gamma = k$, и статистический тензор может быть записан в виде

$$\rho_{k_s q_s} = \sum_{k_l, \gamma, q_l, \gamma} B_{k_l k_s k_\gamma}(J_\gamma, J_\gamma') \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J_\gamma') \times \\ \times (k_l q_l, k_s q_s | k_\gamma q_\gamma) Y_{k_l q_l}(\vartheta, \varphi). \quad (31)$$

Здесь для краткости мы положили

$$B_{0 k_\gamma k_l k_s k_\gamma}(J_i J_\gamma, J_i J_\gamma') \equiv B_{k_l k_s k_\gamma}(J_\gamma, J_\gamma').$$

Для статистических тензоров фотона и спина электрона справедливы перестановочные соотношения

$$\rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J_\gamma') = (-1)^{J_\gamma - J_\gamma' + q_\gamma} \rho_{k_\gamma - q_\gamma}^*(J_\gamma', J_\gamma), \\ \rho_{k_s q_s} = (-1)^{q_s} \rho_{k_s - q_s}^*,$$

а для динамического параметра —

$$B_{k_l k_s k_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) = (-1)^{J_\gamma - J'_\gamma + k_l + k_s + k_\gamma} B_{k_l k_s k_\gamma}^*(J'_\gamma, J_\gamma).$$

2.5. Спектроскопия

В расчетах использовалась та же спектроскопическая модель, что и в работе [34].

Расчеты проводились методом R -матрицы [27] с использованием экспериментальных энергий порогов [41]. Учитывались все возможные термы конфигураций $1s^2 2s^2 2p^5 n s$ ($n = 3, 4, 5, 6$), $1s^2 2s^2 2p^5 n d$ ($n = 3, 4, 5$), $1s^2 2s^2 2p^4 3s 3p$, $3p 4s$ и $1s^2 2s^1 2p^5 3s 3d$.

Результаты расчетов в различных потенциальных моделях [30, 42, 43] указывают на весомый, однако слабо зависящий от энергии фотона ω ($\omega < \varepsilon_{th} < 2\omega$), вклад переходов через состояния континуума в конечное f -состояние. Эти переходы были учтены добавлением постоянного члена в амплитуды ионизации в эти состояния.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Угловое распределение электронов

Все дальнейшие рассуждения справедливы для мишеней с $J_i = 0$ (инертные газы), а численные результаты, если не указано иное, представлены для энергии основной гармоники, соответствующей возбуждению $2p^5(^2P_{3/2})4s[\frac{3}{2}]$ резонанса неона, импульса длиной $N = 500$ оптических циклов (порядка 100 фс) с огибающей $E_{\omega(2\omega)}(t) = \sin^2(\omega t/2N)$, напряженностей компонент электромагнитного поля $|E_\omega| = 5.338 \cdot 10^{-3}$ ат. ед., $E_{2\omega}/E_\omega = \sqrt{0.001}$, и нулевой разности фаз между ними $\phi = 0$. Такая огибающая обеспечивает плавность включения и выключения импульса, что частично устраняет различия расчетов в представлении длины и скорости [44, 45]. Приведенные ниже результаты получены в представлении длины, так как для линейной поляризации они лучше согласуются с имеющимися экспериментальными данными [23].

По определению (11) угловое распределение фотоэлектронов (PAD) получается из (31) в виде разложения по сферическим гармоникам:

$$W(\vartheta, \varphi) = \sum_{kq} \beta_{kq} Y_{kq}(\vartheta, \varphi), \quad (32)$$

где во втором порядке теории возмущений и дипольном приближении $k \leq 4$, а

$$\beta_{kq} \equiv \sum_{J_\gamma J'_\gamma} B_{k0k}(J_\gamma, J'_\gamma) \rho_{kq}(J_\gamma, J'_\gamma) = (-1)^q \beta_{k-q}^*$$

Из анализа коэффициента Клебша – Гордана в (28), (31) следует вывод, что вклад в угловое распределение (32) дают только четные ранги фотонных статистических тензоров $\rho_{kq}^{2\omega, 2\omega}$ и $\rho_{kq}^{\omega+\omega, \omega+\omega}$ и только нечетные — тензоров $\rho_{kq}^{2\omega, \omega+\omega}$ и $\rho_{kq}^{\omega+\omega, 2\omega}$. Поэтому параметры β_{kq} четных рангов появляются в результате одно- или двухфотонной ионизации; параметры β_{kq} нечетных рангов имеют интерференционную природу и зависят от разности фаз между гармониками ϕ . Параметры β_{k0} действительны, остальные могут быть комплексными. Последнее приводит к тому, что максимумы и минимумы PAD не совпадают с экстремумами сферических гармоник. Важно отметить, что в общем случае PAD не наследует симметрию поля, в отличие от ионизации двумя некогерентными гармониками.

Как следует из (25), зависимость формы углового распределения (32) от фазы между полями всегда может быть параметризована:

$$W = S_1(\vartheta, \varphi) + S_2(\vartheta, \varphi) \cos(\phi - \phi_{max}(\vartheta, \varphi)), \quad (33)$$

где $S_1(\vartheta, \varphi)$ и $S_2(\vartheta, \varphi)$ — вклады от некогерентной суммы одно- и двухфотонных переходов и их интерференции соответственно, ϕ_{max} — фаза, при которой число фотоэлектронов в данном направлении $\{\vartheta, \varphi\}$ максимально. $S_1(\vartheta, \varphi)$, $S_2(\vartheta, \varphi)$ и ϕ_{max} являются сложными функциями сферических координат, и только в некоторых случаях влияние фазы между гармониками на форму PAD поддается простому описанию. Например, для циркулярно поляризованных в одной плоскости гармоник изменение фазы вызывает поворот PAD в пространстве [31].

Основываясь на сказанном выше, мы предлагаем выбрать следующий критерий когерентного контроля:

$$C(\vartheta, \varphi) = \left| \frac{W(\vartheta, \varphi)_{\phi=\phi_{max}} - W(\vartheta, \varphi)_{\phi=\phi_{max}+\pi}}{W(\vartheta, \varphi)_{\phi=\phi_{max}} + W(\vartheta, \varphi)_{\phi=\phi_{max}+\pi}} \right|. \quad (34)$$

Отметим, что он является обобщением критериев, принятых в работах [30, 31] для описания взаимодействия с линейно и циркулярно поляризованными полями. Очевидно, что эффективность когерентного контроля $C(\vartheta, \varphi) \leq 1$ будет разной в разных направлениях, и в общем случае оказывается невозможным выделить какое-то одно из них. Если для некоторых $\{\vartheta', \varphi'\}$ величина $C(\vartheta', \varphi') = 1$, то можно говорить о достижении полного когерентного контроля в этом направлении.

Развитый подход позволяет проследить трансформацию углового распределения фотоэлектронов

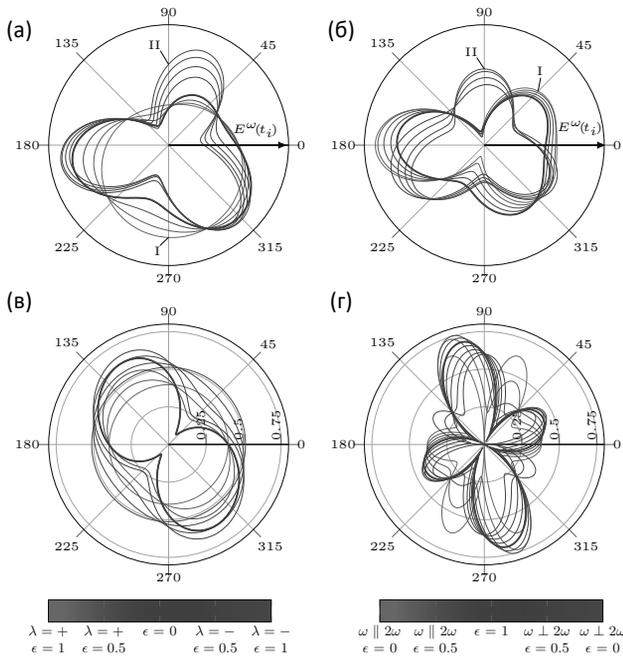


Рис. 3. (В цвете онлайн) Трансформация формы PAD в плоскости поляризации гармоник ($\phi = 0$): (а) круговой правополяризованной основной гармоники ($\epsilon = 1, \lambda = +$) при изменении эллиптичности и спиральности второй гармоники от круговой правополяризованной ($\epsilon = 1, \lambda = +$, красная линия) до круговой левополяризованной ($\epsilon = 1, \lambda = -$, синяя); (б) линейно поляризованной основной гармоники ($\epsilon = 0$) при изменении эллиптичности и ориентации главной оси поляризации второй гармоники от сонаправленной линейно поляризованной ($\epsilon = 0$, красная) до линейно поляризованной перпендикулярно основной ($\epsilon = 0$, синяя). (в,г) Степень когерентного контроля $C(\theta, \varphi)$ (34) для (а,б) соответственно

при изменении поляризации полей между выделенными конфигурациями с простой параметризацией, которые были рассмотрены ранее в работах [30, 31, 34], а именно для линейно и циркулярно поляризованных полей, находящихся в одной плоскости xy (рис. 3). Для полей, поляризованных в одной плоскости, неинтерференционные слагаемые дают вклад в компоненты разложения с $k = 0, 2, 4$, $q = 0, \pm 2, \pm 4$, а интерференционные — с $k = 1, 3$, $q = \pm 1, \pm 3$. Таким образом, в (32) остаются только четные гармоники с четными проекциями и нечетные гармоники с нечетными проекциями.

Плоскость поляризации, очевидно, является плоскостью симметрии углового распределения электронов, а сечение фотоионизации в ней максимально. Вне этой плоскости нет каких-либо особенностей, поэтому можно ограничиться рас-

смотрением PAD в ее сечении.

Слагаемое с $q = \pm 3$, соответствующее тензору третьего ранга, происходит от интерференции компонент противоположных спиральностей (см. табл. 2), и обладает симметрией поворота на $120^\circ D_{3h}$, для него существует три плоскости симметрии, перпендикулярных плоскости поляризации. Слагаемые с $q = \pm 1$ происходят от интерференции компонент одинаковых спиральностей. Поскольку первый и третий ранги зависят от полярного угла по-разному, плоскости симметрии, перпендикулярной плоскости поляризации, в общем случае не существует. Возникает она, например, при ионизации s -оболочки [32] за счет уменьшения числа каналов.

Неинтерференционные члены с $q = \pm 2, \pm 4$, соответствующие тензорам второго и четвертого ранга, возникают при значениях эллиптичности полей $\epsilon < 1$ (см. табл. 1 и 3) и максимальны для линейно поляризованных полей $\epsilon = 0$. Они приводят к появлению слагаемых с симметрией D_{2h} и D_{4h} .

На рис. 3а красная и синяя линии (I) и (II) соответствуют предельным случаям гармоник круговой поляризации с одинаковой и противоположной спиральностями соответственно, рассмотренными в [31]. Жирной фиолетовой линией выделен PAD для линейно поляризованной второй гармоники $\epsilon = 0$, неакцентированные линии соответствуют промежуточным значениям эллиптичности $\epsilon < 1$. Основная гармоника при этом всегда имеет правую круговую поляризацию. В предельных случаях вклады как от однофотонной ионизации, так и от двухфотонной обладают аксиальной симметрией, и результирующая симметрия PAD определяется только интерференционным членом.

Другой пример трансформации (см. рис. 3б): при фиксированной линейной поляризации основной гармоники поляризация второй меняется от линейной вдоль оси x до линейной вдоль оси y за счет изменения эллиптичности ϵ от 0 до 1 и обратно. Красная и синяя линии (I) и (II) соответствуют предельным случаям параллельно и перпендикулярно поляризованных полей, рассмотренных в работах [30, 34]. В первом случае PAD аксиально симметрично относительно оси x , во втором появляется плоскость симметрии yz , перпендикулярная плоскости xy , содержащей векторы поляризации. Случай, когда вторая гармоника поляризована циркулярно и произведенный ей вклад в угловое распределение обладает аксиальной симметрией, выделен жирной фиолетовой линией.

Угловые распределения, выделенные жирной фиолетовой линией на рис. 3а, б, отвечают случаям,

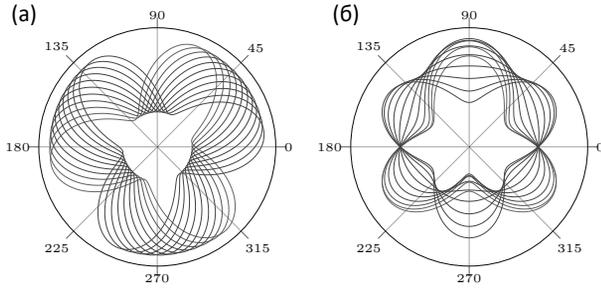


Рис. 4. (В цвете онлайн) Трансформация формы PAD в плоскости поляризации гармоник при изменении фазы между полями ϕ от 0 до π с шагом 0.1π для (а) гармоник круговой поляризации противоположных спиральностей, поляризованных в одной плоскости, (б) линейно поляризованных в перпендикулярных направлениях гармоник

когда основная (вторая) гармоника обладает круговой поляризацией и вторая (основная) — линейной вдоль оси x . В обоих случаях огибающая поля обладает плоскостью симметрии xz , которая при этом не является плоскостью симметрии углового распределения.

На рис. 3в,г показана степень когерентного контроля $C(\vartheta, \varphi)$ (34) для поляризаций полей, показанных на рис. 3а,б соответственно. Синяя и красная линии на рис. 3в представляют собой окружности, так как для полей круговой поляризации изменение фазы вызывает поворот PAD в пространстве, и поэтому с точки зрения осуществления когерентного контроля какое-либо выделенное направление отсутствует. Для циркулярно поляризованной основной гармоники (рис. 3в) угловая зависимость $C(\vartheta, \varphi)$ является более плавной, чем для линейно поляризованной (рис. 3г), а ярко выраженные экстремумы возникают только тогда, когда вторая гармоника поляризована линейно.

Важно отметить, что, несмотря на внешнюю схожесть, PAD для гармоник круговой поляризации противоположных спиральностей и для линейно поляризованных гармоник в перпендикулярных направлениях (три максимума и минимума, отстоящие по φ на $2\pi/3$) по-разному ведут себя при изменении фазы между полями ϕ . Первое PAD при изменении фазы поворачивается вокруг оси z , сохраняя форму (рис. 4а), а второе имеет три максимума, ориентированных в $\varphi = \pi/2, \pm 5\pi/6$, величина которых регулируется фазой между гармониками (см. рис. 4б). Это объясняется тем, что в первом случае параметры анизотропии PAD нечетного порядка $\beta_{k=odd}$ являются комплексными, а во втором случае все $\beta_{k=odd}$ мнимые, а значит, имеют одинаковую фазу $\pi/2$. Хо-

тя в обоих угловых распределениях максимальные степени когерентного контроля $C(\vartheta, \varphi)$ в плоскости поляризации сравнимы (порядка 50% для выбранных параметров, см. рис. 3в,г), их угловые зависимости существенно различаются: в первом случае какие-либо выделенные направления отсутствуют, а во втором такое направление, связанное с вектором поляризации второй гармоники $\mathbf{e}_{2\omega} \parallel y$, присутствует. Схожая ситуация — все $\beta_{k=odd}$ действительные, т.е. имеют одинаковую фазу равную нулю — наблюдается также для ионизации полями, линейно поляризованными в одном направлении.

3.2. Поляризация спина электрона

В этом разделе мы применяем развитый метод к описанию поляризации спина фотоэлектронов. Поляризацию спина электронов, испущенных при ионизации неполяризованного атома, можно наблюдать, если существует какой-либо механизм пространственного и (или) энергетического разделения электронов, имеющих различные проекции спина на выделенную ось. Обычно в литературе [46, 47] рассматривается ситуация, когда это разделение возникает за счет тонкого расщепления конечных состояний иона и, как и другие эффекты, вызванные электрон-электронными корреляциями, может усиливаться в области автоионизационных состояний или куперовских минимумов в сечениях. Для выбранной мишени расщепление конечных состояний иона $2p^5\ ^2P_{1/2,3/2}$, вызванное спин-орбитальным взаимодействием, невелико (0.1 эВ) и фотоэлектроны, соответствующие разным состояниям конечного иона, как правило, не разрешаются в экспериментах на ЛСЭ. Амплитуды ионизации основного состояния не имеют каких-либо структурных особенностей в исследуемой области энергий и меняются плавно. Напротив, парциальные сечения ионизации возбужденных состояний, расщепленных в результате спин-орбитального взаимодействия (в нашем случае $2p^5(^2P_{1/2,3/2})4s\ [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}], 2p^5(^2P_{1/2,3/2})3d\ [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$), могут различаться значительно [48]. Таким образом, за счет селективного возбуждения фотоном с энергией ω дискретных состояний может наблюдаться существенная поляризация спина электрона. Поляризация спина, приобретаемая в процессе прямой однофотонной ионизации, пренебрежимо мала; в процессе двухфотонной ионизации поляризация присутствует, но направление спина определяется только геометрией системы; наконец, интерференция между одно- и двухфотонными каналами ионизации

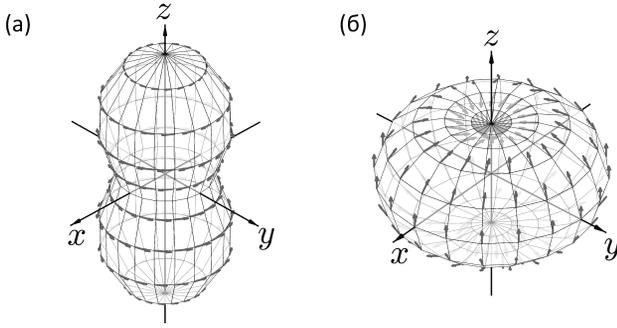


Рис. 5. Поведение вектора поляризации фотоэлектрона при однофотонной ионизации полем, поляризованным линейно параллельно оси z (а) и циркулярно в плоскости xy (б)

приводит к существенному изменению как величины поляризации, так и направления.

Из (31), пользуясь определениями (12)–(14), можно получить следующие выражения для компонент спиновой поляризации электрона, в которых явным образом выделена зависимость от углов $\{\vartheta, \varphi\}$:

$$P_z(\vartheta, \varphi) = W^{-1}(\vartheta, \varphi) \sum_{J_\gamma J'_\gamma k_l \gamma q_l} B_{k_l 1 k_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) \times \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma)(k_l q_l, 10 | k_\gamma q_l) Y_{k_l q_l}(\vartheta, \varphi), \quad (35)$$

$$P_x(\vartheta, \varphi) = -W^{-1}(\vartheta, \varphi) \sum_{J_\gamma J'_\gamma k_l \gamma q_l} B_{k_l 1 k_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) \times \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) \left((k_l q_l, 11 | k_\gamma q_\gamma) - (k_l q_l, 1 -1 | k_\gamma q_\gamma) \right) Y_{k_l q_l}(\vartheta, \varphi), \quad (36)$$

$$P_y(\vartheta, \varphi) = -iW^{-1}(\vartheta, \varphi) \sum_{J_\gamma J'_\gamma k_l \gamma q_l} B_{k_l 1 k_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) \times \rho_{k_\gamma q_\gamma}(J_\gamma, J'_\gamma) \left((k_l q_l, 11 | k_\gamma q_\gamma) + (k_l q_l, 1 -1 | k_\gamma q_\gamma) \right) Y_{k_l q_l}(\vartheta, \varphi). \quad (37)$$

Для изучения влияния интерференции полезно напомнить, как ведет себя вектор поляризации при однофотонной ионизации линейно и циркулярно поляризованными полями. При ионизации линейно поляризованным полем спин фотоэлектрона \mathbf{s}_e перпендикулярен вектору поляризации линейно поляризованной гармоники $\mathbf{e}_{2\omega}$ и импульсу фотоэлектрона \mathbf{k}_e : $\mathbf{s}_e \parallel [\mathbf{k}_e \times \mathbf{e}_{2\omega}]$ (рис. 5 а). При ионизации циркулярно поляризованным полем поляризация спина

содержит все три компоненты, но в рассматриваемой системе спин преимущественно ориентирован в плоскости $(\mathbf{e}_{2\omega}, \mathbf{k}_e)$ (рис. 5 б), что вызвано доминированием d -волны. Еще раз отметим, что сама величина спиновой поляризации для однофотонного процесса крайне мала ($|\mathbf{P}| < 10^{-3}$).

Среди множества геометрий, возможных для комбинации двух гармоник, интересно найти такие, для которых интерференция одно- и двухфотонных переходов приводит к появлению компонент спина, запрещенных в традиционной фотоионизации. Самыми многообещающими являются случаи, когда одна из гармоник линейно поляризована, так как ни однофотонная, ни двухфотонная ионизации не допускают эмиссии фотоэлектронов, поляризованных в направлении вектора поляризации поля (см. рис. 5 а). Ситуации, когда обе гармоники поляризованы линейно, параллельно и перпендикулярно, были рассмотрены ранее [33, 34]. Здесь мы сфокусируемся на ситуации, когда вторая из гармоник обладает круговой поляризацией.

1. Геометрия G1. Основная гармоника ω линейно поляризована параллельно оси x и вторая гармоника 2ω циркулярно поляризована в плоскости yz . Вектор напряженности для такой геометрии представлен на рис. 2 г.

В отсутствие интерференции измеримая (для атома неона) спиновая поляризация появляется только за счет двухфотонной ионизации через возбужденные состояния $2p^5(^2P_{1/2,3/2})ns[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$, ее вектор перпендикулярен направлению вылета электрона и лежит в плоскости yz (подобно рис. 5 а). Интегральная по углам поляризация спина равна нулю, однако при наблюдении фотоэлектронов, испущенных в определенном направлении $\{\theta, \varphi\}$, она может оказаться довольно высокой. Максимальная величина поляризации, вообще говоря, необязательно достигается в минимуме сечения. Подробнее двухфотонная ионизация линейно поляризованным полем рассмотрена в работе [34].

Отметим, что для геометрии G1 изменение относительной фазы гармоник эквивалентно повороту вокруг оси $x \parallel \mathbf{e}_\omega$ без изменения абсолютных величин наблюдаемых. Поэтому, без потери общности, мы выбираем плоскость наблюдения фотоэлектронов xz . Интерференционные эффекты “перестраивают” направление вектора спиновой поляризации (рис. 6 а), и теперь его ориентация вдоль осей z и y не равновероятна. Для выбранной фазы ориентация вдоль оси z явно обладает преимуществом. Угловое распределение фотоэлектронов и компоненты P_x симметричны относительно плоскости yz , ком-

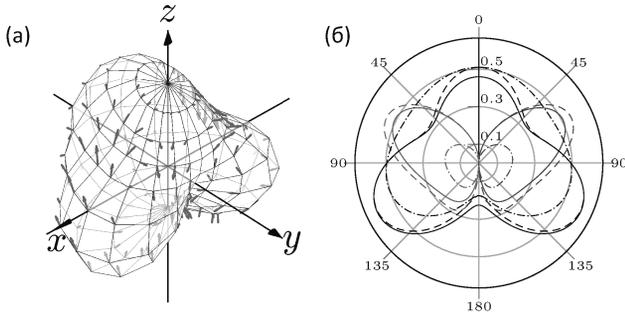


Рис. 6. (В цвете онлайн) Для геометрии G1: (а) PAD, направление и относительная величина спиновой поляризации \mathbf{P} фотоэлектронов, вылетающих в определенном направлении $\mathbf{k}_e = \{\theta, \varphi\}$; (б) PAD (черная линия) и компонента спиновой поляризации P_z (красный цвет для $P_z > 0$, синий — для $P_z < 0$) в сечении плоскостью xz для фазы между гармониками $\phi = 0, \pi/9, \pi/2$ (сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии соответственно)

компоненты P_y и P_z антисимметричны. При интегрировании по всем направлениям вылета электрона сохраняется только пренебрежимо малая часть компоненты P_x , происходящая от однофотонной ионизации, однако при интегрировании по полусферам $x > 0/x < 0$ сохраняются и компоненты P_y, P_z .

Для выбранной плоскости наблюдения фотоэлектронов xz существование компоненты P_z возможно только за счет интерференции. Эта компонента обращается в нуль в плоскости yz и достигает максимума в некотором направлении $\{\theta, \varphi\}$, определяемом динамическими особенностями системы и параметрами поля (в частности, разницей фаз ϕ). На рис. 6б построена форма углового распределения и величины спиновой поляризации P_z для трех разных фаз, одна из которых $\phi = 20^\circ$ выбрана так, чтобы обеспечивать максимум величины спиновой поляризации. Рисунок демонстрирует, что величина P_z , а значит и P_y , эффективно контролируется с помощью вариации фазы ϕ .

Наконец, проследим изменение компонент спиновой поляризации фотоэлектронов P_z в зависимости от энергии фотона ω . Поскольку поляризация фотоэлектронов при многофотонной ионизации неона возникает в основном за счет спин-орбитального расщепления промежуточных состояний, при энергиях фотона ω , далеких от энергий, соответствующих их резонансному возбуждению, она пренебрежимо мала. На рис. 7 изображен интегральный спектр фотоэмиссии $\int W(\omega; \vartheta, \varphi) d\Omega$ для геометрии G1 и компонента P_z при энергиях фотона ω , соответствующих возбуждению состо-

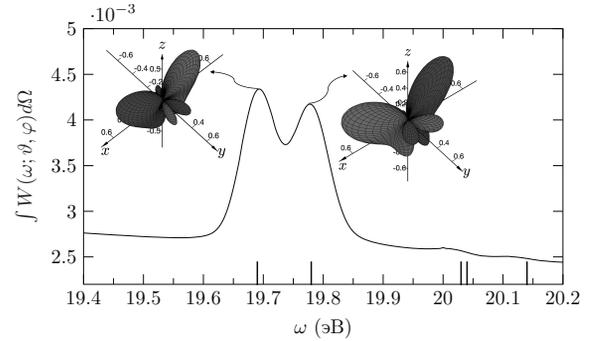


Рис. 7. (В цвете онлайн) Спектр фотоэмиссии для геометрии G1. На вставках изображена компонента P_z при энергиях фотона ω , соответствующих возбуждению $4s$ -резонансов (красный цвет для $P_z > 0$, синий — для $P_z < 0$). Вертикальными линиями отмечены положения возбужденных состояний (см. рис. 1)

яний $2p^5(^2P_{1/2,3/2})4s [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$. Преимущественное направление спина фотоэлектронов при возбуждении этих резонансов противоположно, что свидетельствует о высокой селективности возбуждения состояний с различными проекциями спина. Область $2p^5(^2P_{1/2,3/2})3d [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$ возбуждается слабо, и спиновая поляризация при энергиях фотона ω , приходящихся на эту область, небольшая в первую очередь из-за доминирующего вклада однофотонной ионизации.

2. Геометрия G2. Основная гармоника ω циркулярно поляризована в плоскости xy и вторая гармоника 2ω линейно поляризована параллельно оси z . Вектор напряженности поля для этой геометрии представлен на рис. 2 д.

Как и в геометрии G1, в отсутствие интерференции измеримая спиновая поляризация появляется только за счет двухфотонной ионизации. Вектор поляризации \mathbf{P} почти перпендикулярен плоскости xy , компонента, лежащая в этой плоскости

$$P_{xy} = \sqrt{P_x^2 + P_y^2} \ll P_z.$$

Степень поляризации фотоэлектронов достигает 0.8–1. Такую высокую выстроенность можно объяснить одновременной работой двух механизмов, отвечающих за появление поляризации фотоэлектронов: это и разница в сечениях образования фотоэлектронов с разной проекцией спина, и эффект передачи момента (динамическая поляризация и трансфер в терминологии [49, 50]).

Степень поляризации спина при двухфотонной ионизации полем круговой поляризации очень вы-

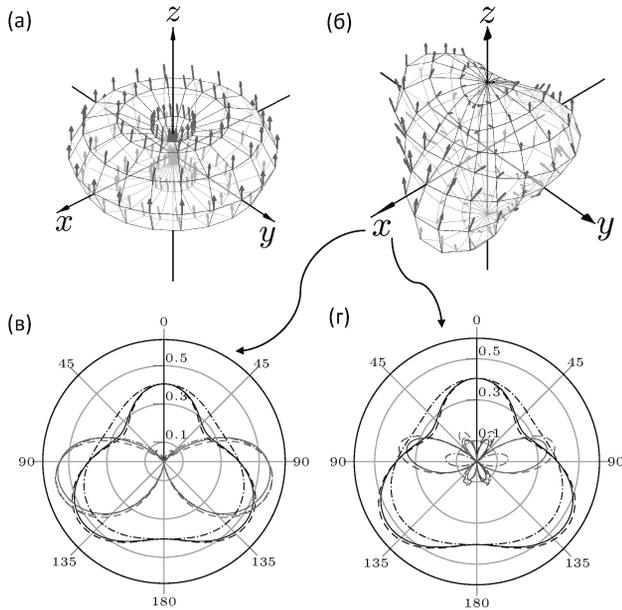


Рис. 8. (В цвете онлайн) PAD, направление и относительная величина спиновой поляризации \mathbf{P} фотоэлектронов, вылетающих в определенном направлении $\mathbf{k}_e = \{\theta, \varphi\}$: при двухфотонной ионизации циркулярно поляризованным полем (а); для геометрии G2 (б). Сечение плоскостью xz для компоненты P_z (в) и P_x (г) при фазе между гармониками 0 (сплошная линия), $\pi/9$ (штриховая линия), $\pi/2$ (штрихпунктирная линия). Красный цвет для $P_{z(x)} > 0$, синий — для $P_{z(x)} < 0$

сока и, естественно, интерференция с однофотонной ионизацией линейно поляризованной гармоникой может только переориентировать ее (рис. 8): существенно увеличивается компонента P_{xy} , а уменьшение величины полной степени поляризации $|\mathbf{P}|$ объясняется вкладом от неполяризованных фотоэлектронов, испущенных в результате однофотонной ионизации. Возможность когерентного контроля за счет фазы между гармониками ϕ сильно ограничена. При изменении фазы ϕ компонента P_{xy} не изменяет своей величины, а только направление, поворачиваясь на тот же угол, что и угловое распределение. Существуют две ортогональные плоскости, содержащие ось z и являющиеся плоскостями симметрии углового распределения и компоненты P_z , но их азимутальный угол зависит от динамических параметров системы.

На рис. 9 изображен спектр фотоэмиссии $\int W(\omega; \vartheta, \varphi) d\Omega$ для геометрии G2 и компонента P_z при энергиях фотона ω , соответствующих возбуждению состояний $2p^5(^2P_{1/2,3/2})4s\left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right]$. Как и для геометрии G1 (см. рис. 7), наблюдается

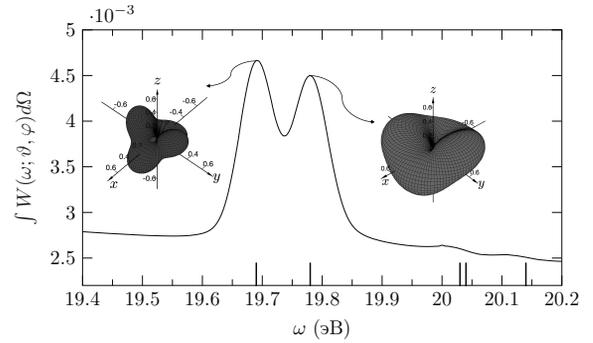


Рис. 9. (В цвете онлайн) Спектр фотоэмиссии для геометрии G2. На вставках изображена компонента P_z при энергиях фотона ω , соответствующих возбуждению $4s$ -резонансов (красный цвет для $P_z > 0$, синий — для $P_z < 0$). Вертикальными линиями отмечены положения возбужденных состояний (см. рис. 1)

инверсия преимущественного направления спина фотоэлектронов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен обобщенный подход для описания ионизации атомов бихроматическим полем кратных частот $\omega + 2\omega$, основанный на формализме статистических тензоров. Проанализированы эффекты, вызванные интерференцией одно- и двухфотонных амплитуд переходов, такие как нарушение симметрии углового распределения и изменение поляризации спина фотоэлектрона. Показана роль фазы между гармониками как управляющего параметра для когерентного контроля над этими наблюдаемыми. Предсказано появление новых компонент поляризации спина, вызванное интерференцией. Проведены демонстрационные расчеты для ионизации атома неона при условиях, близких к реализуемым на современных лазерах на свободных электронах.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-52-12023); Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005) с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Mauritsson, P. Johnsson, E. Gustafsson et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 013001 (2006).
2. P. K. Maroju, C. Grazioli, M. Di Fraia et al., *Nature* **578**, 386 (2020).
3. D. You, K. Ueda, E. V. Gryzlova et al., *Phys. Rev. X* **10**, 031070 (2020).
4. M. J. Stevens, A. L. Smirl, R. D. R. Bhat et al., *Phys. Rev. Lett.* **90**, 136603 (2003).
5. A. H. Zewail, *J. Phys. Chem. A* **104**, 5660 (2000).
6. P. Brumer and M. Shapiro, *Chem. Phys. Lett.* **126**, 541 (1986).
7. M. Shapiro, W. H. John, and P. Brumer, *Chem. Phys. Lett.* **149**, 451 (1988).
8. Е. А. Маныкин, А. М. Афанасьев, *ЖЭТФ* **48**, 931 (1965).
9. Е. А. Маныкин, А. М. Афанасьев, *ЖЭТФ* **52**, 1246 (1967).
10. K. Aron and P. M. Johnson, *J. Chem. Phys.* **67**, 5099 (1977).
11. C. Chen, Y.-Y. Yin, and D. S. Elliott, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 507 (1990).
12. Н. Б. Баранова, Б. Я. Зельдович, А. Н. Чудинов, А. А. Шульгинов, *ЖЭТФ* **98**, 1857 (1990).
13. Д. З. Андерсон, Н. Б. Баранова, К. Грин, Б. Я. Зельдович, *ЖЭТФ* **102**, 39 (1992).
14. M. V. Fedorov and N. P. Poluektov, *Opt. Express* **6**, 117 (2000).
15. P. V. Demekhin, A. N. Artemyev, A. Kastner, and T. Baumert, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 253201 (2018).
16. S. Kerbstadt, D. Pengel, D. Johannmeyer et al., *New J. Phys.* **19**, 103017 (2017).
17. I. Babushkin, Á. J. Galán, J. R. C. de Andrade et al., *Nature Phys.* **18**, 417 (2022).
18. V. A. Tulsy, M. Baghery, U. Saalman, and S. V. Popruzenko, *Phys. Rev. A* **98**, 053415 (2018).
19. N. L. Manakov, V. D. Ovsianikov, and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4791 (1999).
20. P. Kalaitzis, D. Spasopoulos, and S. Cohen, *Phys. Rev. A* **100**, 043409 (2019).
21. L. A. A. Nikolopoulos and P. Lambropoulos, *Phys. Rev. A* **74**, 063410 (2006).
22. E. Allaria, R. Appio, L. Badano et al., *Nature Photon.* **6**, 699 (2012).
23. K. C. Prince, E. Allaria, C. Callegari et al., *Nature Photon.* **10**, 176 (2016).
24. A. N. Grum-Grzhimailo, E. V. Gryzlova, E. I. Staroselskaya et al., *Phys. Rev. A* **91**, 063418 (2015).
25. V. V. Balashov, A. N. Grum-Grzhimailo, and N. M. Kabachnik, *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions: A Practical Theory Course*, Kluwer Acad./Plenum Publ., New York (2000).
26. C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jonsson, *Computational Atomic Structure: An MCHF Approach*, IOP Publ., Bristol (1997).
27. O. Zatsarinny, *Comput. Phys. Commun.* **174**, 273 (2006).
28. A. N. Grum-Grzhimailo, A. D. Kondorskiy, and K. Bartschat, *J. Phys. B* **39**, 4659 (2006).
29. N. Douguet, E. V. Gryzlova, E. I. Staroselskaya et al., *Eur. Phys. J. D* **71**, 1 (2017).
30. E. V. Gryzlova, A. N. Grum-Grzhimailo, E. I. Staroselskaya et al., *Phys. Rev. A* **97**, 013420 (2018).
31. E. V. Gryzlova, M. M. Popova, A. N. Grum-Grzhimailo et al., *Phys. Rev. A* **100**, 063417 (2019).
32. N. Douguet, A. N. Grum-Grzhimailo, E. V. Gryzlova et al., *Phys. Rev. A* **93**, 033402 (2016).
33. E. V. Gryzlova, M. M. Popova, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Phys. Rev. A* **102**, 053116 (2020).
34. M. M. Popova, E. V. Gryzlova, M. D. Kiselev, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Symmetry* **13**, 1015 (2021).
35. C. Callegari, A. N. Grum-Grzhimailo, K. L. Ishikawa et al., *Phys. Rep.* **904**, 1 (2021).
36. M. Di Fraia, O. Plekan, C. Callegari et al., *Phys. Rev. Lett.* **123**, 213904 (2019).
37. P. Ranitovic, C. W. Hogle, P. Rivière et al., *Proc. Nat. Acad. Sci.* **111**, 912 (2014).
38. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
39. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publ. (1961).
40. H. R. Reiss, *J. Phys. B* **47**, 204006 (2014).

41. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.8), <https://physics.nist.gov/asd> [2021, April 21], National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, USA (2020).
42. R. Moccia, N. K. Rahman, and A. Rizzo, *J. Phys. B* **16**, 2737 (1983).
43. Е. И. Старосельская, А. Н. Грум-Гржимайло, *Вестник Московского университета. Серия 3: физика, астроном.* **5**, 45 (2015).
44. G. Grynberg and E. Giacobino, *J. Phys. B* **12**, 93 (1979).
45. V. Vèniard and B. Piraux, *Phys. Rev. A* **41**, 4019 (1990).
46. N. A. Cherepkov, *J. Phys. B* **12**, 1279 (1979).
47. T. Nakajima and P. Lambropoulos, *Europhys. Lett.* **57**, 25 (2002).
48. R. Kau, I. D. Petrov, V. L. Sukhorukov, and H. Hotop, *J. Phys. B* **29**, 5673 (1996).
49. H. Klar, *J. Phys. B* **13**, 4741 (1980).
50. N. M. Kabachnik, *AIP Conf. Proc.* **295**, 73 (1993).

О ТЕОРЕМЕ ДЕКОМПОЗИЦИИ ДЛЯ ГЛЮОНОВ

И. В. Аникин^{a}, А. С. Жевлаков^{a,b**}*

^a *Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия*

^b *Институт динамики систем и теории управления им. В. М. Матросова
664033, Иркутск, Россия*

Поступила в редакцию 8 февраля 2022 г.,
после переработки 3 марта 2022 г.
Принята к публикации 3 марта 2022 г.

В последнее время широко обсуждается проблема разделения спинового и орбитального углового момента (УМ). До настоящего времени все дискуссии о возможности отделения спинового УМ от орбитального УМ калибровочно-инвариантным образом основывалась на использовании анзаца о том, что глюонное поле может быть аддитивно представлено в виде разложения на физические глюонные компоненты и компоненты, преобразующейся как чистая калибровка, т.е. $A_\mu = A_\mu^{phys} + A_\mu^{pure}$. В данной статье показано, что для неабелевой калибровочной теории такая декомпозиция глюонного поля имеет строгое математическое доказательство в рамках концепции контурной калибровки. Другими словами, анзац декомпозиции глюонного поля переформулируется как теорема о декомпозиции и доказывается с использованием контурной калибровки. Показано, что контурная калибровка обладает особым классом остаточной калибровки, которая связана с конфигурацией поля на границе и выражается в терминах чистых калибровочных полей. В результате такого разложения тривиальные граничные условия приводят к тому, что глюонное поле имеет только физические глюонные конфигурации, зафиксированные условием контурной калибровки.

DOI: 10.31857/S0044451022070094
EDN: EDZOYD

1. ВВЕДЕНИЕ

В теоретическом и экспериментальном сообщениях ведутся дискуссии о возможности выделить составляющие спина нуклона: внутренний партонный спиновый и орбитальный угловые моменты [1]. На данном этапе можно выделить две различные широко обсуждаемых декомпозиции: JM-декомпозиция (Jaffe-Manohar's) [2] и J-декомпозиция (Ji's) [3]. JM-декомпозиция приводит к полному разложению спина нуклона на спиновые и орбитальные части кварков и глюонов по отдельности. В то время как J-декомпозиция, напротив, не приводит к выделению отдельных вкладов от партонов, при этом данное разложение обладает калибровочной инвариантностью.

В работах [4, 5] был предложен калибровочно инвариантный аналог JM-декомпозиции. В рамках кулоновской калибровки утверждалось, что глюонное поле можно формально представить как

$$A_\mu(x) = A_\mu^{phys}(x) + A_\mu^{pure}(x). \quad (1)$$

Стоит отметить что данная декомпозиция глюонного поля всегда рассматривалась как первый шаг в большинстве существующих дискуссий о калибровочно-инвариантном разделении на спиновый и орбитальный угловые моменты в нуклоне (см., например, [6–17]).

В абелевой $U(1)$ калибровочной теории физические компоненты A_μ^{phys} в (1) соответствуют поперечной составляющей A_μ^\perp , которая является калибровочно инвариантной в отличие от продольной компоненты A_μ^L , связанной с A_μ^{pure} , которая преобразуется калибровочно и должна быть устранена калибровочным условием в рамках лагранжевого подхода. Отсюда следует, что в абелевой теории разложение, представленное в (1), является абсолютно есте-

* E-mail: anikin@theor.jinr.ru

** E-mail: zhevlaakov@theor.jinr.ru

ственным, и в законности данного разложения нет сомнений.

В случае неабелевой $SU(3)$ калибровочной теории и поперечная, и продольная компоненты калибровочно преобразуются. Следовательно, упомянутое разложение становится как минимум неочевидным, особенно в контексте определения физических компонент. В частности, использование калибровочных условий ковариантного типа неизбежно должно приводить к невозможности разделения спиновых и орбитальных угловых моментов калибровочно-инвариантным образом, поскольку зависимость глюонных конфигураций от координат нельзя определить независимо для каждой из компонент поля, см., например, [18].

Между тем, разложение глюонного поля на физические и нефизические составляющие является краеугольным камнем во многих подходах, посвященных калибровочно-инвариантному разделению спиновых и орбитальных угловых моментов.

В данной работе декомпозиция, представленная в формуле (1), рассматривается как утверждение, которое должно быть доказано, если это возможно в рамках неабелевой теории. Доказательство представления (1) для неабелевого поля может быть реализовано в рамках контурной калибровки, которая обобщает стандартные локальные аксиальные калибровки, и при этом является свободной от грибовских копий [19, 20]. В отличие от локальной калибровки, в контурной калибровке, которая является нелокальным типом калибровки, сначала фиксируется представитель на калибровочной орбите, а затем находится подходящее локальное калибровочное условие для данного представителя на орбите. Особенности контурной калибровки легко понять в рамках гамильтонова формализма, где условие контурной калибровки однозначно определяет поверхность многообразия, которая пересекает слой с групповой орбитой уникальным образом (см. детали в [21]). В качестве нового наблюдения показано наличие специальной остаточной калибровочной свободы, которой обладает контурная калибровка. Однако данная остаточная свобода локализована в нетривиальных граничных условиях, которые связаны с чистыми калибровочными конфигурациями, определенными на бесконечности.

Отметим, что физические величины не зависят от выбора калибровки. Аксиальный тип калибровок связан с определенным фиксированным направлением в пространстве. В таком случае независимость от калибровки следует рассматривать как независимость от выбранного направления, кото-

рое обеспечивается дополнительными требованиями [22]. Более того, в рамках гамильтонова формализма использование контурной калибровки подразумевает, что условие калибровки (в качестве дополнительного условия) может быть полностью разрешено относительно калибровочной функции за исключением калибровочных преобразований в конечной области пространства. Поэтому в данном смысле физические наблюдаемые, рассматриваемые в контурной калибровке, являются калибровочно-инвариантными по построению.

2. СВЯЗЬ ЛОКАЛЬНЫХ И НЕЛОКАЛЬНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

Прежде всего, напомним соответствие между видом калибровочных преобразований и вильсоновским путезависимым функционалом (см. детали в [23]). В дальнейшем, для краткости, используется термин «линия Вильсона» независимо от формы пути, если только данный термин не ведет к заблуждению.

Предположим, что в рамках неабелевой калибровочной теории фермионные и калибровочные поля преобразуются как

$$\psi^\theta(x) = e^{+i\theta(x)}\psi(x) \equiv U(x)\psi(x), \quad (2)$$

$$A_\mu^\theta(x) = U(x)A_\mu(x)U^{-1}(x) + \frac{i}{g}U(x)\partial_\mu U^{-1}(x), \quad (3)$$

где $\theta = \theta^a T^a$, а T^a — генераторы соответствующего представления. При фиксированных локальных преобразованиях, как в уравнениях (2) и (3), можно показать, что ковариантная производная и калибровочно-инвариантный оператор фермионной струны принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} i\mathcal{D}_\mu &= i\partial_\mu + gA_\mu(x), \\ \mathbb{O}^{g-inv.}(x, y) &= \bar{\psi}(y)[y; x]_A\psi(x). \end{aligned} \quad (4)$$

Вильсоновская линия определена как

$$\begin{aligned} [x; x_0]_A &= \mathbb{P} \exp \left\{ ig \int_{P(x_0, x)} d\omega_\mu A_\mu(\omega) \right\} = \\ &= \mathbf{g}(x|A) \equiv \mathbf{g}(P), \end{aligned} \quad (5)$$

где $P(x_0, x)$ обозначает путь, который соединяет начальную точку x_0 и конечную x в пространстве Минковского.

Вставив точку x_0 в линию Вильсона, оператор калибровочно-инвариантной струны, см. уравнение (4), преобразуется как

$$\mathbb{O}^{g,inv.}(x, y) = \bar{\psi}(y)[y; x_0]_A[x_0; x]_A\psi(x). \quad (6)$$

Из уравнения (6) следует, что зависящее от пути нелокальное калибровочное преобразование фермионов может быть представлено в виде

$$\psi^{\mathbf{g}}(x) = \mathbf{g}^{-1}(x|A)\psi(x), \quad (7)$$

где $\psi^{\mathbf{g}}(x)$ — калибровочно-инвариантное фермионное поле в представлении Мандельштама $\Psi(x|A)$ за исключением глобальных калибровочных преобразований, несущественных для данных рассмотрений [24, 25]. Такое преобразование приводит (из уравнения (3)) к

$$A_{\mu}^{\mathbf{g}}(x) = \mathbf{g}^{-1}(x|A)A_{\mu}(x)\mathbf{g}(x|A) + \frac{i}{g}\mathbf{g}^{-1}(x|A)\partial_{\mu}\mathbf{g}(x|A). \quad (8)$$

Следовательно, связь между локальным и нелокальным калибровочным преобразованием имеет вид

$$U(x) \Leftrightarrow \mathbf{g}^{-1}(x|A), \quad (9)$$

что чрезвычайно важно для дальнейшего рассмотрения, поскольку неправильное соответствие приводит к существенно неверным выводам (см., например, [26]).

3. КОНЦЕПЦИЯ КОНТУРНОЙ КАЛИБРОВКИ

В представленной работе проводится пересмотр разложения (1) в контексте выявления тех условий, для которых декомпозиция становится справедливой (если это вообще возможно осуществить). Рассмотрим разложение (1) как утверждение, которое должно быть доказано, по-крайней мере, в рамках калибровочного условия, наиболее подходящего для проверки (1). С этой целью используется концепция контурной калибровки.

С самого начала напомним, что в гамильтоновой формулировке калибровочной теории [27], расширенная мера функционального интеграла в терминах обобщенных импульсах E_i , и координатах A_i включает два вида функциональных дельта-функций. Первый вид дельта-функции отражает первичные (вторичные и т. д.) связи на E_i и A_i , в то время как второй вид дельта-функции относится к так

называемым дополнительным условиям (или калибровочным условиям), точные формы которых диктуются калибровочной свободой. Если первичные (вторичные и т. д.) связи необходимы для исключения нефизических компонент калибровочного поля, то калибровочные условия, в самом идеальном случае, должны зафиксировать соответствующий фактор Лагранжа, связанный с калибровочной орбитой. В рамках лагранжевой формулировки [28], поскольку бесконечный объем калибровочной орбиты факторизуется в функциональной мере по компонентами калибровочного поля, калибровочные условия обычно позволяют устранить нефизические глюонные компоненты.

В этой связи контурная калибровка подразумевает, что для полного фиксирования калибровочной функции (представителя орбиты) или устранения нефизических глюонов необходимо потребовать, чтобы вильсоновский путе­зависимый функционал между начальной x_0 и конечной x точками пути $P(x_0, x)$ был равен единице, т. е.

$$\mathbf{g}(x|A) = [x; x_0]_A = \mathbb{I}, \quad (10)$$

где путь $P(x_0, x)$ фиксирован, а точка x_0 определяет специфическую начальную точку, которая может зависеть от конечной точки x (см. также [29]).

Хорошо известная аксиальная калибровка, $A^+ = 0$, является фактически частным случаем наиболее общей нелокальной контурной калибровки, определенной условием (10), где фиксированный путь соответствует прямой линии, связывающей точки $\pm\infty$ и x .

В прошлом контурная калибровка была объектом интенсивного изучения (см., к примеру, [19, 20]). Очевидным преимуществом использования контурной калибровки является то, что квантовая калибровочная теория свободна от грибовских неоднозначностей. По своей конструкции контурная калибровка не обладает остаточной калибровочной свободой и с технической точки зрения является самым простым способом полного фиксирования калибровки в пределах конечного пространства. Вкратце, в рамках концепции контурной калибровки сначала фиксируется произвольная точка $(x_0, \mathbf{g}(x_0))$ на слое $\mathcal{P}(\mathcal{X}, \pi | G)$ [30]. После определяются два направления: одно направление определяется на базе \mathcal{X} (где направление есть не что иное, как касательный вектор к кривой, идущей через данную точку x_0), другое направление определяется на слое, где направление может быть однозначно определено как касательное подпространство, связанное с параллель-

ным переносом. Эти два направления формируют горизонтальный вектор (или направление)

$$H_\mu = \partial_\mu - igA_\mu^a(x) D^a, \quad (11)$$

который, по построению, инвариантен относительно структуры группы на слое [30]. В уравнении (11) D^a обозначает соответствующий генератор сдвига вдоль группы слоя и может быть представлен как $\mathbf{g}\partial/\partial\mathbf{g}$. Функционал $\mathbf{g}(x|A)$ из уравнения (5), определенный на главном расслоении $\mathcal{P}(\mathcal{X}, \pi | G)$, является решением уравнения параллельного переноса, задаваемого следующим образом:

$$\frac{dx_\mu(s)}{ds} H_\mu(A)\mathbf{g}(x(s)|A) = 0, \quad (12)$$

если $p(s) = (x(s), \mathbf{g}(x(s)))$ определяется кривой $x(s)$ в \mathcal{X} , параметризованной s . Применение условия (10) с целью выполнения (12) ведет либо к $A_\mu^a(x) = 0$ (тривиальный случай), либо к $D^a\mathbb{I} = 0$ (что является естественным требованием $D^a = \mathbf{g}\partial/\partial\mathbf{g}$).

Таким образом, можно уникальным образом определить точку на расслоении, $\mathcal{P}(\mathcal{X}, \pi | G)$, для которого имеется только единственный горизонтальный вектор, соответствующий данному касательному вектору в точке x в \mathcal{X} . Напомним, что касательный вектор в точке x однозначно определяется заданным путем, проходящим через x . Таким образом, в рамках гамильтонова формализма, основанного на геометрической интерпретации глюонов, условие (10) определяет поверхность на $\mathcal{P}(\mathcal{X}, \pi | G)$. Эта поверхность параллельна плоскости базы, где определен путь, и выделяет единичный элемент, $\mathbf{g} = 1$, в каждом слое из расслоения $\mathcal{P}(\mathcal{X}, \pi | G)$ [21].

Контурная калибровка относится к нелокальному классу калибровок и естественным образом обобщает известные локальные калибровки аксиального типа. Также стоит заметить, что две разные контурные калибровки могут соответствовать одной и той же локальной аксиальной калибровке, где остаточная калибровка осталась незафиксированной [31, 32]. Это утверждение отражает тот факт, что в отличие от локальной аксиальной калибровки контурная калибровка не обладает остаточной калибровочной свободой в конечной области пространства. Однако, как показано ниже, граничные глюонные конфигурации могут породить особый класс остаточных калибровок.

4. КОНТУРНАЯ КАЛИБРОВКА И ДЕКОМПОЗИЦИЯ ГЛЮОННОГО ПОЛЯ

Перейдем к обсуждению контурной калибровки, определенной условием (10). Используя путизависимые калибровочные преобразования для глюонного поля (см. уравнение (8)) и вычислив производную вильсоновской линии [33] в калибровке $[x; -\infty]_A = \mathbb{I}$, получим, что глюонное поле можно представить как декомпозицию в следующем виде:

$$A_\mu^{c.g.}(x) = \int_{-\infty}^x d\omega_\alpha G_{\alpha\mu}(\omega|A^{c.g.}) + A_\mu^{c.g.}(x - n\infty), \quad (13)$$

где $G_{\mu\nu}$ — тензор напряженности глюонного поля; начальная точка определена в $-\infty$ и путь параметризован как

$$\omega \Big|_x^{-\infty} = x - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-s\epsilon}}{\epsilon} \Big|_{s=0}^{s=\infty}. \quad (14)$$

Данная параметризация пути включает вектор n , определенный заданным фиксированным направлением. Например, вектор n можно выбрать в минус-направлении на световом конусе, $n = (0^+, n^-, \mathbf{0}_\perp)$, в рамках формализма квантования на световом конусе.

Важно отметить, что разложение (13) существенно отличается от разложения, представленного в [34], отсутствием ϵ -функции в ней. В самом деле, данная контурная калибровка выбирает либо одну θ -функцию, либо другую, подробности см. в [32].

Из уравнения (13) следует, что контурная калибровка позволяет естественным образом разделить глюонное поле на G -зависимую и G -независимую компоненты. Иначе говоря, вместо формулы (13) удобно представить разделение глюонного поля в виде (см. [17])

$$A_\mu^{c.g.}(x) = A_\mu(x|G) + A_\mu^{b.c.}(-\infty), \quad (15)$$

где $A_\mu(x|G)$ есть не что иное как первое слагаемое в (13) и $A_\mu^{b.c.}(-\infty) \equiv A_\mu^{c.g.}(x - n\infty)$ — конфигурация поля глюона на границе. Необходимо отметить, что G -зависимая конфигурация глюонного поля $A_\mu(x|G)$ возникает в результате нетривиальной деформации пути [33] и глюонное разделение, представленное уравнением (15), напоминает формулу [17], но слегка отличается по смыслу.

В рамках контурной калибровки (10) граничные глюонные конфигурации должны удовлетворять условию вида

$$\mathbb{P} \exp \left\{ igA_\mu^{b.c.}(-\infty) \int_{-\infty}^x d\omega_\mu \right\} = \mathbb{I}. \quad (16)$$

Таким образом, поскольку интеграл по $d\omega_\mu$ в уравнении (16) расходится как $1/\epsilon$ при ϵ стремящемся к нулю, комбинация $n_\mu A_\mu^{b,c}(-\infty)$ должна вести себя подобно ϵ^2 . Действительно, функция в экспоненте (см. (16)) имеет вид (размерность пространства $D = 4$)

$$A_\mu^{b,c}(-\infty) \int_{-\infty}^x d\omega_\mu \equiv A_\mu^{b,c}(x - \infty n) \int_{-\infty}^x d\omega_\mu = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^{-1} A_\mu^{b,c}(n) n_\mu \frac{1}{\epsilon} = 0. \quad (17)$$

Следовательно, граничные глюонные конфигурации подчиняются условию поперечности

$$n_\mu(\theta_i, \varphi) A_\mu^{b,c}(n(\theta_i, \varphi)) = 0. \quad (18)$$

Здесь, поскольку вектор n определяет фиксированное направление, удобнее использовать сферические координаты в евклидовом пространстве (или псевдосферическую систему в пространстве Минковского), где вектор n зависит только от угловых координат (θ_i, φ) , см. ниже. Если размерность пространства $D > 4$, то условие поперечности, следующее из уравнения (18), не является необходимым для выполнения условия контурной калибровки.

Теперь можно показать, что в контурной калибровке граничные глюонные конфигурации могут быть представлены в виде чистых калибровочных конфигураций. Прежде всего важно отметить, что начальная точка x_0 играет особую роль в рассматриваемом формализме, поскольку все пути начинаются в этой точке, и база \mathcal{X} касается главного расслоения \mathcal{P} только в этой точке.

Для начала рассмотрим точку x_0 , в которой, предположим, начинаются два разных пути, см. рис. 1. Такая стартовая точка имеет два касательных вектора, связанных с $P(x_0, x_1)$ и $P(x_0, x_2)$. В свою очередь, каждый касательный вектор имеет свой уникальный горизонтальный вектор $H_\mu^{(i)}$ определенный на слое. Тогда, воспользовавшись уравнением (10), получаем, что

$$\mathbb{P} \exp \left\{ ig \int_{L(x_0)} d\omega_\mu A_\mu(\omega) \right\} = \mathbb{I}, \quad (19)$$

$$\mathbb{P} \exp \left\{ ig \int_{\Omega} d\omega_\mu \wedge d\omega_\nu G_{\mu\nu}(\omega) \right\} = \mathbb{I}, \quad (20)$$

где под $L(x_0)$ подразумевается петля с началом $x_0 = -\infty$ и Ω является соответствующей поверхностью

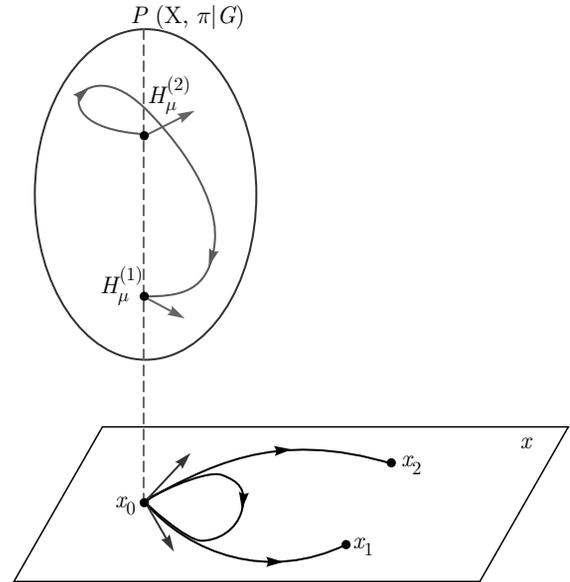


Рис. 1. Голономия: $H_\mu^{(i)}$ с $i = 1, 2$, обозначающими соответствующие горизонтальные векторы, определенные на слое \mathcal{P}

стью, связанной с петлей $L(x_0)$, см. рис. 1. Заметим, что точная форма Ω не важна для нашего исследования. Более того, фиксированная форма Ω может привести к дополнительной неоднозначности [35], которая, однако, не повлияет на выводы данной работы.

Простейшее решение уравнения (19) имеет вид

$$A_\mu(\omega) = \frac{i}{g} U(\omega) \partial_\mu U^{-1}(\omega), \quad (21)$$

который ведет к $G_{\mu\nu}(\omega) = 0$ и, следовательно, к уравнению (20) после использования теоремы Стокса (вопрос выбора поверхности Ω тут не затрагивается¹⁾). Отметим, что нетривиальное (ненулевое) решение уравнения (20) может существовать априори. Однако такое решение (ведущее к равенству нулю всего интеграла) в любом случае не может быть представлено в форме чистой калибровки. В теории групп путей утверждается, что любая петля как элемент подгруппы петель может быть гомотопически преобразована в «нулевой элемент», который в нашем случае является базовой точкой $x_0 = -\infty$.

В результате чистое калибровочное представление в уравнении (21) может быть связано только с граничными конфигурациями, т. е.

$$A_\mu^{b,c}(x_0) = \frac{i}{g} U(x_0) \partial_\mu U^{-1}(x_0), \quad (22)$$

¹⁾ Всесторонний анализ неабелевой теоремы Стокса можно найти в [35].

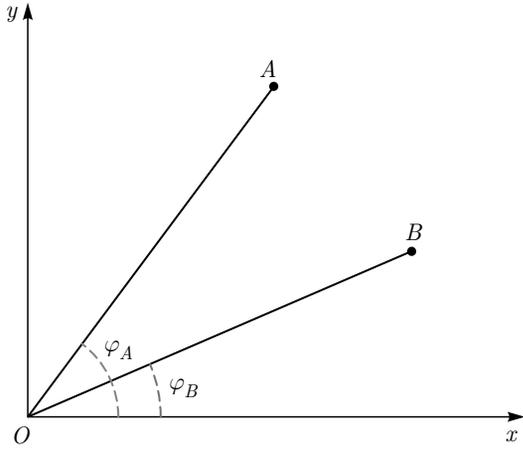


Рис. 2. Угол не зависит от начальной точки O : векторы $A = (R_A, \varphi_A)$ и $B = (R_B, \varphi_B)$; $\lim_{R_A \rightarrow 0} A = \lim_{R_B \rightarrow 0} B = O$, где $O = (0 \cdot \cos \varphi_i, 0 \cdot \sin \varphi_i)$ и $i = A, B$

потому что конфигурация $A_\mu(x|G)$ в уравнении (15) приводит к нулю интегрирование в (19) по определению.

Скомбинировав окончательно уравнения (15) и (22), приходим к доказательству, что в контурной калибровке глюонное поле действительно может быть представлено в виде разложения

$$A_\mu^{c.g.}(x) = A_\mu(x|G) + \frac{i}{g} U(x_0) \partial_\mu U^{-1}(x_0) \Big|_{x_0 = -\infty}, \quad (23)$$

где оба слагаемых перпендикулярны выбранному вектору направления n_μ .

Уравнение (23) показывает, что остаточная калибровка в контурной калибровке полностью локализована на границе. Для того чтобы понять природу остаточной калибровки, связанной с граничными глюонными конфигурациями в рамках контурной калибровки, рассмотрим простейший пример на \mathbb{R}^2 , где A и B имеют одну и ту же начальную точку O , см. рис. 2. Удобнее работать со сферической системой, т. е.

$$A(R_A, \varphi_A) \equiv (R_A \cos \varphi_A, R_A \sin \varphi_A)$$

и т. д. Если радиус-векторы A и B отличаются от нуля даже на бесконечно малое, значит эти два вектора различимы. Однако, если $R_A = R_B = 0$, то начальная точка O теряет информацию о векторах A и B , поскольку

$$O = (0 \cdot \cos \varphi_A, 0 \cdot \sin \varphi_A) = (0 \cdot \cos \varphi_B, 0 \cdot \sin \varphi_B).$$

Важно отметить, что в общем случае углы могут быть произвольными. В этом смысле начальная точка O является точкой, не зависящей от угла.

Поскольку $x_0 = \lim_{R \rightarrow 0} X(R, \theta_1, \theta_2, \varphi)$, получаем что

$$A_\mu^{b.c.}(\bar{\epsilon}n(\theta_i, \varphi)) = \frac{i}{g} U(\bar{\epsilon}n(\theta_i, \varphi)) \partial_\mu U^{-1}(\bar{\epsilon}n(\theta_i, \varphi)), \quad (24)$$

где $\bar{\epsilon} \rightarrow -\infty$, θ_i и φ не фиксированы, что обеспечивает остаточную калибровочную свободу аналогично той, что продемонстрирована на рис. 2.

Наиболее удобный способ фиксации остаточной калибровочной свободы — это предположить, что (см. [31, 32])

$$A_\mu^{b.c.}(\bar{\epsilon}n(\theta_i, \varphi)) \equiv A_\mu^{pure}(\bar{\epsilon}n(\theta_i, \varphi)) = 0. \quad (25)$$

В этом случае декомпозиция глюонного поля, представленная в уравнении (1), будет тривиальной.

Таким образом, использование контурной калибровки дает наиболее естественное разложение глюонных полей на G -зависимую глюонную компоненту, которую можно назвать физической, и нефизическую глюонную компоненту, относящуюся к чистой калибровочной конфигурации. Более того, контурная калибровка не обладает остаточной калибровочной свободой в конечной области пространства, а оставшаяся возможная калибровочная свобода полностью изолирована на бесконечной границе данного пространства.

5. СООТВЕТСТВИЕ МЕЖДУ ЛОКАЛЬНОЙ И НЕЛОКАЛЬНОЙ КАЛИБРОВКАМИ

Поскольку контурная калибровка как нелокальный вид калибровки обобщает стандартную локальную калибровку аксиального типа, кратко обсудим соответствие между локальными и нелокальными калибровочными преобразованиями. Как уже упоминалось, локальная калибровка аксиального типа не является свободной от остаточных калибровочных преобразований, в то время как нелокальная контурная калибровка фиксирует всю калибровочную свободу в конечном пространстве при условии, что начальная точка $x_0 = -\infty$. Действительно, если рассмотреть локальную аксиальную калибровку, $A^+, \theta(x) = 0$, как уравнение для калибровочной функции $\theta(x)$ (см. уравнение (3)), то получим решение этого уравнения в виде

$$\mathcal{U}_0(x^-, \tilde{x}) = C(\tilde{x}) \bar{\mathcal{U}}(x^-, \tilde{x}), \quad \bar{\mathcal{U}}(x^-, \tilde{x}) = \mathbb{P} \exp \left\{ -ig \int_{x_0^-}^{x^-} d\omega^- A^+(\omega^-, \tilde{x}) \right\}, \quad (26)$$

где $\tilde{x} = (x^+, 0^-, \mathbf{x}_\perp)$, x_0^- — фиксирована и $C(\tilde{x})$ — произвольная функция, которая не зависит от x^- и определяется как

$$\mathcal{U}_0(x^- = x_0^-, \tilde{x}) = C(\tilde{x}). \quad (27)$$

Произвольность $C(\tilde{x})$ -функции также отражает тот факт, что здесь имеем дело с произвольной фиксированной начальной точкой x_0 . Для определения остаточной калибровочной свободы требуется, чтобы выполнялось $A^{+, \theta}(x) = 0$ и $A^+(x) = 0$. Иными словами, имеем, что

$$\mathcal{U}_0(x^-, \tilde{x}) \Big|_{\overline{U=1}} \equiv \mathcal{U}^{res}(\tilde{x}) = C(\tilde{x}) \equiv e^{i\tilde{\theta}(\tilde{x})}. \quad (28)$$

Видно, что функция $C(\tilde{x})$ определяет остаточные калибровочные преобразования.

Нелокальная контурная калибровка обобщает локальную калибровку аксиального типа и требует, чтобы полный интеграл в экспоненте уравнения (10) равнялся нулю²⁾. С помощью контурной калибровки в рамках гамильтонова формализма остаточная калибровочная функция $\tilde{\theta}(\tilde{x})$ может быть связана с конфигурациями A^- и A_\perp^i , которые также исчезают, уничтожая всю калибровочную свободу (подробности см. в [23, 36]). Таким образом, восстанавливая полный путь в вильсоновской линии, для данного процесса получаем, что

$$C(\tilde{x}) = \tilde{C}(x_0^+, x_0^-, \mathbf{x}_0^\perp) \times \\ \times \mathbb{P} \exp \left\{ ig \int_{\mathbf{x}_0^\perp}^{\mathbf{x}^\perp} d\omega_\perp^i A_\perp^i(x_0^+, x_0^-, \omega_\perp) \right\} \times \\ \times \mathbb{P} \exp \left\{ -ig \int_{x_0^+}^{x^+} d\omega^+ A^-(\omega^+, x_0^-, \mathbf{x}_\perp) \right\} \quad (29)$$

и тогда, используя соответствующую контурную калибровку, приходим в конце к тому, что

$$C(\tilde{x}) \Big|_{c.g.} = \tilde{C}(x_0^+, x_0^-, \mathbf{x}_0^\perp). \quad (30)$$

Уравнение (30) означает, что калибровочная свобода вообще отсутствует. Точное значение фиксированной начальной точки x_0 зависит от рассматриваемого нами физического процесса [36, 37].

²⁾ В локальной калибровке соответствующий экспоненциальный фактор исчезает благодаря тому, что зануляется подынтегральная функция $A^+ = 0$.

6. НЕНУЛЕВЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ГЛЮОННЫЕ КОНФИГУРАЦИИ

Данная часть работы посвящена изучению влияния ненулевых граничных конфигураций глюонного поля на определения различных распределений партонов. Прежде всего, важно подчеркнуть, что разложение в уравнениях (13) и (15) по смыслу относится к декомпозиции предложенной в работе [17]. Действительно, уравнение (15) можно переписать как (здесь рассматривается предел $\bar{\epsilon} \rightarrow -\infty$)

$$\tilde{A}_\mu^{l.c.}(k^+; \tilde{x}) = G_\mu(k^+; \tilde{x}) + \delta(k^+) A_\mu^{b.c.}(\bar{\epsilon} n^-(\pi/4, 0, 0); \tilde{x}), \quad (31)$$

где глюонное поле на световом конусе $\tilde{A}_\mu^{l.c.}$ — это фурье-образ $A_\mu^{l.c.}$ только по отношению к x^- , т. е.

$$A_\mu^{l.c.}(x^-; \tilde{x}) \stackrel{\mathcal{F}}{=} \tilde{A}_\mu^{l.c.}(k^+; \tilde{x}), \quad (32)$$

и, следовательно,

$$G^\mu(k^+; \tilde{x}) \stackrel{\mathcal{F}}{=} \int_{-\infty^-}^{x^-} d\omega^- G^{+\mu}(\omega^-, \tilde{x} | A^{c.g.}), \quad (33)$$

$$\delta(k^+) A_\mu^{b.c.}(\bar{\epsilon} n^-; \tilde{x}) \stackrel{\mathcal{F}}{=} A_\mu^{b.c.}(\bar{\epsilon} n^-; \tilde{x}).$$

Важно подчеркнуть, что уравнение (31), как и уравнение (15), было получено прямым образом с учетом контурной калибровки, см. уравнение (10). Как уже отмечалось ранее, важным результатом данной работы является то, что несмотря на факт полного фиксирования калибровочной свободы в конечной области пространства с помощью контурной калибровки, тем не менее, остаточная калибровочная свобода связана с граничными конфигурациями глюонного поля. Нетривиальные топологические эффекты, связанные с граничными конфигурациями глюонных полей, — предмет отдельного рассмотрения.

В работе [17] представление, которое формально похоже на нашу формулу (31), по существу было угадано для случая локальной аксиальной калибровки $A^+ = 0$, где соответствующая остаточная калибровочная свобода включена в неоднородный член с $\delta(k^+)$. В свою очередь, калибровка $A^+ = 0$ с фиксированной остаточной калибровочной свободой в конечной области пространства фактически идентична контурной калибровке [32].

В рамках формализма группы путей можно воспользоваться следующим путезависимым преобразованием, которое порождает обычное преобразование сдвига,

$$[\mathbb{U}^{P(x, x+y)} \psi](x) = [x + y; x]_A^{-1} \psi(x + y), \quad (34)$$

где $\psi(x)$ принадлежит спинорному фундаментальному представлению и определена на пространстве Минковского $M = P/L$ (P обозначает соответствующую группу путей, L — подгруппа петель на P) как инвариантная функция классов сопряженности [30], т. е.

$$\psi(x) = \mathbf{g}(p)\Psi(p), \quad p = (x, \mathbf{g}) \in \mathcal{P}.$$

Кроме того, в уравнении (34) оператор \mathbb{U} , действующий на спинорном многообразии, имеет вид

$$\mathbb{U}^{P(x,x+y)} = \mathbb{P} \exp \left\{ -ig \int_x^{x+y} d\omega_\mu \mathcal{D}_\mu \right\}. \quad (35)$$

В контурной калибровке, где вильсоновская линия зафиксирована из уравнения (34) и равна единице, оператор группы трансляций $\mathbb{U}_q(y)$ принимает тривиальную форму

$$\mathbb{U}^{P(x,x+y)} \Big|_{c.g.} = \mathbb{P} \exp \left\{ -ig \int_x^{x+y} d\omega_\mu \partial_\mu \right\}. \quad (36)$$

Такой оператор не содержит никакой информации о граничных конфигурациях даже если $y \rightarrow \pm\infty$, поскольку конфигурации граничных полей все равно подчиняются уравнению (10). Более того, в данном случае вильсоновская линия в уравнении (34) равна единице из-за равенства нулю интегранта, т. е. $A^+ = A^- = 0$, и равенства нулю целого интеграла по A_\perp .

Следовательно, если введем кварк-глюонные операторы, ответственные за спиновые и орбитальные угловые моменты, как операторы, которые инвариантны относительно остаточных калибровочных преобразований, то необходимо использовать ковариантную производную в виде

$$i \mathcal{D}_\mu^{b.c.} = i \partial_\mu + g A_\mu^{b.c.}(-\infty).$$

В этом смысле полученные здесь результаты и результаты [17] не сильно расходятся. Например, следуя [17], можно получить структурную функцию, отвечающую оператору углового момента кварка:

$$f_{L_q}(x) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{+\infty} dz^- e^{ix P^+ z^-} \int_{-\infty}^{+\infty} d^2 \mathbf{y}_\perp \times \\ \times \langle P | \bar{\psi}(y_\perp) \gamma^+ y_\perp^i i \mathcal{D}_{b.c.}^j \psi(y_\perp + z^-) | P \rangle, \quad (37)$$

где введено обозначение $[ij]$ для антисимметричной комбинации индексов $i, j = 1, 2$ и \mathcal{N} — это нормировочный фактор, ранее введенный в статье [17].

Как уже говорилось ранее, $f_{L_q}(x)$ это физическая величина и не зависит от выбора калибровки. В то же время калибровки аксиального типа (локальные или нелокальные) связаны с фиксированным направлением, необходимым для процедуры факторизации [22]. Поэтому калибровочную инвариантность физической величины можно трактовать в том числе как независимость от выбора направления. В рамках гамильтоновского формализма предполагается, что калибровочное условие (или дополнительное условие) может быть полностью разрешено относительно калибровочной функции, за исключением калибровочных преобразований в конечной области. В этом смысле, физические кварк-глюонные операторы, рассматриваемые в контурной калибровке, являются «калибровочно-инвариантными» по своей конструкции, поскольку в данном случае нет связи ни с какими калибровочными преобразованиями в конечной области из-за фиксации калибровочной функции θ_{fix} (как обсуждалось выше, это следует из выбора $\mathbf{g} = 1$ в слое для всей базы \mathcal{X}), подробности см. в [21].

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было показано важное соответствие между локальными и нелокальными калибровками, что чрезвычайно важно для избежания существенно неверных выводов, которые тем не менее можно найти в литературе.

В данной работе было предложено доказательство следующего утверждения для неабелевой теории: в контурной калибровке глюонное поле может быть представлено в виде разложения на глюонную конфигурацию $A_\mu(x|G)$, являющуюся физической степенью свободы, и на глюонную конфигурацию чистой калибровки $A_\mu^{pure}(x_0)$, которая полностью изолирована на границе и представляет собой особый тип остаточной калибровочной свободы. Показано, что контурная калибровка не может окончательно устранить новый вид остаточной калибровочной свободы, найденной и подробно проиллюстрированной в данной работе.

В случае тривиальных граничных условий, т. е. $A_\mu^{b.c.} = 0$, в рамках применения контурной калибровки декомпозиция (1) не имеет смысла в неабелевой теории, поскольку только граничные глюонные конфигурации могут быть представлены в виде чистых калибровочных глюонных конфигураций. Более того, если граничные конфигурации положить равными нулю, то калибровочная свобода отсутствует,

и, следовательно, операторы калибровочно-инвариантны по построению, за исключением глобальных калибровочных преобразований, которые не существуют для билинейных форм.

В качестве последнего замечания важно отметить, что декомпозиция глюонного поля, предложенная в работе [4] и формально схожая с (1), имеет статус анзаца, а не строгого вывода, как было сформулировано и доказано в данной работе. Также, отличительной особенностью является то, что глюонные поля разделяются на физические и чистые калибровочные глюонные конфигурации еще до того, как калибровочное условие зафиксировано. Следовательно, чтобы сформулировать анзац нужно было наложить дополнительное требование для извлечения слагаемого $A_\mu^{pure}(x)$, которое, в конечном итоге, определяется условием $G_{\mu\nu}^{pure}(x) = 0$. В свою очередь, такое требование естественно работает в рамках концепции контурной калибровки, см. уравнение (23). Равенство (37) формально не противоречит [4, 17], но в некотором смысле не имеет согласия с [3, 14], где был представлен «динамический» тип разложений углового момента.

Благодарности. Авторы благодарны С. Лорсэ, Д. Г. Паку, М. В. Полякову и Л. Шимановскому за обсуждения. И. В. Аникин выражает благодарность О. В. Теряеву за плодотворные комментарии на ранней стадии работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. X. Ji, F. Yuan, and Y. Zhao, *Nature Rev. Phys.* **3**, 27 (2021).
2. R. L. Jaffe and A. Manohar, *Nucl. Phys. B* **337**, 509 (1990).
3. X. D. Ji, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 610 (1997).
4. X. S. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 232002 (2008).
5. X. S. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 062001 (2009).
6. X. Ji, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 259101 (2011).
7. M. Wakamatsu, *Int. J. Mod. Phys. A* **29**, 1430012 (2014).
8. M. Wakamatsu, *Eur. Phys. J. A* **51**, 52 (2015).
9. M. Wakamatsu et al., *Annals Phys.* **392**, 287 (2018).
10. C. Lorce, *Phys. Lett. B* **719**, 185 (2013).
11. C. Lorcé, *Phys. Rev. D* **88**, 044037 (2013).
12. E. Leader and C. Lorcé, *Phys. Rep.* **541**, 163 (2014).
13. M. Wakamatsu, *Phys. Rev. D* **84**, 037501 (2011).
14. M. Wakamatsu, *Phys. Rev. D* **83**, 014012 (2011).
15. M. Wakamatsu, *Phys. Rev. D* **81**, 114010 (2010).
16. P. M. Zhang and D. G. Pak, *Eur. Phys. J. A* **48**, 91 (2012).
17. S. Bashinsky and R. L. Jaffe, *Nucl. Phys. B* **536**, 303 (1998).
18. A. V. Belitsky and A. V. Radyushkin, *Phys. Rep.* **418**, 1 (2005).
19. S. V. Ivanov et al., *Yad. Fiz.* **44**, 230 (1986).
20. S. V. Ivanov and G. P. Korchemsky, *Phys. Lett. B* **154**, 197 (1985).
21. I. V. Anikin, arXiv:2105.09430 [hep-ph].
22. I. V. Anikin et al., *Nucl. Phys. B* **828**, 1 (2010).
23. I. V. Anikin et al., *Phys. Rev. D* **95**, 034032 (2017).
24. S. Mandelstam, *Annals Phys.* **19**, 1 (1962).
25. B. S. DeWitt, *Phys. Rev.* **125**, 2189 (1962).
26. C. Lorce, *Phys. Rev. D* **87**, 034031 (2013).
27. L. D. Faddeev and A. A. Slavnov, *Front. Phys.* **50**, 1 (1980).
28. L. D. Faddeev and V. N. Popov, *Usp. Fiz. Nauk* **111**, 427 (1973).
29. H. Weigert and U. W. Heinz, *Z. Phys. C* **56**, 145 (1992).
30. M. B. Mensky, *Theor. Math. Phys.* **173**, 1668 (2012).
31. I. V. Anikin and O. V. Teryaev, *Phys. Lett. B* **690**, 519 (2010).
32. I. V. Anikin and O. V. Teryaev, *Eur. Phys. J. C* **75**, 184 (2015).
33. L. Durand and E. Mendel, *Phys. Lett. B* **85**, 241 (1979).
34. Y. Hatta, *Phys. Rev. D* **84**, 041701 (2011).
35. Y. A. Simonov, *Sov. J. Nucl. Phys.* **50**, 134 (1989).
36. A. V. Belitsky et al., *Nucl. Phys. B* **656**, 165 (2003).
37. M. Burkardt, *Phys. Rev. D* **88**, 014014 (2013).

ГЕОДЕЗИЧЕСКИЕ В ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ КРОТОВОЙ НОРЫ

М. В. Сажин, О. С. Сажина, А. А. Шацкий*

*Государственный астрономический институт им. П. К. Штернберга,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119234, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 февраля 2022 г.,
после переработки 10 февраля 2022 г.
Принята к публикации 16 февраля 2022 г.

Теоретически исследуются структура пространства-времени вблизи кротовой норы (КН) и возможные наблюдательные следствия. В связи с растущей точностью наблюдений и перспективностью нового гравитационно-волнового канала задача различения астрофизических проявлений черных дыр и гипотетических КН приобретает актуальность. КН, наряду с черными дырами, естественно возникают в рамках ОТО. Для наблюдательных поисков КН необходимо знание характерных траекторий тел в ее окрестности, в том числе траекторий, заходящих в ее горловину. Выведены уравнения движения пробной частицы в метрике КН, а также рассмотрены наиболее интересные свойства этих движений. Выведено общее уравнение геодезических в метрике КН и рассмотрены некоторые свойства этих геодезических. Проанализированы точное решение для круговых орбит пробных частиц вокруг КН, а также приближенное аналитическое решение уравнений геодезических. Рассмотрено смещение перицентра орбиты пробной частицы в поле КН и обсуждаются возможные наблюдательные следствия. Представлены примеры траекторий пробных частиц у КН, полученные путем численного моделирования.

DOI: 10.31857/S0044451022070100
EDN: EEGIMJ

1. ВВЕДЕНИЕ

В общей теории относительности (ОТО) появляется несколько решений, которые описывают релятивистские объекты, скорость пробных частиц вблизи которых сравнима со скоростью света. Это прежде всего «черные дыры» (далее ЧД) — решения уравнений ОТО, найденные Шварцшильдом и Керром. ЧД открыты как в электромагнитном канале наблюдений [1], так и в гравитационно-волновом канале [2]. Открытие ЧД внушает уверенность, что и другие решения ОТО (на сегодняшний день только теоретические) могут существовать в космосе. Одним из таких гипотетических решений являются кротовые норы (далее КН). Сейчас существует несколько решений типа КН [3, 4], см. обзор [5]. В литературе рассматривают как решения ОТО, так и наблюдательные проявления КН [6–8].

Для описания наблюдательных проявлений вблизи КН необходимо знать закон движения пробных частиц, другими словами, форму геодезических вблизи КН. В предлагаемой работе будут выведены уравнения движения пробной частицы в метрике КН, а также рассмотрены наиболее интересные свойства этих движений.

В разд. 2 мы рассматриваем метрику КН и некоторые общие свойства этой метрики. В разд. 3 мы выводим общее уравнение геодезических в метрике КН и рассматриваем некоторые свойства этих геодезических. В разд. 4 анализируем точное решение для круговых орбит пробных частиц вокруг КН. В разд. 5 мы рассматриваем приближенное аналитическое решение уравнений геодезических и некоторые его свойства. Наконец, в разд. 6 мы рассматриваем смещение перицентра орбиты пробной частицы в поле КН и обсуждаем возможные наблюдательные следствия. В Приложении представлены примеры траекторий движения пробных частиц у КН, полученные путем численного моделирования.

* E-mail: cosmologia@yandex.ru

2. МЕТРИКА КРОТОВОЙ НОРЫ И ЕЕ СВОЙСТВА

Метрику КН примем в простейшем виде:

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) c^2 dt^2 - \frac{dr^2}{1 - r_0/r} - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (1)$$

Здесь ct, r, θ, φ — соответственно координаты x^0, x^1, x^2, x^3 . Величина r_g — гравитационный радиус КН, а r_0 — радиус ее горловины. В отличие от шварцшильдовской метрики, метрика (1) является двухпараметрической и определяется параметрами r_g и r_0 .

Можно преобразовать радиальную координату следующим образом:

$$dl = \pm \frac{dr}{\sqrt{1 - r_0/r}}.$$

Тогда метрика КН (1) запишется в виде

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r(l)}\right) c^2 dt^2 - dl^2 - r(l)^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (2)$$

Для того чтобы у КН не было горизонтов ЧД, необходимо на функцию $g_{00}(l)$ наложить условие, согласно которому она во всей области определения ($-\infty < l < \infty$) должна быть больше нуля. При выполнении условия $r_0 > r_g$ величина $g_{00}(l)$ будет больше нуля во всей области определения. При этом функция $r^2(l)$ (квадрат радиуса) должна достигать своего минимума на горловине КН, которая определяется точками $l = 0$ и $r = r_0$. Преобразование от радиальной координаты r , которая является неоднозначной (одно и то же значение r может принадлежать разным полам полного пространства), к радиальной координате l , которая уже однозначно определяет положение каждой точки в полном пространстве, для верхней половины пространства КН есть

$$l = + \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{r_0}{r}}} = \sqrt{r(r - r_0)} + \frac{r_0}{4} \ln \left\{ \sqrt{\frac{r}{r_0}} + \sqrt{\frac{r}{r_0} - 1} \right\},$$

а для нижней половины пространства КН —

$$l = - \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{r_0}{r}}} = -\sqrt{r(r - r_0)} - \frac{r_0}{4} \ln \left\{ \sqrt{\frac{r}{r_0}} + \sqrt{\frac{r}{r_0} - 1} \right\}.$$

Метрика (2), а также первые и вторые производные радиальной координаты по l регулярны во всей области определения ($-\infty < l < +\infty$):

$$\frac{dr}{dl} = \pm \sqrt{1 - \frac{r_0}{r}}, \quad \frac{d^2 r}{dl^2} = \frac{r_0}{2r^2}. \quad (3)$$

Метрике (2) соответствует тензор энергии-импульса T_k^i , нарушающий нулевое энергетическое условие (NEC) для радиальных фотонов.

Ненулевые компоненты этого тензора имеют вид

$$T_r^r = \frac{r_0 - r_g}{8\pi r^2 (r - r_g)} > 0, \\ T_\theta^\theta = T_\varphi^\varphi = \frac{(r_g - r_0)(2r - r_g)}{32\pi r^2 (r - r_g)^2} < 0.$$

Ниже мы обсудим вид траекторий пробных частиц как в r -координатной системе, так и в l -координатной системе.

3. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ПРОБНОЙ ЧАСТИЦЫ ВОКРУГ КРОТОВОЙ НОРЫ

3.1. Анализ геодезических в пространстве-времени кротовой норы

Проанализируем уравнение геодезических в пространстве-времени КН. Метрику возьмем в виде (1) (радиальная координата есть r). Геодезические также будут уравнениями движения пробных частиц. Будем также считать, что полученные нами уравнения движения относятся к движению пробной частицы по верхней половине пространства.

Обыкновенная производная от траектории частицы по собственному времени s выражается через компоненты

$$u^i \equiv \frac{dx^i}{ds}.$$

Эту величину в ОТО называют также контравариантной 4-скоростью. Уравнение геодезической определяется для касательного вектора вдоль траектории частицы u^i

$$\frac{du^i}{ds} + \Gamma_{jk}^i u^j u^k = 0.$$

Для ковариантных компонент касательного вектора u_i соответствующее уравнение имеет вид

$$\frac{du_i}{ds} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^i} u^j u^k.$$

Поскольку метрика (1) является статической и сферически-симметричной, можно сразу написать два интеграла движения [9]:

$$u_0 \equiv \epsilon = \text{const}, \quad (4)$$

$$u_3 \equiv h = \text{const}. \quad (5)$$

Первый интеграл есть сохранение полной энергии системы, а второй — сохранение момента количества движения. Кроме того, можно показать, что пробная частица движется в плоскости, а это означает, что $\theta(s) = \text{const}$. Можно выбрать $\theta(s) = \pi/2$. Тогда интегралы можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \frac{dt}{ds} &= \epsilon, \\ r^2 \frac{d\varphi}{ds} &= h. \end{aligned} \quad (6)$$

Итак, у нас есть уравнения для трех координат. Выведем уравнение для эволюции радиальной координаты r . Это уравнение будем выводить так же, как это делается при анализе движения в метрике ЧД. Для нахождения уравнений движения по радиусу используем уравнение метрики:

$$1 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \frac{dt^2}{ds^2} - \frac{1}{1 - \frac{r_0}{r}} \frac{dr^2}{ds^2} - r^2 \left(\frac{d\theta^2}{ds^2} + \sin^2 \theta \frac{d\varphi^2}{ds^2} \right).$$

Будем рассматривать случай массивной пробной частицы (двигающейся со скоростью, меньшей скорости света).

Подставим в уравнение метрик величину $\theta = \pi/2$ и получим уравнение

$$1 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \frac{dt^2}{ds^2} - \frac{1}{1 - r_0/r} \frac{dr^2}{ds^2} - r^2 \frac{d\varphi^2}{ds^2}.$$

Это уравнение можно преобразовать как

$$\left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \frac{dt^2}{ds^2} - \frac{d\varphi^2}{ds^2} \left(\frac{1}{1 - r_0/r} \frac{dr^2}{d\varphi^2} + r^2 \right) = 1.$$

Подставим интегралы движения и получим уравнения

$$\frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r} - \frac{h^2}{r^4} \left(\frac{1}{1 - r_0/r} \frac{dr^2}{d\varphi^2} + r^2 \right) = 1, \quad (7)$$

$$(u^r)^2 = \left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \left(\frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r} - 1 - \frac{h^2}{r^2} \right). \quad (8)$$

Далее сделаем подстановку

$$u = \frac{1}{r},$$

которая окончательно приведет к уравнению

$$\left(\frac{du}{d\varphi}\right)^2 + (1 - r_0 u) u^2 = \frac{\epsilon^2 - 1 + r_g u}{h^2} \frac{1 - r_0 u}{1 - r_g u}. \quad (9)$$

При анализе уравнений движения в метрике ЧД существует аналогичное уравнение, которое выглядит как

$$\left(\frac{du}{d\varphi}\right)^2 + (1 - r_g u) u^2 = \frac{\epsilon^2 - 1}{h^2} + \frac{r_g}{h^2} u.$$

Можно также сравнить (13) с нерелятивистским уравнением движения. Оно получается, если пренебречь величинами $r_0 u$, $r_g u$ по сравнению с единицей:

$$\left(\frac{du}{d\varphi}\right)^2 + u^2 = \frac{\epsilon^2 - 1 + r_g u}{h^2}.$$

Выпишем еще несколько полезных уравнений.

Для КН (в отличие от ЧД) радиальную координату r можно рассматривать как компоненту метрики (1). Можно сказать, что величина r является поперечной радиальной координатой, а продольной радиальной координатой является величина l из метрики (2).

Поэтому равенство нулю производной \dot{r} не означает прекращения движения по продольной радиальной координате l . По этой причине на горловине КН всегда будет выполняться условие $\dot{r} = 0$, но в общем случае величина $\dot{l} \neq 0$ на горловине КН.

3.2. Условие достижимости горловины кротовой норы свободно падающей частицей

Запишем величину \dot{l} на горловине КН. С учетом выражений (3) и (8) получаем в произвольной точке:

$$\frac{dl}{ds} = u^l = \pm \sqrt{\frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r} - 1 - \frac{h^2}{r^2}}.$$

В точке горловины, $r = r_0$,

$$(u_0^l)^2 = \frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r_0} - 1 - \frac{h^2}{r_0^2}, \quad (10)$$

причем для чисто радиального падения имеем $h = 0$, поэтому

$$(u_{00}^l)^2 = \frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r_0} - 1. \quad (11)$$

Из этого выражения видно, что при радиальном падении подавляющее число траекторий достигают горловины КН с ненулевой продольной скоростью. И наоборот: для того чтобы частица не достигла горловины КН, необходимо, чтобы правая часть выражений (10) или (11) была отрицательной.

При этом никаких ограничений на величину интеграла движения для удельной полной энергии ϵ , кроме того, что $\epsilon > 0$, не существует. Величина $\epsilon = 1$ соответствует тому, что частица на бесконечности имеет нулевую скорость. Диапазон значений $\epsilon > 1$ соответствует тому, что траектория частицы будет инфинитной, и наоборот: диапазон значений $\epsilon < 1$ соответствует тому, что частица гравитационно захвачена, и ее траектория будет финитной.

Анализ траекторий можно проводить в r -координатах (уравнения движения выглядят проще), а можно в l -координатах. Во втором случае уравнения содержат не только квадрат производных, но также и нелинейные функции l , которые являются также неявными функциями этой переменной. Тем не менее будем анализировать уравнения движения также и в l -координатах. Причина заключается в том, что в r -координатах на уравнения движения накладываются связи вида $r \geq r_0$, что приводит рассматриваемую задачу к задаче о движении с уравнениями с неголономными неудерживающими связями [10, 11]. Такие уравнения требуют специального рассмотрения, которого в нашем случае можно избежать, рассматривая задачу о движении в l -координатах. Особенно удобно рассмотрение задачи о движении пробных частиц в l -координатах вблизи горловины КН. В этом случае $r \approx r_0$ и можно анализировать уравнения движения в пределе малых l , т. е. $l \ll r_0$.

3.3. Собственная частота малых колебаний через горловину кротовой норы

Найдем частоту колебаний пробной частицы через горловину КН в предположении малости амплитуды колебаний.

Уравнение движения частицы запишем в виде

$$\frac{du_k}{ds} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} u^i u^j.$$

Тогда для $k = r$ имеем

$$\frac{d(u^r g_{rr})}{ds} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial g_{tt}}{\partial r} (u^t)^2 + \frac{\partial g_{rr}}{\partial r} (u^r)^2 \right].$$

Обозначая точкой производную по собственному времени ds , получаем

$$-\frac{\dot{r}}{1 - r_0/r} + \frac{r_0/r^2}{(1 - r_0/r)^2} \dot{r}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{r_g}{r^2} \frac{\epsilon^2}{(1 - r_g/r)^2} + \frac{r_0/r^2}{(1 - r_0/r)^2} \dot{r}^2 \right]. \quad (12)$$

Здесь $\dot{r} \equiv u^r$ определяется выражением (20) (см. ниже).

Переносим в выражении (12) все члены в правую часть и умножаем их на $(1 - r_0/r)^2$:

$$\left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \dot{r} - \frac{r_0}{2r^2} \dot{r}^2 + \frac{r_g \epsilon^2 (1 - r_0/r)^2}{2r_0^2 (1 - r_g/r)^2} = 0.$$

Или, обозначая $\delta r \equiv r - r_0$, получаем

$$\frac{\delta r \delta \dot{r}}{r} - \frac{r_0 (\delta \dot{r})^2}{2r^2} + \frac{r_g \epsilon^2 (\delta r)^2}{2r_0^2 (r - r_g)^2} = 0. \quad (13)$$

Вблизи горловины величину r можно разложить в ряд по малым значениям l . Используем для этого выражения (3):

$$r(l) \approx r_0 + \frac{l^2}{4r_0}, \quad \delta r \approx \frac{l^2}{4r_0}, \quad \delta \dot{r} \approx \frac{l \dot{l}}{2r_0}, \quad (14)$$

$$\delta \ddot{r} \approx \frac{l \ddot{l}}{2r_0} + \frac{(\dot{l})^2}{2r_0}.$$

Делим выражение (13) на $\delta r/r$ и подставляем в него значения производных из (14), в квадратичном приближении по l получаем

$$\frac{l \ddot{l}}{2r_0} + \frac{(\dot{l})^2}{2r_0} - \frac{r_0}{2r} \frac{l^2 (\dot{l})^2 / (4r_0^2)}{l^2 / (4r_0)} + \frac{r_g \epsilon^2 l^2}{8r_0^2 (r_0 - r_g)^2} = 0. \quad (15)$$

В квадратичном приближении по l второй и третий члены в (15) взаимно сокращаются:

$$\frac{l \ddot{l}}{2r_0} + \frac{r_g \epsilon^2 l^2}{8r_0^2 (r_0 - r_g)^2} = 0.$$

Отсюда получаем уравнение гармонических колебаний по l :

$$\ddot{l} + \omega^2 l = 0, \quad \omega^2 \equiv \frac{\epsilon^2 r_g}{4r_0 (r_0 - r_g)^2}.$$

Величина ω и определяет собственную частоту малых колебаний вблизи горловины КН для зависимости продольной физической координаты l от собственного времени s .

4. АНАЛИЗ ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ В МЕТРИКЕ КРОТОВОЙ НОРЫ ДЛЯ СЛУЧАЯ КРУГОВОЙ ОРБИТЫ

4.1. Круговые орбиты и их устойчивость

Рассмотрим важный случай круговых орбит вокруг КН. Анализировать будем точное уравнение движения (13). Круговые орбиты определяются соотношением

$$\frac{dr}{dt} = \frac{u^r}{u^t} = 0. \tag{16}$$

Кроме этого, есть еще одно соотношение, которое определяет устойчивые и неустойчивые орбиты. Для того чтобы получить критерий устойчивости, надо через (16) выписать уравнение для производной радиуса по времени:

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = \left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \epsilon^{-2} \times \left[\epsilon^2 - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(1 + \frac{h^2}{r^2}\right)\right]. \tag{17}$$

Экстремумы функции

$$U(r) = \sqrt{\left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \left(1 + \frac{h^2}{r^2}\right)}$$

определяют устойчивость орбиты. Минимумы функции отвечают устойчивым орбитам, максимумы — неустойчивым. Из вида функции следует, что она совпадает с функцией энергии, определяющей круговые орбиты в метрике Шварцшильда с гравитационным радиусом r_g . Поэтому так же, как и для ЧД Шварцшильда, в метрике КН (1) последняя устойчивая круговая орбита находится при $r = 3r_g$ и имеет параметры: $h = \sqrt{3}r_g$, $\epsilon = \sqrt{8/9}$ (см. [9], § 102).

Из сказанного выше следует, что устойчивая круговая орбита соответствует совместному решению двух уравнений:

$$\begin{aligned} \epsilon^2 - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(1 + \frac{h^2}{r^2}\right) &= 0, \\ U'(r) &= 0. \end{aligned} \tag{18}$$

Здесь и далее штрих означает производную по r . Решая совместно систему (18), получаем

$$\begin{aligned} h^2 &= \frac{r_g r}{2 - 3r_g/r}, \\ \epsilon^2 &= \frac{(1 - r_g/r)^2}{1 - (3/2)r_g/r}. \end{aligned} \tag{19}$$

Эти два уравнения определяют связь удельного углового момента h и удельной полной энергии ϵ с радиусом r устойчивой круговой орбиты частицы.

Обратим особое внимание на то, что выражения (7) и (19) не зависят от величины r_0 . Это связано с тем, что величины ϵ и h не зависят от компоненты g_{rr} метрики (1). В нерелятивистском пределе $r_g/r \rightarrow 0$ второе выражение (19) переходит в известную ньютоновскую формулу для «постоянной энергии» частицы на круговой орбите вокруг массивного центра с массой M :

$$\epsilon \rightarrow 1 - M/(2r).$$

Минимальный радиус неустойчивой орбиты есть $r = (3/2)r_g$, при этом $h \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow \infty$.

Поскольку в метрике КН орбиты с $r < r_0$ невозможны, наличие последней устойчивой орбиты, а тем более последней неустойчивой орбиты определяется соотношением между гравитационным радиусом КН и радиусом горловины. При $r_0 > 3r_g$ все круговые орбиты являются устойчивыми.

Для случая $r_0 = r_g$ появляется последняя устойчивая орбита. В случае метрики Шварцшильда пробная частица, минуя $r = (3/2)r_g$, совершает менее одного оборота вокруг ЧД. Вычислим полное изменение угла при сходе частицы с последней устойчивой орбиты в случае КН. Выпишем уравнение для u^r :

$$(u^r)^2 = \left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \left(\frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r} - 1 - \frac{h^2}{r^2}\right). \tag{20}$$

С другой стороны, имеем

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{u^\varphi}{u^r} = \frac{u_\varphi g^{\varphi\varphi}}{u^r} = -\frac{h}{r^2 u^r}.$$

Подставляя сюда (20), получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dr} &= \\ &= \frac{h\sqrt{1 - r_g/r}}{r^2 \sqrt{[\epsilon^2 - (1 + h^2/r^2)(1 - r_g/r)](1 - r_0/r)}}. \end{aligned} \tag{21}$$

Полное изменение угла φ находится из этой формулы интегрированием по радиусу.

Для случая $r_0 = r_g$ интегрируем выражение (21) и получаем полное изменение угла от момента схода с минимально устойчивой орбиты до гравитационного радиуса:

$$\Delta\varphi = \int_{3r_g}^{r_g} \frac{9h dr}{r^2 (3r_g/r - 1)^{3/2}}.$$

Этот интеграл расходится в точке $r = 3r_g$, что соответствует бесконечному количеству оборотов при сходе с минимально устойчивой орбиты для ЧД.

4.2. Собственное время витка обращения по круговой орбите

Рассчитаем собственное время обращения пробной частицы вокруг КН (или ЧД). Учтем, что элемент собственного времени — это просто инвариантный элемент интервала ds :

$$ds \equiv \frac{d\varphi}{u^\varphi} = \frac{d\varphi}{hg^\varphi\varphi}.$$

Отсюда для полного оборота $\delta\varphi = 2\pi$ получаем

$$\delta s = \frac{2\pi r^2}{h}.$$

Подставляя сюда для h первое выражение (19), получаем

$$\delta s = 2\pi r \sqrt{2\frac{r}{r_g} - 3} = 2\pi r \sqrt{2\frac{r}{r_g} - 3} \sqrt{1 - \frac{3}{2}\frac{r_g}{r}}.$$

Отсюда видно, что выражение для собственного времени витка оборота вокруг КН δs на бесконечности совпадает с его ньютоновским пределом $\delta\tau$:

$$\delta\tau = 2\pi r \sqrt{r/M}.$$

Кроме того, величина собственного времени δs не зависит от параметра r_0 для КН, т. е. она одинакова и для КН, и для ЧД.

5. ПРИБЛИЖЕННЫЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

5.1. Уравнение траектории пробной частицы

Аналитический вид решения уравнения (13) нам найти не удалось, поэтому будем анализировать приближенное уравнение. Надо отметить, что это не просто постньютоновское приближение, принятое в ОТО. Поскольку существует условие $r_g < r_0$, можно также рассматривать приближение по малому параметру r_g/r_0 . В зависимости от величины этого отношения, разложение может быть достаточно точным. В данном разделе мы примем, что $r_g \ll r_0$.

Для этого сделаем замену $x = r_0 u$, тогда уравнение (13) примет вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 + (1-x)x^2 &= \\ &= \left(\frac{r_0}{h}\right)^2 \left(\epsilon^2 - 1 + \frac{r_g}{r_0}x\right) \frac{1-x}{1 - \frac{r_g}{r_0}x}. \end{aligned} \quad (22)$$

Новая переменная x лежит в интервале $0 \leq x \leq 1$. В принятом нами приближении величиной $(r_g/r_0)x$ можно пренебречь по сравнению с единицей, но нельзя пренебрегать по сравнению с величиной $\epsilon^2 - 1$, которая сама является малой. Поэтому уравнение (16) упрощается и имеет вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 + (1-x)x^2 &= \\ &= \left(\frac{r_0}{h}\right)^2 \left(\epsilon^2 - 1 + \frac{r_g}{r_0}x\right) (1-x). \end{aligned}$$

Это уравнение можно преобразовать к виду

$$\left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 = f(x) = (1-x)(A + Bx - x^2). \quad (23)$$

Введем обозначения

$$A \equiv \left(\frac{r_0}{h}\right)^2 (\epsilon^2 - 1),$$

$$B \equiv \left(\frac{r_0}{h}\right)^2 \frac{r_g}{r_0} = \frac{2r_0}{p}.$$

Форма геодезических определяется корнями функции $f(x)$. Она представляет собой полином третьей степени и, соответственно, имеет три корня. Первый корень, очевидно, есть $x_1 = 1$, два других корня —

$$\begin{aligned} x_2 &= \frac{r_0}{p} (1 + e), \\ x_3 &= \frac{r_0}{p} (1 - e). \end{aligned} \quad (24)$$

Первый корень полинома третьей степени (x_1) представляет собой орбиту, находящуюся на горловине КН, второй корень (x_2) является расстоянием в апоцентре орбиты в ньютоновском приближении, а третий корень (x_3) — расстоянием в перигентре. Соотношение между корнями представляется в зависимости от параметра орбиты p . В случае, когда $p > 2r_0$, соотношение между корнями имеет вид $x_1 > x_2 > x_3$. В случае, когда $r_0 \leq p \leq 2r_0$, соотношение между корнями имеет вид $x_2 > x_1 > x_3$.

Разложив многочлен третьей степени в произведение линейных членов, получим уравнение

$$\left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 = f(x) = (1-x)(x_2 - x)(x - x_3). \quad (25)$$

Решением этого уравнения является эллиптический интеграл первого рода.

Рассмотрим решение для орбиты пробной частицы вокруг КН. Для этого в уравнении (18) сделаем подстановку [12]:

$$x = \frac{r_0}{p} (1 + e \cos \chi).$$

Здесь χ — новая переменная, которую можно назвать «релятивистской аномалией». Производная от функции x по переменной χ есть

$$\frac{dx}{d\chi} = -e \frac{r_0}{p} \sin \chi.$$

Введем новый параметр задачи $\rho = r_0/p$. Тогда можно написать уравнения для линейных членов и производной в виде

$$\begin{aligned} 1 - x &= 1 - \rho - e\rho \cos \chi, \\ x_2 - x &= e\rho (1 - \cos \chi), \\ x - x_3 &= e\rho (1 + \cos \chi), \\ \left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 &= (e\rho)^2 \sin^2 \chi \left(\frac{d\chi}{d\varphi}\right)^2. \end{aligned}$$

Теперь для релятивистской аномалии получаем уравнение

$$\left(\frac{d\chi}{d\varphi}\right)^2 = (1 - \rho - e\rho \cos \chi).$$

Отсюда следует, что параметр орбиты p в случае эксцентричных орбит не может быть меньше, чем $(1 + e \cos \chi)r_0$. Это неравенство соответствует тому, что в случае эксцентричных орбит расстояние от центра не может быть менее, чем r_0 :

$$r(\varphi) > \frac{1 + e}{1 + e \cos \chi} r_0.$$

Переобозначим $\alpha = \pi/2 - \chi/2$ и запишем окончательно уравнение для величины α :

$$\frac{d\alpha}{d\varphi} = \pm \frac{q}{2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha},$$

где

$$k^2 = \frac{2e\rho}{1 + e\rho - \rho},$$

$$q^2 = 1 + e\rho - \rho.$$

Решением этого уравнения является эллиптический интеграл первого рода:

$$\int_0^\alpha \frac{d\tau}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \tau}} = \pm \frac{q}{2} \Delta\varphi(\alpha),$$

где $\Delta\varphi(\alpha)$ — изменение угловой координаты φ при изменении «релятивистской аномалии» от $\pi - 2\alpha$ до π .

Эти решения можно записать в виде функций Якоби:

$$\sin \alpha = \operatorname{sn} \left(\frac{q}{2} \Delta\varphi(\alpha) \right), \quad \cos \alpha = \operatorname{cn} \left(\frac{q}{2} \Delta\varphi(\alpha) \right).$$

Соответственно выражение для «релятивистской аномалии» есть

$$\cos(\chi) = \operatorname{cn}^2 \left(\frac{q\varphi}{2} \right) - \operatorname{sn}^2 \left(\frac{q\varphi}{2} \right).$$

Здесь cn и sn — эллиптические косинус и синус соответственно.

Таким образом, уравнение траектории пробной частицы на орбите вокруг КН имеет вид

$$r = \frac{p}{1 + e \left(\operatorname{cn}^2 \left(\frac{q\varphi}{2} \right) - \operatorname{sn}^2 \left(\frac{q\varphi}{2} \right) \right)}.$$

5.2. Энергия пробной частицы

Выведем теперь формулу для постоянной энергии в случае пробной частицы на орбите вокруг КН.

Используем первые интегралы задачи о движении:

$$1 = \frac{\epsilon^2}{1 - r_g/r} - \frac{1}{1 - r_0/r} \frac{dr^2}{ds^2} - r^2 \frac{d\varphi^2}{ds^2}.$$

Преобразуем это уравнение как

$$\begin{aligned} \left(\epsilon^2 - 1 + \frac{r_g}{r} \right) \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) &= \\ &= \left(1 - \frac{r_g}{r} \right) \frac{dr^2}{ds^2} - \left(1 - \frac{r_g}{r} \right) \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) r^2 \frac{d\varphi^2}{ds^2}. \end{aligned}$$

В этом уравнении мы можем пренебречь множителем $(1 - r_g/r)$ в правой части, получаем уравнение

$$\left(\epsilon^2 - 1 + \frac{r_g}{r} \right) \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) = \frac{dr^2}{ds^2} - \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) r^2 \frac{d\varphi^2}{ds^2},$$

теперь сделаем подстановку

$$r^2 \frac{d\varphi}{ds} = h.$$

Воспользуемся также подстановкой для траектории, которую, как и в [12], в случае $e < 1$ будем называть «релятивистским эллипсом»,

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{p} (1 + e \cos \chi)$$

и

$$\frac{dr}{ds} = r^2 \frac{e \sin \chi}{p} \frac{d\chi}{ds},$$

а также

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\chi}{ds}\right)^2 &= (1 - \rho - e\rho \cos \chi) \left(\frac{d\varphi}{ds}\right)^2 = \\ &= (1 - \rho - e\rho \cos \chi) \frac{h^2}{r^4}, \end{aligned}$$

окончательно получим

$$\begin{aligned} \epsilon^2 - 1 + \frac{r_g}{p} (1 + e \cos \chi) &= \\ &= \frac{h^2}{p^2} (1 + e^2) + \frac{2eh^2}{p^2} \cos \chi. \end{aligned}$$

Приравнивая члены при функции $\cos \chi$ получаем выражение для $h(p)$:

$$h^2 = \frac{1}{2} r_g p, \quad (26)$$

а также для $\epsilon(e, p)$:

$$\epsilon^2 = 1 - \frac{r_g}{2p} (1 - e^2) = 1 - \frac{GM}{a}. \quad (27)$$

Здесь a — большая полуось «релятивистского эллипса». Мы приняли, что

$$p = a(1 - e^2).$$

В классической небесной механике [13] величина

$$W = -\frac{GM}{a}$$

называется постоянной энергии. При этом $W < 0$ и $e < 1$ — эллиптическая орбита, $W = 0$ и $e = 1$ — параболическая орбита, $W > 0$ и $e > 1$ — гиперболическая орбита.

5.3. Анализ вида финитных траекторий

Рассмотрим вид траекторий при различных значениях параметров орбиты (или ϵ , h , или e и p) для приближенного решения. Ограничимся рассмотрением финитных траекторий. Независимо от свойств горловины КН (она может быть «проходимой» или «непроходимой»), геодезические в этом случае всегда можно построить.

Наиболее простой вид траектории имеют в случае

$$p \geq r_0(1 + e).$$

В этом случае траектория полностью находится на одной поле пространства, касаясь горловины КН в одной точке, когда параметр $p = r_0(1 + e)$. В случае

финитных траектории они имеют вид «релятивистского» эллипса, другими словами, почти эллиптической траектории со смещением перицентра орбиты.

Выпишем неравенства, которым должны удовлетворять параметры геодезической. Прежде всего напишем значения апоцентра и перицентра траектории:

$$\begin{aligned} r_a &= \frac{p}{1 - e}, \\ r_p &= \frac{p}{1 + e}. \end{aligned}$$

Из неравенства $r \geq r_0$ следует, что

$$p \geq r_0(1 + e \cos \chi). \quad (28)$$

Также получаем

$$1 - \rho - e\rho \cos \chi \geq 0. \quad (29)$$

Отметим, что неравенства (28) и (29) эквивалентны.

Отсюда получаем неравенство, которое определяет интервал изменения χ :

$$\frac{p - r_0}{er_0} \geq \cos \chi \geq -1.$$

В случае

$$p = r_0(1 + e)$$

угол χ содержится в интервале $\pi \geq \chi \geq 0$. Для меньших значений p интервал значений угла χ меньше, чем π . Возникает «дефицит угла», аналогичный геометрии пространства с космической струной [14]. Например, при

$$p = r_0 \left(1 + \frac{1}{2}e\right)$$

интервал значений χ есть $\pi \geq \chi \geq 60^\circ$.

Будем также считать, что имеют место две вселенные: «первая вселенная» (или верхняя поля пространства, или верхняя вселенная) и «вторая вселенная» (или нижняя поля пространства, или нижняя вселенная). Будем также полагать, что апоцентр рассматриваемой системы (траектории или геодезической) находится в «первой вселенной». Положение траектории может быть только в «первой вселенной» или может находиться частично в «первой вселенной», частично во «второй вселенной».

Рассмотрим эти случаи в зависимости от соотношения между параметрами, которые определяют траектории движения. Положение траектории зависит от трех параметров: p , r_0 и e . Если $p \geq r_0(1 + e)$, то траектория полностью лежит в «первой вселенной», причем траектория касается горловины КН в

одной точке только при $p = r_0(1 + e)$. Далее, если $p < r_0(1 + e)$, то траектория переходит во «вторую вселенную». Когда траектория располагается в обеих вселенных («первой» и «второй»), угол χ меняется в интервале

$$\frac{p - r_0}{er_0} \geq \cos \chi \geq -1,$$

или

$$\pi \geq \chi \geq \arccos \frac{p - r_0}{er_0}.$$

В случае, когда $p < r_0$, интервал есть

$$\pi \geq \chi \geq \frac{\pi}{2}.$$

В случае, когда $r_0(1 + e) \geq p \geq r_0$ интервал есть

$$\frac{\pi}{2} \geq \chi \geq 0.$$

Полученные численно примеры характерных траекторий движения пробной частицы вблизи КН приведены в Приложении.

6. ОЦЕНКИ СМЕЩЕНИЯ ПЕРИЦЕНТРА

Как известно, смещение перигелия планеты Меркурий явилось первым тестом ОТО. Существует значимое расхождение между предсказаниями ньютоновской теории гравитации и наблюдаемым смещением перигелия. Оно составляет примерно $43''$ за 100 лет.

С тех пор смещение перигелия различных релятивистских объектов в двойных системах превратилось в один из самых мощных тестов исследования двойных звездных систем. В частности, после открытия первого двойного пульсара PSR 1913+16 этот тест позволил точно измерить массы компонент двойной системы.

Для вычисления смещения перигелия проинтегрируем уравнение (17):

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\chi}{\sqrt{1 - \rho - e\rho \cos \chi}} = \Delta\varphi.$$

В случае $\rho \ll 1$ интеграл имеет простой вид:

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\chi \left(1 + \frac{\rho}{2} + \frac{e\rho}{2} \cos \chi \right) = \Delta\varphi.$$

Смещение угловой координаты φ при полном обороте по «релятивистской аномалии» $-\pi \leq \chi \leq \pi$

(здесь мы отсчитываем «релятивистскую аномалию» от апоцентра) составит

$$\Delta\varphi = 2\pi + \frac{\pi r_0}{p}.$$

Отметим, что связь между периодом пробной частицы на орбите вокруг КН и ее большой полуось определяется гравитационным радиусом КН, в то время как смещение перигелия орбиты определяется радиусом горловины КН. В рассматриваемом случае, когда $r_0 \gg r_g$, смещение перигелия может значительно превосходить величину, предсказываемую ОТО для ЧД. Это может служить критерием для различения КН от ЧД при астрономических наблюдениях.

В случае, когда радиус горловины превосходит три гравитационных радиуса ($r_0 > 3r_g$) и все круговые орбиты вокруг КН являются устойчивыми, величина смещения перигелия пробной частицы на орбите вокруг КН превосходит смещение перигелия этой частицы на орбите ЧД с таким же гравитационным радиусом.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В связи с растущей точностью наблюдений и новым наблюдательным каналом — гравитационно-волновой астрономией — отличия движения вещества вблизи ЧД и КН могут стать различимыми.

Для будущих поисков наблюдательных эффектов, отличающих именно КН, необходимо знать формы характерных траекторий тел (пробных частиц) вблизи КН. В предлагаемой работе выведены уравнения движения пробной частицы в метрике КН, а также рассмотрены наиболее интересные свойства этих движений. Выведено общее уравнение геодезических в метрике КН и рассмотрены некоторые свойства этих геодезических. Проанализированы точное решение для круговых орбит пробных частиц вокруг КН, а также приближенное аналитическое решение уравнений геодезических. Рассмотрены смещение перигелия орбиты пробной частицы в поле КН и обсуждены возможные наблюдательные следствия. Представлены примеры траекторий движения пробных частиц у КН, полученные путем численного моделирования.

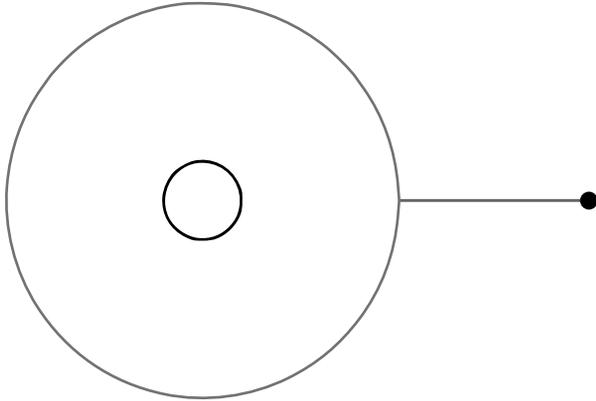


Рис. 1. (В цвете онлайн) Геодезическая начинается в зеленой точке, доходит до горловины КН, переходит на вторую полу пространства («вторую вселенную») и кончается в черной точке. Для такой траектории момент количества движения $h = 0$, т.е. пробная частица движется только по радиусу. Полная энергия $\epsilon \approx 0.949$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$. Траектория в «первой вселенной» накладывается на траекторию во «второй вселенной», поэтому в проекции r, ϕ две части траектории сливаются

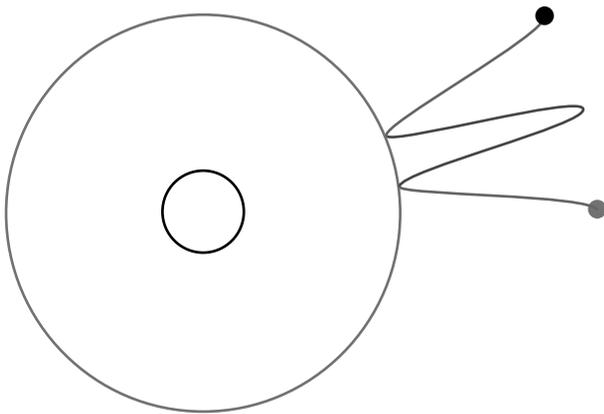


Рис. 2. (В цвете онлайн) Геодезическая выходит из зеленой точки, движется по «первой вселенной». Этот участок геодезической обозначается красной линией. Достигает горловины, проходит ее. Далее геодезическая движется по «второй вселенной», которая обозначена синей линией. Затем геодезическая возвращается к горловине, вновь пересекает ее и возвращается в «первую вселенную» (красная линия). Геодезическая останавливается в черной точке. Момент количества движения $h = 0.1r_g$. Полная энергия $\epsilon \approx 0.949$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Моделирование финитных траекторий

Рассмотрим теперь вид траекторий при различных значениях параметров орбиты ϵ, h или e, p (см. (26), (27)).

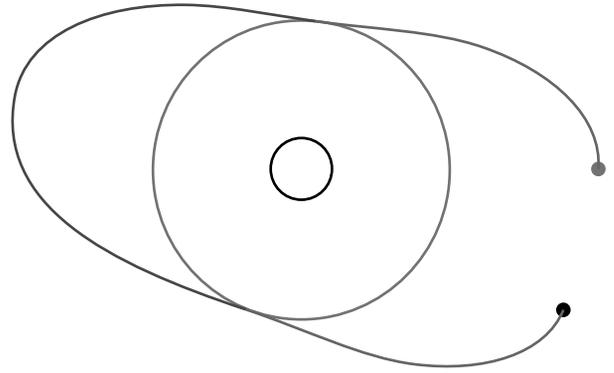


Рис. 3. (В цвете онлайн) Данная траектория представляет наибольший интерес. Она начинается, как и прежде, в зеленой точке, доходит до горловины, входит во «вторую вселенную», совершает половину одного оборота, возвращается к горловине, проходит через нее и заканчивается в черной точке. Небольшой разрыв в траектории соответствует смещению апоцентра. Момент количества движения $h = r_g$. Полная энергия $\epsilon \approx 0.953$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$

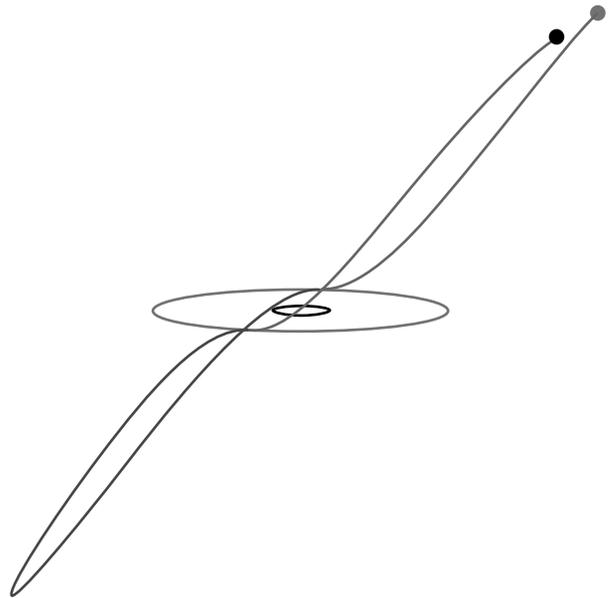


Рис. 4. (В цвете онлайн) Траектория, представленная на рис. 3, изображенная в искусственной виртуальной проекции, которая графически разделяет верхнюю и нижнюю полы пространства

Наиболее простой вид траектории имеют в случае

$$p \geq r_0.$$

В этом случае траектория полностью находится на одной поле пространства, касаясь горловины КН в одной точке, в случае, когда параметр $p = r_0$ — см.

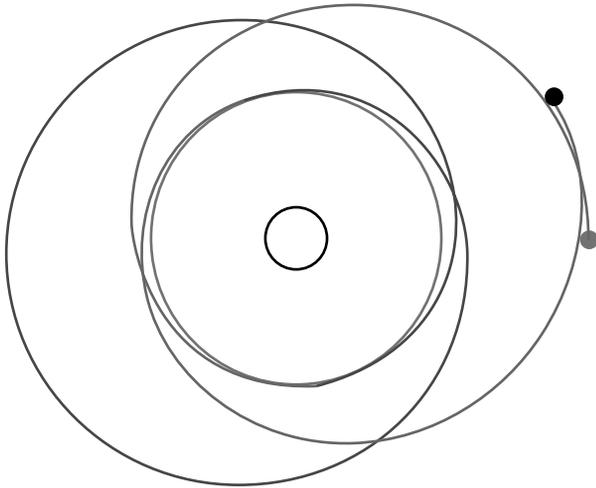


Рис. 5. (В цвете онлайн) Траектория, аналогичная изображенному на рис. 1, 2. Момент количества движения $h = 1.9r_g$. Полная энергия $\epsilon \approx 0.966$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$

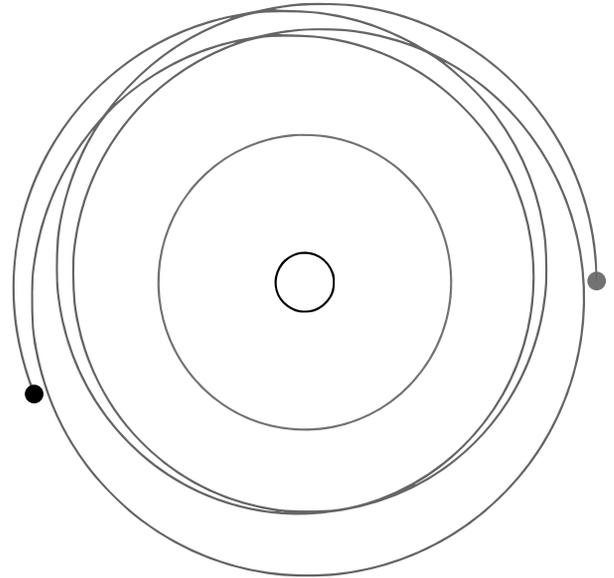


Рис. 7. (В цвете онлайн) Траектория, аналогичная изображенному на рис. 1, 2. Момент количества движения $h = 2.3r_g$. Полная энергия $\epsilon \approx 0.973$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$

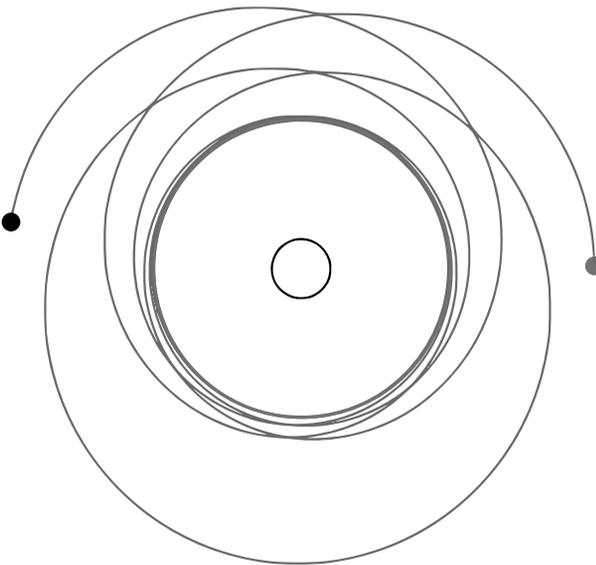


Рис. 6. (В цвете онлайн) Траектория, аналогичная изображенному на рис. 1, 2. Момент количества движения $h = 2r_g$. Полная энергия $\epsilon \approx 0.973$. Минимальное расстояние от центра КН $r_{min} = r_0$

рис. 1. В случае финитных траекторий они имеют вид «релятивистского» эллипса, другими словами, почти эллиптической траектории со смещением перигея орбиты.

Приведем несколько примеров финитных траекторий вблизи КН (рис. 2–7). Все рисунки сделаны в координатах r, ϕ , за исключением рис. 4, который

представляет качественный вид траектории, когда луч зрения лежит в плоскости горловины КН. Параметры траектории представлены в единицах гравитационного радиуса (r_g) КН. Максимальное удаление (апоцентр) траектории от центра КН для всех траекторий есть $r_{max} = 10r_g$. Черные линии — горизонт ЧД. Фиолетовые линии — положение горловины КН. Зеленая точка — точка старта геодезической, черная точка — точка окончания геодезической. Зеленая точка находится при $\phi = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Черепашук, Тесные двойные звезды, Физматлит, Москва (2013).
2. В. Р. Abbott et al., Phys. Rev. Lett. **116**, 061102 (2016).
3. К. Bronnikov, Acta Phys. Polon. В **4**, 251 (1973).
4. М. Morris and К. Thorn, Amer. J. Phys. **56**, 395 (1988).
5. С. Vambi and D. Stojkovic, arXiv:2105.00881v2.
6. Н. С. Кардашев, Л. Н. Липатова, И. Д. Новиков, А. А. Шацкий, ЖЭТФ **146**, 75 (2014).

7. И. Д. Новиков, Н. С. Кардашев, А. А. Шацкий, УФН **177**, 1017 (2007).
8. И. Д. Новиков, С. В. Репин, Астрон. ж. **98**, 1 (2021).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1988).
10. Г. Голдстейн, *Классическая механика*, Наука, Москва (1975).
11. В. Ф. Журавлев, *Основы теоретической механики*, Физматлит, Москва (2001).
12. С. Чандрасекар, *Математическая теория черных дыр*, Мир, Москва (1986).
13. В. Е. Жаров, *Сферическая астрономия*, Век-2, Фрязино (2006).
14. M. V. Sazhin and O. S. Sazhina, La Rivista del Nuovo Cimento, <https://doi.org/10.1007/s40766-021-00022-x> (2021).

ТЕНИ ЧЕРНЫХ ДЫР КАК ИСТОЧНИК ОГРАНИЧЕНИЙ НА РАСШИРЕННЫЕ ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ

В. А. Прокопов^{a,b*}, *С. О. Алексеев*^{a,b**}, *О. И. Зенин*^{b***}

^a *Государственный астрономический институт им. П. К. Штернберга,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119234, Москва, Россия*

^b *Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119234, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 марта 2022 г.,
после переработки 29 марта 2022 г.
Принята к публикации 29 марта 2022 г.

Получение первых изображений черных дыр открыло новые возможности для проверки расширенных теорий гравитации. Нами рассмотрено построение фона тени сферически-симметричных черных дыр в частном случае метрики, в которой, $g_{11} = -g_{00}^{-1}$. Методы вычисления расширены на наиболее общий случай невращающейся черной дыры $g_{11} \neq -g_{00}^{-1}$. Результаты анализа сравниваются с предсказаниями общей теории относительности при учете данных Event Horizon Telescope. Результаты для модели Хорндески с инвариантом Гаусса–Бонне, петлевой квантовой гравитации, скалярных моделей Бамбелби и Гаусса–Бонне полностью согласуются с наблюдениями M87*. В конформной гравитации должны быть исключены большие значения m_2 и Q_s . В STEGR $f(Q)$ -гравитации наблюдения M87* ограничивают значения параметра α следующим образом: $-0.025 < \alpha < 0.04$. Для альтернативного обобщения метрики Бамбелби с приближением Шварцшильда: $-0.3 < l < 0.45$. Результаты демонстрируют тот максимум, которого можно достичь без учета вращения черной дыры.

DOI: 10.31857/S0044451022070112
EDN: EEOFFU

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые сферически-симметричные решения типа черная дыра были получены более 100 лет назад. На существование подобных объектов указывают результаты динамики двойных систем [1], гравитационно-волновая астрономия [2, 3], а также прямые изображения теней черной дыры [4]. В настоящее время общая теория относительности (ОТО) с большой точностью описывает почти все астрономические данные. Однако такие проблемы, как темная материя, темная энергия, эволюция ранней Вселенной, квантование гравитации и т. д., ждут лучшего теоретического обоснования. Именно по этой причине и развиваются новые гравитационные

модели, например, $f(R)$ -гравитация [5], $f(Q)$ -гравитация [6], скалярно-тензорные теории, включая общий случай с уравнениями поля второго порядка: теорию Хорндески [7–10], телепараллельные модели [11], гравитационные модели с конформной симметрией [12, 13], петлевая квантовая гравитация [14–16], скалярная гравитация Гаусса–Бонне [17] и многие другие. Для дальнейшего развития желательно проверить их предсказания в максимально широком диапазоне параметров. Благодаря получению изображений теней черных дыр изучение предсказаний этих теорий в окрестности черных дыр предоставляет такую возможность.

Кратко обсудим особенности рассматриваемых далее моделей. Начнем с модели Хорндески [18]. Это наиболее общий случай скалярно-тензорной гравитации с уравнениями поля второго порядка [19]. Моделью Хорндески можно моделировать темную энергию или темную материю, и эта модель представляется более общей и фундаментальной, чем теория Бранса–Дикке. После события GW170817 (слияния двух нейтронных звезд сравнительно неда-

* E-mail: slaprok777@gmail.com

** E-mail: alexeyev@gmail.com

*** E-mail: dkiiabu4@gmail.com

леко от Земли) теория Хорндески была значительно сужена и использовалась, в том числе, в форме DHOST (вырожденных скалярно-тензорных высшего порядка) теорий [20]. Далее, теория Хорндески часто используется в сочетании с инвариантом Гаусса–Бонне [10]

$$S_{GB} = R_{\alpha\beta\gamma\sigma}R^{\alpha\beta\gamma\sigma} - 4R_{\alpha\beta}R^{\alpha\beta} + R^2,$$

где $R_{\alpha\beta\gamma\sigma}$, $R_{\alpha\beta}$ и R — тензоры Римана, Риччи и скалярная кривизна соответственно.

Следующая рассматриваемая нами модель — петлевая квантовая гравитация (loop quantum gravity, LQG) — перспективный подход к построению квантовой теории гравитации. Ключевая идея этого подхода заключается в построении квантованной теории гравитации независимо от квантования других физических взаимодействий с помощью перехода к переменным Аштекара. Эти величины образуют замкнутую алгебру операторов, позволяя строить перенормируемую теорию. LQG дает возможность совместить стадии и отскока, и инфляции, воспроизводя теорию ранней Вселенной [21].

Далее, рассмотрим модели гравитации с конформной симметрией [11]. Наличие подобной симметрии в действии открывает перспективы построения перенормируемой теории гравитации. Из-за проблем в первых версиях в настоящее время рассматриваются модели с нелинейной реализацией конформной симметрии (см., например, [22–24]). Интерес к этим моделям появился не так давно, поэтому многие проблемы до конца не решены, например, отсутствие инфляционной асимптотики [24]. Когда эти проблемы будут решены, перспективы теории возрастут.

Следующая рассмотренная теория — модель Бамбелби, расширяющая ОТО с помощью векторного поля. При выборе подходящего потенциала векторное поле Бамбелби V_μ приобретает ненулевое вакуумное среднее, генерируя спонтанное нарушение лоренцевой симметрии [25]. Обсуждаемый подход имеет перспективу стать «мостом» между теорией струн и ОТО на планковских масштабах, решая задачи ОТО в области высоких энергий.

Далее рассмотрим телепараллельный эквивалент общей теории относительности (TEGR). Это расширение ОТО с ненулевыми кручением и неметричностью, где геометрическая деформация генерирует гравитационное поле. TEGR включает дополнительные степени свободы, применимые для описания нерешенных проблем ОТО. Нами рассмотрена $f(Q)$ -гравитация — симметричная TEGR (STEGR), в которой неметричность Q не равна нулю [26].

Последняя модель — это скалярная гравитация Гаусса–Бонне — теория гравитации с действием, включающим все возможные квадратичные скаляры кривизны [17]. Эти инварианты играют ту же роль, что и в предыдущем случае: будучи феноменологической асимптотой некоторой обобщенной геометрии, они имеют перспективы предложить физическое объяснение нерешенных проблем ОТО.

Поскольку любые физические измерения имеют конечную точность, экспериментальный результат может иметь альтернативные объяснения на основании различных теорий [27]. Обычно на первом этапе выбирают самую простую модель. В дальнейшем, с уточнением данных, возможен более узкий выбор теории. Таким образом, размер тени черной дыры (ЧД), являющийся первым параметром, получаемым из наблюдений, в нашей работе используется для оценки предсказаний обсуждаемой модели. Поэтому в качестве первых приближений используется стандартное пространство-время ОТО, описываемой метриками Шварцшильда и Керра.

Ранее обсуждалось моделирование тени черной дыры, расчет параметров последней устойчивой орбиты и сильного гравитационного линзирования при учете третьей поправки в сферически-симметричном пространстве-времени. Такие метрики представляют собой продолжение метрики Рейсснера–Нордстрема на следующий порядок разложения по r^{-1} [28]. Поскольку одной тени невращающейся ЧД недостаточно для проверки моделей сложнее Рейсснера–Нордстрема, для определения коэффициентов разложения метрики необходимо использовать результаты наблюдений и размера тени ЧД, и последней устойчивой орбиты, и сильного гравитационного линзирования. Расчет следующих порядков требует увеличения количества измерений. В работе [29] было показано, что при учете вращения учета формы тени достаточно для проверки теорий, не выходящих за рамки метрики Керра–Ньюмена.

В данной работе обсуждается метод ограничения расширенных моделей гравитации, использующий современные изображения ЧД. Здесь необходимо отметить, что в новых, расширенных моделях гравитации в первую очередь рассматривают невращающиеся решения для ЧД, поскольку с ними проще работать. Поэтому и мы рассматриваем формализм для сферически-симметричного пространства-времени, чтобы извлечь максимум информации в более простом случае (в качестве первого шага общего исследования). Метод применим и в случае $g_{11} \neq -g_{00}^{-1}$. В работе [30] было показано, что при учете дополнительных приближений

максимальное изменение размера тени для вращающейся ЧД составит 5–7%. При малой скорости вращения можно рассматривать ЧД как статическую. Первые ограничения на размер тени ЧД при наблюдении галактики M87* были получены в [30] ($4.31M < D < 6.08M$).

Работа организована следующим образом. В разд. 2 рассматриваются метрики с поправками в виде ряда Тейлора в случае $g_{11} = -g_{00}^{-1}$, в разд. 3 – построение теней для расширенных теорий в случае $g_{11} \neq -g_{00}^{-1}$, в разд. 4 сравниваются точности различных методов и подводятся итоги.

2. РЕШЕНИЯ ДЛЯ СЛУЧАЯ РАСШИРЕННЫХ ТЕОРИЙ ГРАВИТАЦИИ

$(A(r) = B^{-1}(r))$

Общее описание сферически-симметричного, статического, асимптотически плоского пространства-времени в расширенных теориях гравитации представляет собой метрику, обобщающую пространство-время Шварцшильда:

$$ds^2 = -A(r) dt^2 + B(r) dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2), \quad (1)$$

где $A(r)$ и $B(r)$ – метрические функции, зависящие от радиальной координаты r . Метрика Шварцшильда в планковской системе единиц $G = c = \hbar = 1$ имеет вид

$$A(r) = B^{-1}(r) = 1 - \frac{2M}{r}, \quad (2)$$

где M – масса центрального объекта. Заметим, что метрики Шварцшильда, Рейснера – Нордстрема, их продолжения можно представить в виде разложения в ряд Тейлора в области $r \gg 2M$. В качестве первого приближения рассматривается метрика Шварцшильда, и в этом приближении можно описать, например, траектории звезд вокруг ЧД. Следующий порядок – метрика Рейснера – Нордстрема – позволяет описать влияние электрического или приливного заряда [31], ведь учет приливного заряда способен поменять свойства тени [28, 29, 32, 33].

Вначале рассмотрим вырожденный случай «симметричных» метрических функций $A(r) = B(r)^{-1}$ в уравнении (1). Положение горизонта определяется условием $A(r) = 0$. Если решение последнего уравнения не единственно, за физический горизонт принимают внешнее решение. В третьем порядке разложения ряд $A(r)$ имеет вид

$$A(r) = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q}{r^2} + \frac{C_3}{r^3}, \quad (3)$$

где Q – приливной заряд, C_3 – коэффициент разложения при r^{-3} . Для упрощения вычислений нормируем все значения на массу ЧД: $\hat{r} = r/M$, $q = Q/M^2$ и $c_3 = C_3/M^3$. В планковской системе единиц ($G = c = \hbar = 1$) параметры M , Q , C_3 , r безразмерны. Следовательно, конфигурационное пространство становится двумерным. Тогда метрическая функция $A(r)$ примет вид

$$A(\hat{r}) = 1 - \frac{2}{\hat{r}} + \frac{q}{\hat{r}^2} + \frac{c_3}{\hat{r}^3}. \quad (4)$$

Совокупность неустойчивых фотонных орбит образует фотонную сферу, а переходящие в нее геодезические определяют границу тени ЧД. Фотоны от удаленного источника с прицельным параметром b , большим критического значения b_{ph} , остаются вне фотонной сферы и далее достигают внешнего наблюдателя. Остальные фотоны с $b < b_{ph}$ захватываются ЧД и образуют на картинной плоскости изображения светлый диск с темным пятном в центре, которое и называется тенью ЧД. Таким образом, видимая форма изображения от невращающейся (или медленно вращающейся) ЧД для удаленного наблюдателя имеет форму диска, радиус которого определяется критическим значением прицельного параметра ($b_{ph} = 3\sqrt{3}M$ для ЧД Шварцшильда [34]).

Рассмотрим оптически тонкий, излучающий аккреционный диск, окружающий компактный объект [35]. Следуя подходу [34], модифицируем его для симметричного случая $A(r) = B(r)^{-1}$ (1) с дополнительными поправками. Таким образом, излучение испускается из всего объема фотонной сферы над горизонтом ЧД. Поэтому наблюдаемая удельная интенсивность I_{ν_0} (обычно измеряемая в эрг $^{-1}$ · см $^{-2}$ · ср $^{-2}$ · Гц $^{-1}$) на видимой частоте фотона ν_0 в точке на картинной плоскости (X, Y) на небесной сфере определяется как

$$I_{\nu_0} = \int_{\gamma} z^3 j(\nu_e) dl_{prop}, \quad (5)$$

где ν_e – излучаемая частота, $z = \nu_0/\nu_e$ – красное смещение, $j(\nu_e)$ – излучательная способность покоящегося источника на единицу объема, $dl_{prop} = -k_{\alpha} u_e^{\alpha} d\lambda$ – дифференциал единицы длины в системе покоя излучателя, k^{μ} – четырехмерная скорость фотона, u_e^{μ} – четырехмерная скорость излучателя (в данном случае ЧД), λ – аффинный параметр вдоль траектории фотона γ . Индекс γ означает интегрирование по изотропным геодезическим. Красное смещение z определяется как

$$z = \frac{k_{\alpha} u_0^{\alpha}}{k_{\beta} u_e^{\beta}}, \quad (6)$$

где $u_0^\mu = (1, 0, 0, 0)$ — четырехмерная скорость удаленного наблюдателя на бесконечности.

Рассматривая простую сферически-симметричную модель аккреции, полагаем, что газ свободно падает в радиальном направлении в сторону центра ЧД с четырехмерной скоростью, определяемой как

$$u_e^t = \frac{1}{A(\hat{r})}, \quad u_e^r = -\sqrt{1-A(\hat{r})}, \quad u_e^\theta = u_e^\phi = 0. \quad (7)$$

Величина $k^\mu = \dot{x}^\mu$ была получена ранее в работе [34]. Далее используем следующее выражение:

$$\frac{k_r}{k_t} = \pm \sqrt{\frac{1}{A(\hat{r})} \left[\frac{1}{A(\hat{r})} - \frac{b^2}{\hat{r}^2} \right]}, \quad (8)$$

где знаки «+(-)» обозначают движение фотона от (к) массивного(му) объекта(у). Красное смещение, таким образом, дается следующим выражением [36]:

$$z = \frac{1}{\frac{1}{A(\hat{r})} - \frac{k_r}{k_t} \sqrt{1-A(\hat{r})}}. \quad (9)$$

Обозначим частоту излучения покоящегося источника как ν_* . Для расчета профиля интенсивности фона тени ЧД рассмотрим модель, в которой излучение монохроматично и имеет радиальный профиль $1/\hat{r}^2$:

$$j(\nu_e) \propto \frac{\delta(\nu_e - \nu_*)}{\hat{r}^2}, \quad (10)$$

где δ — дельта-функция Дирака. Дифференциал единицы длины в системе покоя излучателя определяется как

$$dl_{prop} = -k_\alpha u_e^\alpha d\lambda = -\frac{k^t}{zk^r} dr. \quad (11)$$

Интегрируя уравнение (5) по всем наблюдаемым частотам, получим наблюдаемую интенсивность фотонов в точке (X, Y) на небесной сфере [34]:

$$I_{obs}(X, Y) \propto \int_\gamma \frac{z^3 k^t dr}{r^2 k^r}. \quad (12)$$

Каждой точке на картинной плоскости (X, Y) соответствует прицельный параметр b , который равен $b^2 \propto X^2 + Y^2$. После численного интегрирования получаем профиль интенсивности фона тени ЧД.

Зависимость размера тени от q и c_3 была получена ранее в работе [28], где было показано, что, если размер тени больше, чем $4M$, для ее описания необходима одна дополнительная степень свободы (а именно, q). Следовательно, во втором порядке

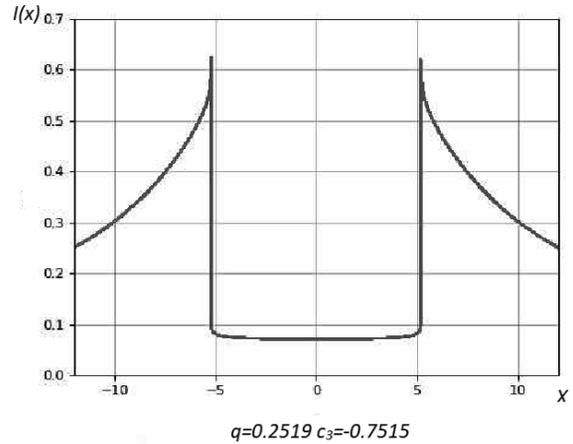


Рис. 1. Зависимость профиля интенсивности (I) тени в относительных единицах от расстояния от центра ЧД на плоскости изображения X (в единицах M). ЧД обладает дополнительными параметрами q и c_3 и генерирует тень такого же размера, как и ЧД Шварцшильда

разложения такая тень может быть параметризована метрикой Рейснера – Нордстрема. Далее, при изменении профиля интенсивности, необходимо учитывать поправки более высоких порядков возмущения.

Рассмотрим поправки третьего и последующего порядков. При этом станут допустимыми новые комбинации параметров, так как с увеличением порядка уравнений растет и число решений. Следовательно, для ограничения теоретической модели потребуется большее количество наблюдательных данных. Таким образом, в дополнение к размеру тени необходимо учитывать радиус последней устойчивой орбиты, сильное гравитационное линзирование яркого объекта вблизи ЧД и распределение интенсивности фона.

Для оценки необходимой точности наблюдений в первом приближении используем метрику Шварцшильда. На рис. 1 показаны результаты моделирования профиля интенсивности в области тени ЧД для параметров $q = 0.2519$, $c_3 = -0.7515$, при этом размер тени — такой же, как и у ЧД Шварцшильда. Рассмотрим отличие профиля интенсивности от случая ЧД Шварцшильда, нормированного на максимальную интенсивность ($I_{max} \approx 0.6$) (рис. 2). Как видно из рис. 2, эта разница возрастает при увеличении значений дополнительных параметров. Максимальное отличие от случая ЧД Шварцшильда достигается вблизи границы тени, затем, при уходе в бесконечность, оно исчезает. Разница внутри границы тени ЧД постоянна. Далее, из рис. 2 следует,

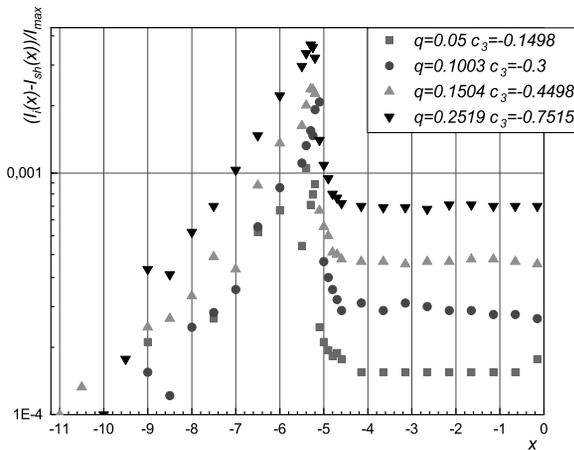


Рис. 2. Зависимость разности интенсивностей $(|I - I_{Sh}|/I_{max})$ ЧД с дополнительными параметрами q и c_3 и соответствующей шварцшильдовской от расстояния (X) от центра ЧД на плоскости изображения в единицах массы ЧД M

что, для экспериментальной фиксации данного различия, при обработке наблюдательных данных требуется достичь разрешения по интенсивности порядка 0.1% от максимального значения фона ЧД. Отдельно заметим, что каждая точка профиля интенсивности фона может считаться отдельной пробой потенциала ЧД.

3. ПОСТРОЕНИЕ ТЕНИ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ ПРИ $A(r) \neq -B^{-1}(r)$, ОБЩИЙ МЕТОД

В общем случае в сферически-симметричном пространстве-времени $A(r) \neq B^{-1}(r)$ (уравнение (1)), поэтому наше рассмотрение необходимо обобщить. Уравнения движения для такой метрики имеют вид

$$\left(\frac{d\hat{r}}{d\tau}\right)^2 + \frac{L^2}{B(\hat{r})\hat{r}^2} = \frac{E^2}{A(\hat{r})B(\hat{r})}, \quad (13)$$

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \frac{L}{\hat{r}^2}, \quad (14)$$

где E — энергия фотона, L — угловой момент пучка, τ — аффинный параметр. После подстановки (14) в (13) уравнение движения примет вид

$$u(r) = \left(\frac{d\hat{r}}{d\phi}\right)^2 = \frac{\hat{r}^4}{D^2 A(\hat{r})B(\hat{r})} - \frac{\hat{r}^2}{B(\hat{r})}, \quad (15)$$

где $D = L/E$ — прицельный параметр фотонного пучка. Аналогично симметричному случаю край те-

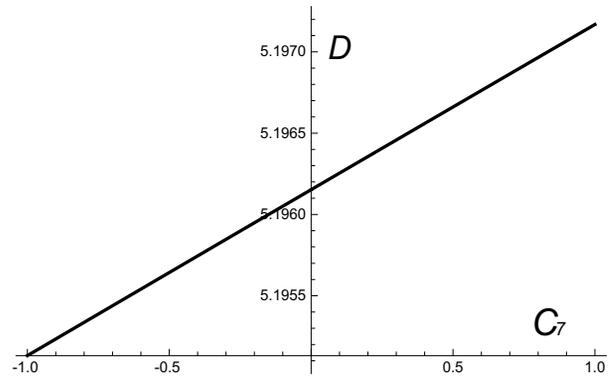


Рис. 3. Зависимость размера тени D от комбинации констант модели C_7 для теории Хорндески с инвариантом Гаусса – Бонне (в единицах массы ЧД M , $M = 1$)

ни соответствует переходу частиц света на неустойчивую фотонную орбиту. Система, описывающая этот переход, выглядит следующим образом:

$$u(r) = 0, \quad \frac{du(r)}{dr} = 0, \quad \frac{d^2u(r)}{dr^2} > 0. \quad (16)$$

Для нахождения размера тени необходимо найти максимальный корень уравнений (16). Для конкретных примеров проделаем это численно.

4. ТЕНЬ В РАЗЛИЧНЫХ ТЕОРИЯХ

4.1. Теория Хорндески

В данной работе рассматривается решение типа ЧД в теории Хорндески, расширенной линейно инвариантом Гаусса – Бонне [10]. Метрические функции записываются следующим образом:

$$A(r) = 1 - \frac{2M}{r} - \frac{2C_7}{7r^7}, \quad (17)$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M}{r} - \frac{C_7}{r^7}, \quad (18)$$

где C_7 — комбинация констант модели. В работе [10] рассматривалось только положительное значение C_7 . Однако условие, при котором горизонт ($A(r_h) = 0$) находится над поверхностью ($B(r) = 0$), выполняется только при $C_7 < 0$. При $C_7 > 0$ объект не является ЧД. Следовательно, разумно предположить, что метрика (6) справедлива только вне фотонной сферы. Вблизи горизонта требуется более точное разложение, при котором объект можно назвать ЧД. Результаты численного моделирования зависимости размера тени от метрических функций из уравнения (6) представлены на рис. 3. Размер тени для метрики (6) незначительно (менее 0.01% при

$|C_7| < 0.5$) отличается от шварцшильдовского даже при значениях C_7 , сравнимых с M . Таким образом, эти наблюдательные данные не исключают такую версию теории Хорндески.

4.2. Петлевая квантовая гравитация

Рассмотрим петлевую квантовую гравитацию с модифицированной метрикой Хейворда [15, 16]. Это решение описывает ЧД без сингулярности в центре, так называемую регулярную ЧД. Данное расширение включает временную задержку и однопетлевую квантовую поправку. Метрические функции для нее имеют вид

$$A(r) = \left(1 - \frac{2Mr^2}{r^3 + 2Ml^2}\right) \left(1 - \frac{\alpha\beta M}{\alpha r^3 + \beta M}\right), \quad (19)$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2Mr^2}{r^3 + 2Ml^2}, \quad (20)$$

где l — обозначение для центральной плотности энергии $3/8\pi l^2$, константа α представляет собой временную задержку между центром и бесконечностью, а β связана с однопетлевыми квантовыми поправками к ньютоновскому потенциалу. Эти параметры были ограничены в [15, 16] следующим образом: $0 \leq \alpha < 1$, $\beta_{max} = 41/(10\pi)$. В случае $l > \sqrt{16/27}M$ у объекта нет горизонта. После решения уравнений (16) получается явный вид зависимости (представленный на рис. 4) величины размера тени от l , α и β . Видно, что при увеличении l размер тени уменьшается. Наоборот, увеличение α и β приводит к увеличению размера тени. При $\beta \geq 0$ минимальный размер тени достигается при $l = \sqrt{16/27}M$, $\beta = \alpha = 0$ равном $4.92M$. Максимальный размер тени возникает при $l = 0$, $\beta = 41/(10\pi)$, $\alpha = 1$ и равен $5.32M$. Заметим, что тени такого размера могут быть описаны также пространством-временем Рейснера – Нордстрема. Таким образом, используя только размер тени, невозможно получить значения всех параметров без дополнительных наблюдательных данных.

4.3. Конформная гравитация

Еще один пример асимметричной метрики — конформная гравитация [11]. У этой модели имеется много расширений, например, модели с нелинейной реализацией симметрии [22, 23]. В нашей работе в качестве примера для расчета параметров теней используем метрику ЧД в новой массивной конформной гравитации [13]:

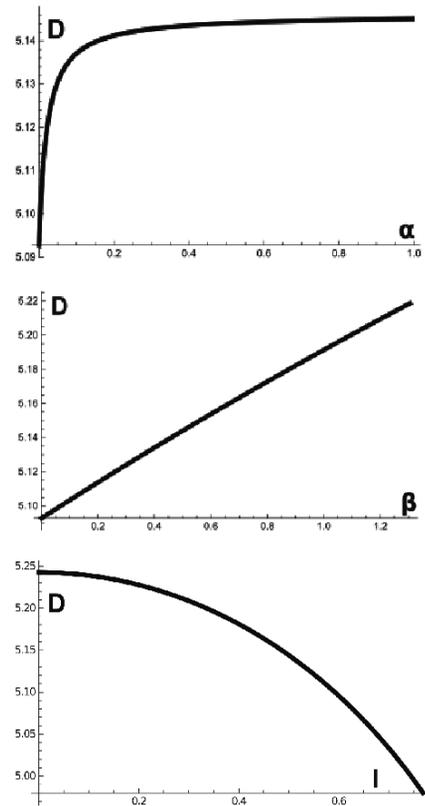


Рис. 4. Зависимости размера тени D от времени задержки α при $l = 0.5M$ и $\beta = 0.5$ (верхнее изображение), от однопетлевых квантовых поправок β при $l = 0.5M$, $\alpha = 0.5$ (центральное изображение), от центральной плотности энергии l при $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.5$ (нижнее изображение) для ЧД в модифицированной метрике Хейворда в единицах массы ЧД M , $M = 1$

$$A(r) = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q_s^2}{r^2} + \frac{Q_s^2 \left(-M^2 + Q_s^2 + \frac{6}{m_2^2}\right)}{3r^4} + \dots, \quad (21)$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q_s^2}{r^2} + \frac{2Q_s^2 \left(-M^2 + Q_s^2 + \frac{6}{m_2^2}\right)}{3r^4} + \dots, \quad (22)$$

где Q_s — скалярный заряд, m_2 — массивная мода со спином 2. Такая асимптотика справедлива вдали от горизонта. Поскольку ключевым моментом

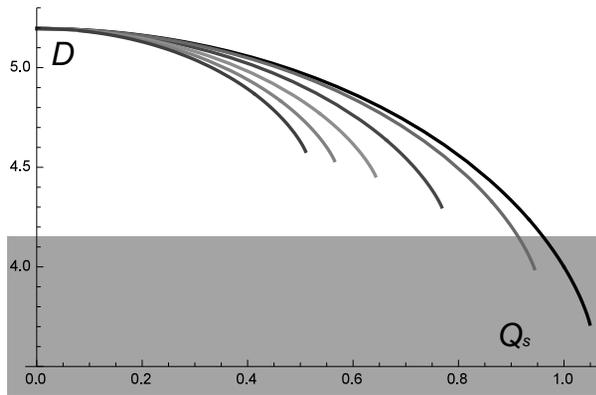


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости размера тени D от скалярного заряда Q_s для новой массивной конформной гравитации с различными значениями m_2 (в единицах M , $M = 1$). Черная линия соответствует $m_2 \rightarrow \infty$, красная — $m_2 = 2$, синяя — $m_2 = 1$, зеленая — $m_2 = 0.707$, оранжевая — $m_2 = 0.577$, фиолетовая — $m_2 = 0.5$

для нас является учет перехода фотонов на фотонную орбиту, применение этой асимптоты оправдано. На рис. 5 показаны зависимости размера тени от скалярного заряда Q_s для различных значений m_2 . Концы асимптот соответствуют описанному в работах [28, 32] эффекту: большие значения Q_s и $1/m_2$ вызывают отсутствие фотонной сферы. Уменьшение значения m_2 приводит к уменьшению размера тени. Для ограничения параметров модели требуются дополнительные данные наблюдений. Ограничения, приведенные в работе [30], исключают только большие значения Q_s и m_2 (рис. 5).

4.4. Модель Бамбелби

Сферически-симметричное решение модели Бамбелби имеет вид

$$A(r) = 1 - \frac{2M}{r}, \quad (23)$$

$$B(r) = \frac{1+l}{1-2M/r}, \quad (24)$$

где $l = \xi b^2$, ξ — константа связи (с размерностью масса -1), которая определяет неминимальное взаимодействие между гравитацией и полем Бамбелби, $b^2 = V^\mu B_\mu$.

Расчеты показывают, что размер тени не зависит от параметра l . На самом деле, положение фотонной сферы не зависит от метрической функции $B(r)$, если на рассматриваемом масштабе $B(r) > 0$ и нет других особых точек (регулярна над горизонтом). Рассмотрим функцию

$$\hat{u}(r) = u(r)B(r) = \frac{r^4}{D^2 A(r)} - r^2. \quad (25)$$

Она не зависит от метрической функции $B(r)$. Можно показать, что при выполнении условий существования фотонной сферы (16) выполняются и условия

$$\hat{u}(r) = 0, \frac{d\hat{u}(r)}{dr} = 0, \frac{d^2\hat{u}(r)}{d^2r} > 0. \quad (26)$$

При $B(r) > 0$ автоматически выполняется первое условие системы (16), так как на фотонной сфере $u(r) = 0$,

$$\hat{u}'(r) = u'(r)B(r) + u(r)B'(r). \quad (27)$$

Но на фотонной сфере $u(r) = 0$ и $u'(r) = 0$. В рассматриваемом случае $B(r) > 0$ и нет других особых точек. Следовательно, выполняется и второе условие. Аналогично и с третьим условием. Следовательно, положение фотонной сферы также не зависит от метрической функции $B(r)$. При условии, что на масштабах фотонной сферы $B(r) > 0$ и нет других особых точек, для вычисления радиуса тени вместо системы (16) можно использовать (26) для упрощения вычислений.

Интересно рассмотреть альтернативное обобщение, которое можно записать как

$$A(r) = (1+l)\bar{A}(r), \quad (28)$$

$$B(r) = \frac{1}{\bar{B}(r)}. \quad (29)$$

Метрика Шварцшильда использована в качестве первого приближения для $\bar{B}(r)$ и $\bar{A}(r)$ и обобщения метрики следующего вида:

$$A(r) = (1+l) \left(1 - \frac{2M}{r} \right), \quad (30)$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M}{r}. \quad (31)$$

Влияние параметра l на размер тени ЧД показано на рис. 6. Для приближения $\bar{B}(r)$ и $\bar{A}(r)$ зависимость имеет такой же вид. Установив пределы на основании результатов наблюдения M87 [30] в приближении Шварцшильда, получим, что $-0.3 < l < 0.45$.

4.5. $f(Q)$ -гравитация

$f(Q)$ -гравитация — это симметричная теория телепараллелизма (STTEGR) с ненулевым скаляром неметричности Q [6]. Для этой модели было получено несколько сферически-симметричных решений.

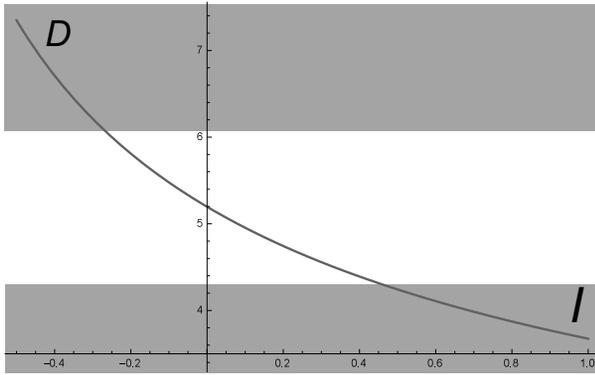


Рис. 6. Зависимость размера тени ЧД D от параметра l в альтернативном обобщении метрики Бамбелби в приближении Шварцшильда (в единицах массы ЧД M , $M = 1$)

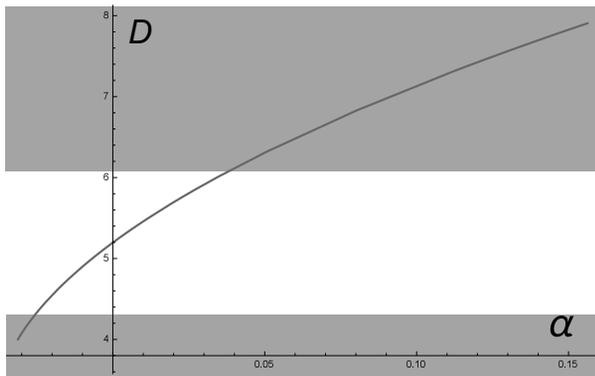


Рис. 7. Зависимость размера тени ЧД D от параметра α в $f(Q)$ -гравитации в единицах массы ЧД M_{ren}

Нами выбрано приближенное решение, расширяющее ОТО (I^+). Компоненты метрики имеют вид [6]

$$A(r) = 1 - \frac{2M_{ren}}{r} - \alpha \frac{32}{r^2}, \quad (32)$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M_{ren}}{r} - \alpha \frac{96}{r^2}, \quad (33)$$

$$2M_{ren} = 2M - \alpha \left(\frac{32}{3M} + c_1 \right), \quad (34)$$

где a — параметр разложения, c_1 — постоянная интегрирования, M_{ren} — ренормированная масса. Заметим, что для удаленного наблюдателя нет разницы между перенормированной и обычной массой Шварцшильда. Далее будем использовать M_{ren} , нормируя все величины на нее. Влияние a на размер тени ЧД показано на рис. 7. Были установлены следующие ограничения на параметры на основании наблюдений M87 [30]: $-0.025 < \alpha < 0.04$.

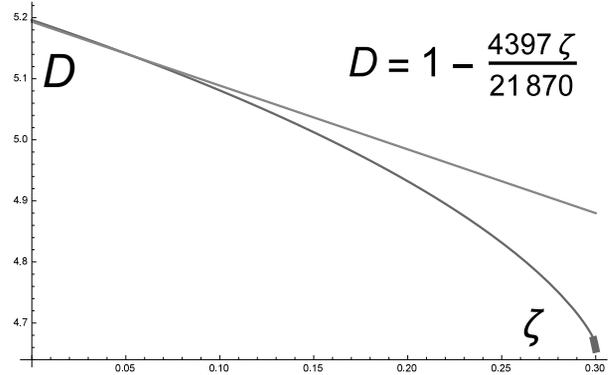


Рис. 8. Нижняя кривая представляет собой зависимость размера тени ЧД D от параметра ζ в скалярной гравитации Гаусса–Бонне (в единицах массы ЧД M , $M = 1$). Верхняя линия — ее первое приближение

4.6. Скалярная гравитация Гаусса – Бонне

Статическое сферически-симметричное решение в скалярной гравитации Гаусса–Бонне было получено аналитически в [17] и имеет вид

$$A = -f(r) \left[1 + \frac{\zeta}{3r^3 f(r)} h(r) \right], \quad (35)$$

$$B = \frac{1}{f(r)} \left[1 - \frac{\zeta}{r^3 f(r)} k(r) \right], \quad (36)$$

где

$$h(r) = 1 + \frac{26}{r} + \frac{66}{5r^2} + \frac{96}{5r^3} - \frac{80}{r^4}, \quad (37)$$

$$k(r) = 1 + \frac{1}{r} + \frac{52}{3r^2} + \frac{2}{r^3} + \frac{16}{5r^4} - \frac{368}{3r^5}, \quad (38)$$

$$f(r) = 1 - \frac{2}{r}, \quad (39)$$

ζ — параметр связи.

В работе [37] зависимости радиуса фотонной сферы и радиуса тени ЧД от ζ вычислены в первом порядке относительно константы связи:

$$r_{ph}^{sGB} = 3 \left[1 - \frac{961}{2430} \zeta \right], \quad (40)$$

$$b_c^{sGB} = \sqrt{27} \left[1 - \frac{4397\zeta}{21870} \right]. \quad (41)$$

Нами получено численное решение с более высокой точностью (рис. 8). При $\zeta > 0.3$ фотонная сфера отсутствует. В работах [28, 32] было показано, что такой объект не имеет тени.

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Разрешение первых изображений черных дыр в проекте Event Horizon составляло примерно полови-

ну размера объекта [4]. Дальнейшее совершенствование наземного оборудования позволило бы увеличить разрешение лишь в несколько раз (не на порядки!). Кроме того, уже достигнут максимально возможный размер наземной сети радиотелескопов. Как было продемонстрировано ранее в статьях [28, 29] и расширено в предыдущих разделах настоящей работы, ограничение для реальных моделей расширенной гравитации требует повышения точности на несколько порядков (не раз!). Поэтому следующим шагом могла бы стать сеть из орбитальных телескопов. Кроме того, измерение размера тени без дополнительных данных будет достаточным только для моделей, основанных на метрике Рейснера – Нордстрема. Для теорий с более сложной структурой пространства-времени необходимы дополнительные виды наблюдения. При рассмотрении последней устойчивой орбиты, сильного гравитационного линзирования ярких звезд [28] и распределения интенсивности теневого фона (как показано выше) минимальное разрешение должно быть порядка 0.001 размера тени. Эта оценка справедлива, если дополнительные коэффициенты согласованы с массой черной дыры. Поэтому более перспективным представляется изучение тени от быстровращающегося объекта. При тех же значениях дополнительных коэффициентов необходимое разрешение составит около 0.01 размера тени [29]. Таким образом, появляется дополнительная причина развивать теорию теней на основании метрик вращающихся черных дыр для развития моделей расширенной гравитации в астрофизике.

Нами также были рассчитаны зависимости размера тени черной дыры от параметров модели в различных расширенных теориях гравитации и установлены ограничения на них с использованием данных наблюдений M87. Результаты для модели Хорндески с инвариантом Гаусса – Бонне, петлевой квантовой гравитации, скалярных моделей Бамбелби и Гаусса – Бонне полностью согласуются с наблюдениями M87*. Вернее сказать, предсказания этих моделей не выходят за ограничения, установленные имеющимися данными наблюдений. Как нами показано, в конформной гравитации должны быть исключены большие значения m_2 и Q_s (например, если $m_2 = 2$, то $Q_s < 0.9$). В STEGR $f(Q)$ -гравитации наблюдения M87* ограничивают значения α следующим образом: $-0.025 < \alpha < 0.04$. Для альтернативного обобщения метрики Бамбелби с приближением Шварцшильда $-0.3 < l < 0.45$. Эти результаты демонстрируют тот максимум, которого можно достичь без учета вращения черной дыры.

Подход без учета вращения ЧД справедлив, когда скорость вращения ЧД мала и ею можно пренебречь. При учете вращения количество проб потенциала черной дыры, необходимых для проверки, увеличивается. «В качестве компенсации» требования к точности наблюдений снижаются на порядок.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фундаментальные и прикладные космические исследования».

ЛИТЕРАТУРА

1. J. A. Orosz, J. E. McClintock et al., *Astrophys. J.* **742**, 84 (2011).
2. B. Abbott et al., *Phys. Rev. D* **93**, 12 (2016).
3. B. Abbott et al., *Amer. Phys. Soc.* **119**, 16 (2017).
4. K. Akiyama et al., *Astrophys. J.* **875**, L5 (2019).
5. S. Capozziello and M. De Laurentis, *Phys. Rep.* **509**, 167 (2011).
6. F. D'Ambrosio, S. D. B. Fell et al., *Phys. Rev. D* **105**, 2 (2021).
7. T. P. Sotiriou and V. Faraoni, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 451 (2010).
8. A. De Felice and S. Tsujikawa, *Living Rev. Rel.* **13**, 3 (2010).
9. C. Charmousis, E. J. Copeland et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 5 (2012).
10. E. Babichev, C. Charmousis et al., *JCAP* **4**, 27 (2017).
11. C. Pfeifer and S. Schuster, *Universe* **7**(5), 153 (2021).
12. P. D. Mannheim, *Found. Phys.* **42**, 388 (2012).
13. Y. S. Myung and D.-C. Zou, *Phys. Rev. D* **100**, 064057 (2019).
14. P. A. M. Casares, arXiv:1808.01252.
15. T. De Lorenzo, C. Pacilio et al., *Gen. Rel. Grav.* **47**(4), 41 (2015).
16. J.-P. Hu, L.-L. Shi et al., *Astrophys. Space Sci.* **363**(10), 199 (2018).
17. N. Yunes and L. C. Stein, *Phys. Rev. D* **83**, 104002 (2011).

18. G. W. Horndeski, *Int. J. Theor. Phys.* **10**, 363 (1974).
19. T. Kobayashi, *Rep. Progr. Phys.* **82**, 086901 (2019).
20. Y. Ageeva, P. Petrov, and V. Rubakov, *Phys. Rev. D* **104**, 063530 (2021).
21. A. Barrau, T. Cailleteau et al., *Class. Quant. Grav.* **31**, 053001 (2014).
22. A. B. Arbuzov and B. N. Latosh, *Universe* **6**, 12 (2020).
23. S. Alexeyev and D. Krichevskiy, *Phys. Part. Nucl. Lett.* **18**, 128 (2021).
24. S. Alexeyev, D. Krichevskiy, and B. Latosh, *Universe* **7**, 501 (2021).
25. R. Casana, A. Cavalcante et al., *Phys. Rev. D* **97**, 104001 (2018).
26. F. D'Ambrosio, S. D. B. Fell et al., *Phys. Rev. D* **105**, 024042 (2022).
27. H. C. D. Lima, Jr., et al., *Phys. Rev. D* **8**, 084040 (2021).
28. С. О. Алексеев, Б. Н. Латош, В. А. Прокопов, Е. Д. Емцова, *ЖЭТФ* **157**, 796 (2019).
29. С. О. Алексеев, В. А. Прокопов, *ЖЭТФ* **155**, 847 (2020).
30. P. Kocherlakota, L. Rezzolla et al., *Phys. Rev. D* **103**, 104047 (2021).
31. N. Dadhich, R. Maartens et al., *Phys. Lett. B* **487**, 1 (2000).
32. A. F. Zakharov, *Phys. Rev. D* **90**, 062007 (2014).
33. D. Pugliese, H. Quevedo, and R. Ruffini, *Phys. Rev. D* **83**, 024021 (2011).
34. C. Bambi, *Phys. Rev. D* **87**, 107501 (2013).
35. N. I. Shakura and R. A. Sunyaev, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **175**, 613 (1976).
36. R. Shaikh, P. Kocherlakota et al., *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **482**, 52 (2018).
37. A. M. Bauer, A. Cárdenas-Avendaño et al., *Astrophys. J.* **925**(2), 119 (2022).

КОМПЛЕКСЫ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА ЛИНЕЙНЫХ И ЛЕСТНИЧНЫХ СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ УЗКОЗОННЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

*А. Ю. Сосорев**

*Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова Российской академии наук
117997, Москва, Россия
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 декабря 2021 г.,
после переработки 13 декабря 2021 г.
Принята к публикации 14 декабря 2021 г.

Комплексы с переносом заряда (КПЗ) малых π -сопряженных органических молекул изучаются достаточно давно в качестве органических полупроводников и проводников. Однако лишь недавно было обнаружено формирование комплексов между двумя π -сопряженными макромолекулами — сопряженными полимерами. В настоящей работе теоретически рассмотрено формирование таких КПЗ и выявлены их особенности по сравнению с низкомолекулярными КПЗ. В частности, показано, что запрещенная зона (оптическая щель) КПЗ сопряженных полимеров может быть значительно уже, а степень переноса заряда — больше, чем у их низкомолекулярных аналогов (даже при равных энергиях высшей заполненной молекулярной орбитали донора и низшей вакантной молекулярной орбитали акцептора), что было объяснено делокализацией заряда вдоль цепи полимера. Особенно явно это проявляется в случае лестничных полимеров, делокализация заряда в которых имеет квазидвумерный характер. Расчеты методом теории функционала плотности для КПЗ фрагментов двух лестничных сопряженных полимеров подтверждают теоретические предположения, подчеркивая перспективность использования таких комплексов в устройствах органической электроники. На основе полученных результатов предложено создание и исследование КПЗ нового типа — с использованием структур более высокой размерности, например, двумерных листов или трехмерных проводящих решеток.

DOI: 10.31857/S0044451022070124
EDN: EEXTTH

1. ВВЕДЕНИЕ

Органическая электроника позволяет создавать легкие, гибкие, дешевые электронные устройства и тем самым заменить традиционную кремниевую электронику в ряде областей применения. Одним из перспективных типов органических проводников и полупроводников являются комплексы с переносом заряда (КПЗ). Эти комплексы состоят из молекул двух типов: доноров и акцепторов электронной плотности. При формировании КПЗ часть электронной плотности в основном электронном состо-

янии переходит с донора на акцептор, а волновая функция КПЗ является суперпозицией волновых функций донора и акцептора. Степень переноса заряда, а также электронные и оптические свойства комплекса — проводимость заряда, поглощение света и люминесценция — определяются комбинацией донора и акцептора. В частности, в рамках широко распространенной и хорошо описывающей комплексы с переносом заряда низкомолекулярных соединений модели Малликена [1] эти свойства зависят от уровней энергии высшей заполненной молекулярной орбитали (НОМО) донора, $E_{H,d}$, и энергии низшей вакантной молекулярной орбитали (ЛУМО) акцептора, $E_{L,a}$. Это позволяет варьировать свойства КПЗ подбором составляющих его компонентов; в результате, КПЗ могут проявлять свойства изоляторов, полупроводников, проводников или сверхпро-

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

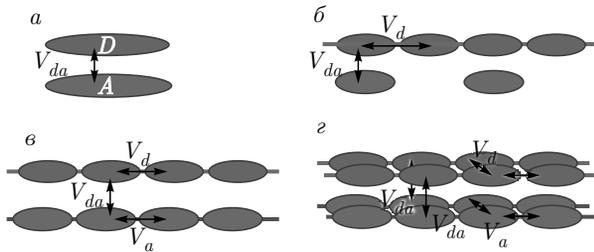


Рис. 1. КТЗ между двумя низкомолекулярными соединениями (а), между линейным сопряженным полимером и низкомолекулярным соединением (б), между двумя линейными сопряженными полимерами (в) и между двумя лестничными (квазидвумерными) сопряженными полимерами (г). Красным обозначены мономеры донора, синим — мономеры акцептора. Стрелками обозначены интегралы переноса между мономерами

водников [2, 3]. Образование КТЗ может существенно расширять спектр поглощения и сдвигать люминесценцию смеси в красную и инфракрасную области, что обуславливает перспективность использования КТЗ в органических солнечных фотоэлементах и светоизлучающих устройствах [4, 5]. Ширина оптической щели E_g в рамках модели Малликена также связана с разностью $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$. Наиболее сильно свойства КТЗ выражены, если разность $E_{L,a}$ и $E_{H,d}$ составляет менее 0.5 эВ: такие КТЗ показывают узкую оптическую щель и высокую проводимость заряда (если донор и акцептор фазово разделены и образуют отдельные стопки) [2].

КТЗ, в которых и донор, и акцептор являются низкомолекулярными π -сопряженными органическими соединениями (например, TTF:TCNQ, BEDT-TTF:TCNQ, см. рис. 1а), относительно хорошо изучены. В отличие от них, комплексы, в которых донор или акцептор являются сопряженным (полупроводниковым) полимером — высокомолекулярным соединением с протяженной π -сопряженной электронной системой, вдоль которой возможна делокализация и транспорт электронов и дырок (см. рис. 1б) — исследованы крайне мало [5]. Вместе с тем, выявлено, что такие КТЗ с высокомолекулярным донором имеют особенности, не характерные для низкомолекулярных аналогов. В частности, комплексообразование имеет пороговый характер: концентрация КТЗ ничтожно мала при концентрации низкомолекулярного акцептора ниже некоторого порогового значения, но после превышения последней этого значения начинается резкий рост концентрации КТЗ [6–8]. Кроме того, пленки смесей с КТЗ обнаруживают кристалличность, в отличие от

аморфных пленок чистого донора [9, 10].

Формирование КТЗ в смеси двух сопряженных полимеров (рис. 1в) было обнаружено совсем недавно в работе [11]. Авторы показали, что такие КТЗ формируются в смесях сильного полимерного донора (в частности, P(g42T-T) с $E_{H,d} \approx -4.3$ эВ) и сильного полимерного акцептора (поли(бензоимидазобензофенантролин)а BBL с $E_{L,a} \approx -4.15$ эВ). Комплексообразование в таких смесях приводит к увеличению проводимости донорно-акцепторного интерфейса на 5–6 порядков, которая достигает 2 См/см при комнатной температуре (ср. с проводимостью в большинстве низкомолекулярных КТЗ — до 4 См/см [2]); объемная проводимость гетеропереходов на основе этих полимеров составляет около 0.2 См/см. Эффективный транспорт заряда в КТЗ двух сопряженных полимеров можно объяснить тем, что в них как донор, так и акцептор обладают протяженной электронной системой, по которой возможна делокализация заряда. Помимо вышеупомянутой работы, нам известно только о двух работах, в которых КТЗ двух полупроводниковых полимеров исследованы с помощью теории функционала плотности (DFT) [12, 13]; экспериментальных работ по ним более не проводилось. Теории, описывающей особенности формирования КТЗ двух сопряженных полимеров и их свойства, не было построено. Таким образом, сведения о КТЗ двух сопряженных полимеров крайне скудны. В то же время, такие КТЗ могут обладать уникальными свойствами, превосходящими их низкомолекулярные аналоги и позволяющими создавать на основе этих материалов эффективные устройства органической электроники. Значительная делокализация заряда как в донорной, так и в акцепторной части может привести к формированию высокой проводимости заряда металлического типа и, возможно, сверхпроводимости. Более того, делокализация заряда может привести к эффективному разделению зарядов при фотовозбуждении [14], что позволит создавать эффективные солнечные батареи, фотодиоды и фототранзисторы. Наконец, формирование КТЗ может увеличивать смешиваемость полимеров, позволяя создавать гетеропереходы с оптимальным фазовым разделением. Таким образом, изучение условий формирования и свойств КТЗ двух полупроводниковых полимеров важно как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения.

Стоит отметить, что в исследованных в работе [11] КТЗ двух сопряженных полимеров основной транспорт заряда наблюдался по цепи акцептора, в то время как донорный полимер проводил

заряд значительно слабее. Это может быть связано с тем, что в качестве акцептора использовался так называемый лестничный (ladder-type) сопряженный полимер, состоящий из последовательности конденсированных циклов, соединенных между собой не менее чем через два общих атома, в то время как в качестве донора использовался линейный полимер, связи между звеньями которого осуществлялись через один атом. Действительно, лестничные полимеры являются значительно более жесткими [15] и, следовательно, меньше подвержены негативному влиянию электрон-фононного взаимодействия на транспорт заряда [16]. Кроме того, в пределах цепи лестничного полимера транспорт заряда можно считать квазидвумерным, в то время как в цепи линейного полимера он одномерный. Поскольку размерность делокализации и транспорта заряда имеет существенное влияние на эффективность последнего [16, 17], более высокая размерность транспорта заряда в лестничном полимере должна приводить к более высокой подвижности и проводимости заряда по сравнению с линейными полимерами. В связи с этим, представляется целесообразным исследовать КПЗ двух сопряженных лестничных полимеров, см. рис. 1з. Такие КПЗ до настоящего времени не изучались.

В настоящей работе формирование КПЗ между двумя сопряженными полимерами исследуется теоретически и с помощью квантово-химического моделирования. В частности, с помощью модифицированной модели Малликена исследуется зависимость свойств комплекса — ширины запрещенной зоны (оптической щели), степени переноса заряда и энергии связи комплекса — от числа звеньев, а также от типа (линейный или лестничный) донора и акцептора. Показано, что полимерные КПЗ, особенно комплексы двух лестничных полимеров, обладают более узкой оптической щелью, чем их низкомолекулярные аналоги с такими же уровнями энергии граничных орбиталей $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$, что предполагает более высокую проводимость и указывает на потенциальную перспективность использования в органических оптоэлектронных устройствах. Впервые проведено квантово-химическое моделирование КПЗ двух лестничных сопряженных полимеров с помощью метода теории функционала плотности (DFT), которое подкрепило теоретические результаты. Полученные данные позволяют предложить, что КПЗ двух сопряженных, в особенности лестничных, полимеров являются перспективными материалами для органической (опто)электроники.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для теоретического описания формирования КПЗ между полимерными донором и акцептором использовалась (модифицированная) модель Малликена [1]. Рассматривались цепи донорного и акцепторного полимеров (олигомеров) длиной n звеньев, причем каждый мономер (звено) донора находился в контакте (взаимодействии) с одним мономером акцептора (см. рис. 1б,з). Волновая функция КПЗ была представлена как линейная комбинация волновых функций мономеров донора и акцептора:

$$\sum_{i=1}^n c_i \phi_i + \sum_{i=1}^n d_i \theta_i,$$

где ϕ_i — волновые функции мономеров донора, θ_i — волновые функции мономеров акцептора, а c_i и d_i — соответствующие коэффициенты. Учитывалось взаимодействие между соседними мономерами, а также между находящимися в контакте мономерами донора и акцептора (матричные элементы взаимодействия обозначены на рис. 1б,з). В первую очередь, были найдены уровни энергии КПЗ W_i , для чего необходимо было найти собственные значения соответствующей матрицы (для наглядности рассмотрен случай, когда донор и акцептор состоят из двух мономеров, $n = 2$):

$$A = \begin{pmatrix} E_{H,d}^0 & V_d & V_{da} & 0 \\ V_d & E_{H,d}^0 & 0 & V_{da} \\ V_{da} & 0 & E_{L,a}^0 & V_a \\ 0 & V_{da} & V_a & E_{L,a}^0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $E_{H,d}^0$ — энергия НОМО мономера донора, $E_{L,a}^0$ — энергия LUMO мономера акцептора, V_d — матричный элемент взаимодействия НОМО соседних мономеров донора, V_a — матричный элемент взаимодействия LUMO соседних мономеров акцептора, V_{da} — матричный элемент взаимодействия НОМО и LUMO, находящихся в контакте мономеров соответственно донора и акцептора. Из полученных таким образом значений уровней энергии НОМО и LUMO КПЗ, W_H и W_L , была рассчитана ширина запрещенной зоны

$$E_g = W_L - W_H,$$

степень переноса заряда

$$\rho = \sum_{i=1}^n d_i^2$$

и энергия связи КПЗ:

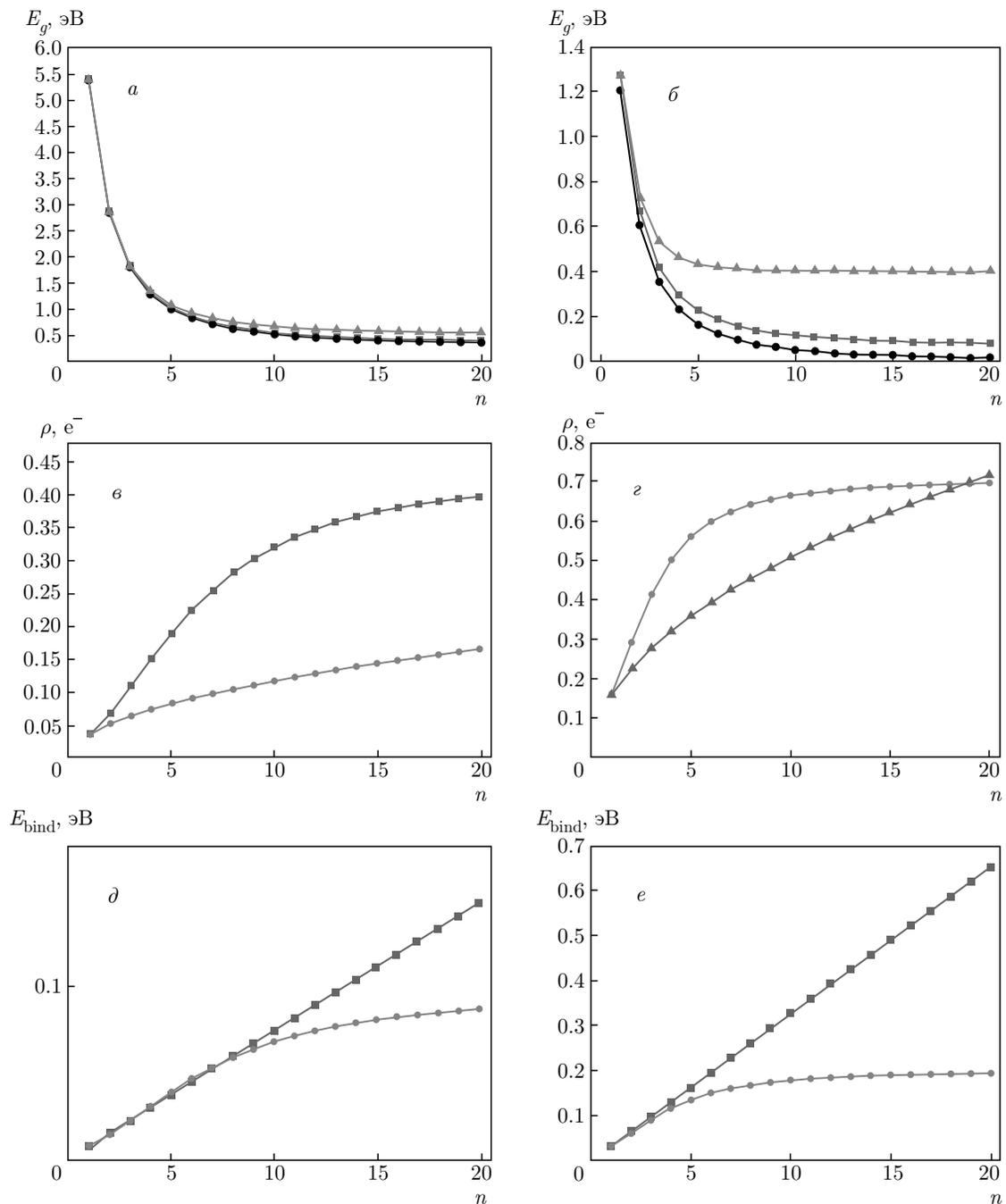


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны (*a, б*), степени переноса заряда (*в, г*) и энергии связи (*д, е*) КПЗ двух линейных сопряженных полимеров от числа мономерных звеньев в каждом из них (красная кривая), а также значения соответствующих величин для КПЗ низкомолекулярных соединений с такими же значениями $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$ (синяя кривая). Левые и правые графики различаются параметрами моделирования, соответствующими более слабому КПЗ широкозонных полимеров типа поли-парафениленвинилена (слева $E_{L,a}^0 - E_{H,d}^0 = 5.4$ эВ [18]; $V_d = V_a = 1.27$ эВ [18]) и более сильному КПЗ узкозонных полимеров (справа $E_{L,a}^0 - E_{H,d}^0 = 1.2$ эВ; $V_d = V_a = 0.3$ эВ; малые значения V_d, V_a соответствуют протяженным мономерным звеньям). Значения $V_{da} = 0.2$ эВ соответствуют типичным расчетным значениям для КПЗ ароматических соединений, подобных мономерным звеньям сопряженных полимеров [19]. На панелях (*a, б*) черным цветом показана разность уровней $E_{L,a} - E_{H,d}$ в зависимости от n

$$E_{da} = \left(\sum_{i=1}^n W_i \right)_{V_{da}=0} - \sum_{i=1}^n W_i,$$

где в первой сумме рассматриваются уровни энергии комплекса донора и акцептора с нулевыми V_{da} .

Полученные зависимости E_g , ρ и E_{da} КПЗ двух сопряженных полимеров от n представлены на рис. 2 для двух наборов значений параметров. Для сравнения приведены аналогичные зависимости для низкомолекулярных КПЗ ($n = 1$) с такими же энергиями $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$. На рис. 2 видно, что при увеличении n сужается E_g , а ρ и E_{da} увеличиваются. Это легко объясняется уменьшением потенциала ионизации донора (понижением уровня НОМО, $E_{H,d}$) и увеличением сродства к электрону акцептора (повышением уровня ЛУМО, $E_{L,a}$) при увеличении длины сопряжения упомянутых молекулы; разность $E_{L,a} - E_{H,d}$ в зависимости от n показана на рис. 2а,б черным цветом. Данный результат достаточно тривиален и проявляется в различных моделях, в том числе в моделях Хюккеля и Куна. Однако для низкомолекулярных КПЗ зависимости $E_g(n)$, $\rho(n)$ и $E_{da}(n)$ довольно быстро выходят на насыщение, в то время как для полимерных КПЗ E_g продолжает убывать, а ρ и E_{da} — возрастать. Таким образом, при равных $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$ ширина запрещенной зоны для полимерных КПЗ оказывается меньше, чем для низкомолекулярных; этот результат является новым. При малых значениях $E_{L,a} - E_{H,d}$ (сильные донор и акцептор) E_g в полимерных КПЗ стремится к нулю (см. рис. 2б). Более узкая ширина запрещенной зоны предполагает более низкую энергию активации, а значит, и более высокую проводимость заряда. Это согласуется с экспериментальными данными работы [11], согласно которым первые КПЗ сильных полимерных донора и акцептора показывают проводимость заряда при комнатной температуре и нормальном атмосферном давлении до 2 См/см, что сравнимо с лучшими значениями проводимости для низкомолекулярных КПЗ [2]. Интересно, что хотя степень переноса заряда в расчете на одно звено уменьшается, полный перенос заряда увеличивается с увеличением длины цепи (см. рис. 2в,г). В результате, полный перенесенный заряд в основном состоянии для полимерных КПЗ может превышать таковой для низкомолекулярных КПЗ. Высокая степень переноса заряда (до более чем 1 электрона на цепь) также согласуется с результатами работы [11], в которой наблюдались поляроны на цепях полимеров (т.е. наблюдался полный перенос заряда). Наконец, E_{da} возрастает почти линейно с n (см. рис. 2д,е), что свидетельствует о стабильно-

сти КПЗ сопряженных полимеров и позволяет предположить, что формирование таких комплексов может помочь преодолеть фазовое разделение в смесях двух сопряженных полимеров. Таким образом, полученные результаты показывают, что свойства КПЗ двух сопряженных полимеров отличаются от свойств их низкомолекулярных аналогов. Наиболее вероятной причиной такого отличия является делокализация заряда по цепям акцептора и донора.

Как было отмечено выше, есть основания предполагать, что КПЗ двух лестничных (квазидвумерных) сопряженных полимеров могут по электронно-транспортным свойствам превосходить аналоги на основе линейных сопряженных полимеров. Для того чтобы показать это, а также с целью выявить влияние размерности делокализации заряда на характеристики КПЗ, в рамках описанной выше модели Малликена были рассчитаны E_g , ρ и E_{da} для КПЗ двух лестничных сопряженных полимеров. Полученные зависимости представлены на рис. 3 и сопоставлены с таковыми для линейных сопряженных полимеров. На этих рисунках видно, что запрещенная зона с увеличением длины полимера сужается быстрее для лестничных (квазидвумерных) сопряженных полимеров, чем для их линейных (одномерных) аналогов при одинаковых значениях $E_{H,d}^0$ и $E_{L,a}^0$ (рис. 3а). Это опять же объясняется повышением уровня $E_{H,d}$ и понижением уровня $E_{L,a}$, т.е. уменьшение разности $E_{L,a} - E_{H,d}$, за счет увеличения делокализации заряда. Таким образом, в КПЗ на основе лестничных структур можно получить узкую запрещенную зону и значительный перенос заряда даже для более слабых донорных и акцепторных мономеров. Более того, даже при равных $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$ запрещенная зона КПЗ лестничных сопряженных полимеров оказывается уже, чем у КПЗ линейных полимеров (см. рис. 3б). Степень переноса заряда в КПЗ лестничных полимеров при этом выше, чем в КПЗ линейных сопряженных полимеров с такими же $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$ (см. рис. 3в). Это подтверждает высказанную выше гипотезу о прямом вкладе делокализации заряда в сужение оптической щели КПЗ и увеличение степени переноса заряда при увеличении длины сопряжения донора и акцептора, помимо косвенного влияния через уменьшение разности $E_{L,a} - E_{H,d}$, а также подчеркивает роль размерности делокализации в выраженности этого вклада; этот результат является новым. Стоит отметить, что лестничные полимеры должны обладать большей жесткостью, а значит, более слабым электрон-фононным взаимодействием, что обуславливает высокую подвижность заряда и может

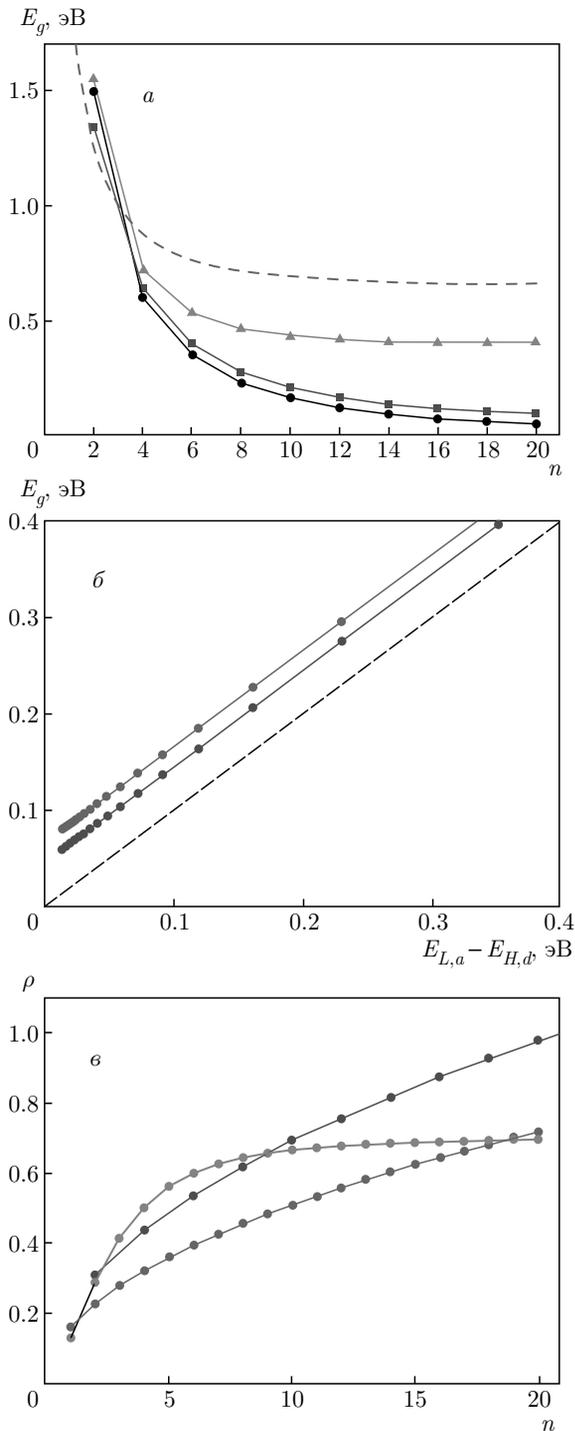


Рис. 3. а) Зависимость ширины запрещенной зоны КПЗ двух лестничных сопряженных полимеров (фиолетовая кривая) и разности энергии $E_{L,a} - E_{H,d}$ для этих полимеров от числа мономерных звеньев в каждом из них (черная кривая), а также ширина запрещенной зоны низкомолекулярного КПЗ с такими же $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$ (синяя кривая) и ширина запрещенной зоны КПЗ линейных полимеров с такими же $E_{H,d}^0$ и $E_{L,a}^0$ (пунктирная кривая). б) Зависимость ширины запрещенной зоны КПЗ двух лестничных (фиолетовая кривая) и двух линейных (красная кривая) сопряженных полимеров от величины $E_{L,a} - E_{H,d}$. е) Зависимость степени переноса заряда в КПЗ двух лестничных сопряженных полимеров от числа мономерных звеньев в каждом из них (фиолетовая кривая), а также в КПЗ двух линейных сопряженных полимеров (красная кривая) с такими же значениями $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$.

ряда была обусловлена именно BVL. Наконец, можно ожидать, что два лестничных полимера проявят лучшую смешиваемость (а значит, более тонкое фазовое разделение и больший суммарный перенос заряда), чем лестничный полимер с линейным.

Для того чтобы показать принципиальную возможность создания КПЗ на основе двух лестничных сопряженных полимеров, с помощью метода теории функционала плотности (DFT) был промоделирован комплекс двух фрагментов таких полимеров — донорного поли-(1,6-дигидропиразино[2,3g]хиноксалин-2,3,8-триил-7-(2H)-илиден-7,8-диметилиден)а (PQL [15], 4 мономерных звена) и акцепторного BVL (2 звена). Химическая структура этих полимеров представлена на рис. 4а,б. Использовался гибридный функционал B3LYP и базисный набор 6-31g(d,p), расчет проводился в программе GAMESS [20, 21]. Расчеты проводились в вакууме. На рис. 4в представлены уровни энергии кон-шэмовских НОМО донора, LUMO акцептора, НОМО и LUMO образующегося между ними КПЗ, а также распределение электронной плотности на этих орбиталях. На этом рисунке видно, что уровни энергии НОМО и LUMO КПЗ определяются уровнями НОМО донора и LUMO акцептора, в согласии с моделью Малликена. Как и ожидалось, НОМО КПЗ локализовано в основном на доноре и практически совпадает с НОМО последнего, и лишь незначительная часть электронной плотности перенесена на акцептор. Заметим, что распределение электронной плотности НОМО-КПЗ на акцепторе повторяет распределение таковой на LUMO акцептора, что подчеркивает квантово-механическое смешивание НОМО донора и LUMO акцептора. LUMO КПЗ локализована

приводить к высокой проводимости заряда в КПЗ. Квазидвумерный транспорт в лестничных полимерах также должен быть более устойчив к дефектам и зарядовым ловушкам, поскольку носители заряда могут «обойти» дефект, не покидая цепи полимера. Действительно, в исследованных в работе [11] КПЗ лестничного полимера BVL и ряда линейных сопряженных полимеров основная проводимость за-

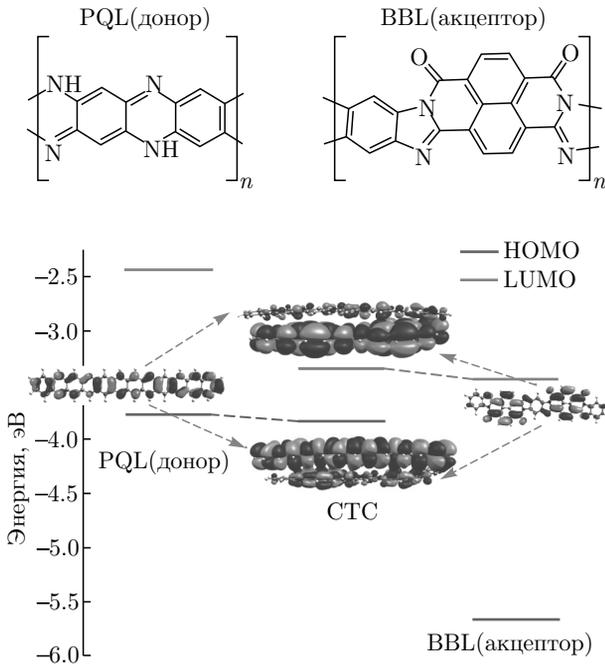


Рис. 4. Формирование КПЗ между лестничными полимерами PQL и BBL: *a, б* — химическая структура PQL и BBL; *в* — уровни энергии и вид граничных молекулярных орбиталей донора, акцептора и КПЗ

в основном на акцепторе и лишь незначительно перенесена на донор. Ширина запрещенной зоны (оптической щели) больше, чем разность $E_{H,d}$ и $E_{L,a}$, что находится в согласии с данными моделирования (рис. 3) и связано с наличием электронного взаимодействия (V_{da}) между донором и акцептором. Стоит отметить, что расчетная E_g составляет около 0.5 эВ, что должно приводить к высокой проводимости [2]. Увеличение длины донора и акцептора будет приводить к уменьшению разности $E_{L,a} - E_{H,d}$, и, следовательно, E_g (см. рис. 3), что должно приводить к еще большему увеличению проводимости.

Считая, что степень переноса заряда может достигать одного электрона на 20 звеньев полимера (см. рис. 3в), и принимая объем, занимаемый этими звеньями, равным 7 нм^3 (исходя из полученных в результате моделирования геометрических параметров молекул), можно получить оценку концентрации носителей заряда около $1.5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, что согласно проведенному в работе [11] моделированию соответствуют объемной проводимости заряда выше $\sigma = 2 \text{ См/см}$. Это согласуется с оценкой, получаемой из соотношения $\sigma = e\mu n$: для подвижности зарядов $\mu \approx 0.1 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, опубликованной для BBL [22], ожидаемая проводимость КПЗ составляет

около 2.5 См/см ; для сопряженных полимеров с рекордной подвижностью $\mu > 1 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [23] ожидаемая проводимость соответствующих КПЗ превышает 20 См/см . Таким образом, между двумя рассмотренными полимерами лестничного типа может формироваться КПЗ с весьма привлекательными для органической электроники свойствами.

Полученные результаты позволяют предположить, что КПЗ, в которых донором и акцептором являются не молекулы, а структуры большей размерности, например, двумерные листы дихалькогенидов металлов, а также вложенные друг в друга трехмерные органические или металлоорганические проводящие решетки (conductive organic framework, metal-organic framework) — могут оказаться еще более перспективными материалами для органической электроники. Технология создания гетероструктур двумерных материалов, например, MoS_2 и графена, известна [24, 25]; более того, в ФЛ некоторых из них наблюдались возбужденные состояния с переносом заряда между слоями [26]. Однако вопрос о переносе заряда в основном электронном состоянии в таких структурах (т. е. формировании КПЗ), насколько нам известно, не рассматривался. Трехмерные проводящие структуры на основе лестничных полимеров, в том числе рассмотренного в настоящей статье BBL, были недавно представлены в работе [27]. Хотя гетероструктуры на основе трехмерных решеток до настоящего времени не были реализованы вследствие отсутствия подходов к формированию одной проводящей решетки внутри другой, однако, можно предположить, что такие подходы будут разработаны в будущем. На основе полученных нами результатов (рис. 3) установлено, что высокая размерность делокализации заряда (2D или 3D) может приводить к образованию КПЗ с очень узкой запрещенной зоной, — уже, чем в низкомолекулярных КПЗ или КПЗ сопряженных полимеров, — что предполагает более высокую проводимость заряда. Таким образом, создание и исследование КПЗ двумерных и трехмерных материалов представляет значительный интерес для органической электроники.

3. ВЫВОДЫ

В рамках модели Малликена теоретически рассмотрено формирование КПЗ между двумя сопряженными полимерами. Показано, что запрещенная зона (оптическая щель) таких КПЗ может быть значительно уже, а степень переноса

заряда и энергия связи — больше, чем у их низкомолекулярных аналогов с такими же энергиями НОМО донора и LUMO акцептора. Таким образом, делокализация заряда вдоль цепи полимера прямо способствует сужению запрещенной зоны и увеличению транспорта заряда, а не только косвенно через сближение уровней энергии вышеупомянутых орбиталей. Рассмотрены два типа полимеров — линейные и лестничные, и показано, что более явно особенности комплексообразования проявляются в последних, где делокализация заряда имеет квазидвумерный характер. Расчеты методом теории функционала плотности для КПЗ фрагментов двух лестничных сопряженных полимеров подтвердили теоретические предположения. Таким образом, КПЗ сопряженных полимеров, в первую очередь лестничных, являются перспективными материалами для органической электроники. Более того, в свете полученных данных предложено создание и исследование КПЗ нового типа на основе структур более высокой размерности, например, двумерных листов или трехмерных проводящих решеток. Ожидается, что полученные результаты будут способствовать созданию новых органических полупроводников и проводников и развитию органической (опто)электроники.

Финансирование. Работа осуществлена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (Стипендия Президента № СП-6048.2021.1).

ЛИТЕРАТУРА

1. R. S. Mulliken, *J. Amer. Chem. Soc.* **74**, 811 (1952).
2. G. Saito and Y. Yoshida, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **80**, 1 (2007).
3. H. Jiang, P. Hu, J. Ye, K. K. Zhang, Y. Long, W. Hu, and C. Kloc, *J. Mater. Chem. C* **6**, 1884 (2018).
4. A. A. Bakulin, D. S. Martyanov, D. Y. Paraschuk, M. S. Pshenichnikov, and P. H. M. van Loosdrecht, *J. Phys. Chem. B* **112**, 13730 (2008).
5. A. Yu. Sosorev and D. Y. Paraschuk, *Isr. J. Chem.* **54**, 650 (2014).
6. O. D. Parashchuk, T. V. Laptinskaya, and D. Y. Paraschuk, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 3775 (2011).
7. A. Yu. Sosorev and S. Zapunidi, *J. Phys. Chem. B* **117**, 10913 (2013).
8. A. Yu. Sosorev, O. D. Parashchuk, S. A. Zapunidi, G. S. Kashtanov, I. V. Golovnin, S. Kommanaboyina, I. F. Perepichka, and D. Yu. Paraschuk, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 4684 (2016).
9. O. D. Parashchuk, S. Grigorian, E. E. Levin, V. V. Bruevich, K. Bukunov, I. V. Golovnin, T. Ditt-rich, K. A. Dembo, V. V. Volkov, and D. Y. Paraschuk, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 1298 (2013).
10. D. T. Duong, C. Wang, E. Antono, M. F. Toney, and A. Salleo, *Org. Electron.* **14**, 1330 (2013).
11. Xu, K., Sun, H., Ruoko, TP. et al., *Nature Mater.* **19**, 738 (2020).
12. A. A. Bakulin, A. Rao, V. G. Pavelyev, P. H. M. van Loosdrecht, M. S. Pshenichnikov, D. Niedzialek, J. Cornil, D. Beljonne, and R. H. Friend, *Science* **335**, 1340 (2012).
13. S. Haseena and M. K. Ravva, *J. Electron. Mater.* **50**, 1621 (2021).
14. A. Yu. Sosorev, D. Yu. Godovsky, and D. Yu. Paraschuk, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3658 (2018).
15. J. Lee, A. J. Kalin, T. Yuan, M. Al-Hashimi, and L. Fang, *Chem. Sci.* **8**, 2503 (2017).
16. A. Yu. Sosorev, *Mater. Des.* **192**, 108730 (2020).
17. A. Yu. Sosorev, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 25478 (2017).
18. M. Yu. Lavrentiev, W. Barford, S. J. Martin, H. Daly, and R. J. Bursill, *Phys. Rev. B* **59**, 9987 (1999).
19. L. Zhu, Y. Yi, A. Fonari, N. S. Corbin, V. Coropceanu, and J.-L. Brédas, *J. Phys. Chem. C* **118**, 14150 (2014).
20. M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, and J. A. Montgomery, Jr. *J. Comput. Chem.* **14**, 1347 (1993).
21. M. S. Gordon and M. W. Schmidt, *Advances in Electronic Structure Theory: GAMESS a Decade Later. In Theory and Applications of Computational Chemistry: the First Forty Years*, ed. by C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, & Scuseria, G.E. Elsevier, Amsterdam (2005), p. 1167.
22. A. Babel and A. Jenekhe, *J. Amer. Chem. Soc.* **125**(45), 13656 (2003).

- 23.** S. Fratini, M. Nikolka, A. Salleo, G. Schweicher, and H. Sirringhaus, *Nature Mater.* **19**, 491 (2020).
- 24.** T. Mueller and E. Malic, *npj 2D Mater Appl.* **2**, 29 (2018).
- 25.** Y. Garcia-Basabe, A. R. Rocha, F. C. Vicentin, C. E. P. Villegas, R. Nascimento, E. C. Romani, E. C. de Oliveira, G. J. M. Fechine, S. Li, G. Eda, and D. G. Larrude, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 29954 (2017).
- 26.** H. Fang, C. Battaglia, C. Carraro, S. Nemsak, B. Ozdol, J. S. Kang, H. A. Bechtel, S. B. Desai, F. Kronast, A. A. Unal, G. Conti, C. Conlon, G. K. Palsson, M. C. Martin, A. M. Minor, C. S. Fadley, E. Yablonovitch, R. Maboudian, and A. Javey, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **111**, 6198 (2014).
- 27.** S.-H. Shin, H.-J. Noh, Y.-H. Kin, Y.-K. Im, J. Mahmood, and J.-B. Baek, *Polym. Chem.* **10**, 4185 (2019).

АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В КВАНТОВЫХ ЯМАХ GaAs–AlGaAs, ЛЕГИРОВАННЫХ НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ, ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР

Н. В. Агринская , Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур*

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

Поступила в редакцию 23 декабря 2021 г.,
после переработки 8 февраля 2022 г.
Принята к публикации 10 февраля 2022 г.

Приведены результаты экспериментов, указывающих на существование при низких температурах аномального эффекта Холла, связанного с ферромагнитным упорядочением спинов локализованных дырок в легированных мелкими акцепторами (Be) квантовых ямах GaAs–AlGaAs при концентрации примеси близкой к переходу металл–изолятор. В изоляторных образцах экспериментально наблюдалась аномальная температурная зависимость холловской подвижности, аномальное поведение эффекта Холла, магнитосопротивления и магнитного момента в зависимости от магнитного поля и температуры. С другой стороны, в образцах на металлической стороне перехода наблюдалось поведение, характерное для слабой локализации. Аномальный магнитотранспорт объясняется возникновением ферромагнитного перехода или спинового стекла, которое, в свою очередь, связано с непрямым обменом спинов сильно локализованных дырок через делокализованные состояния в области центра примесной зоны.

DOI: 10.31857/S0044451022070136
EDN: EFAORC

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение длительного времени ведется работа над созданием систем, которые обладали бы одновременно полупроводниковыми и магнитными свойствами. Как правило, для того чтобы придать полупроводнику магнитные свойства, в него вносят магнитные примеси. Так, например, легируя GaAs-структуры примесью Mn, можно добиться ферромагнетизма с температурой Кюри вплоть до 100 К [1,2]. Тем не менее, даже если в полупроводнике имеются только обычные (немагнитные) примеси, в нем есть нескомпенсированные спины, так как у электрона, локализованного на доноре, или у дырки, локализованной на акцепторе, есть спин. Возникает вопрос, не может ли магнитно-упорядочение состояние (ферромагнетизм или спиновое стекло) появляться в системе заполненных доноров и акцепторов. В том случае, если концентрация легирующей

примеси N и длина локализации a достаточно велики, $N > N_c = 0.15/a^2$ для 2D-случая, примесные состояния сливаются с краем зоны проводимости или валентной зоны и локализованные электроны в системе, фактически, исчезают, происходит переход металл–изолятор (МИ). В противоположном случае малого легирования, $N < N_c$, локализованные электроны связаны антиферромагнитным взаимодействием, экспоненциально убывающим на расстояниях порядка a .

Тем не менее, не существует однозначных предсказаний о том, каким будет магнитное состояние электронов на примесях вблизи перехода металл–диэлектрик. Строгой теории для этого случае не существует, и особый интерес представляют экспериментальные исследования. В частности, в работе [3] были получены результаты, интерпретированные как появление ферромагнитной фазы в объемных образцах Ge : As, близких к переходу МИ.

В наших предыдущих работах [4, 5] были приведены результаты экспериментов на легированных бериллием квантовых ямах GaAs–AlGaAs, где концентрация акцепторов была близка к критической N_c ; при низких температурах ($T < 10$ К) наблю-

* E-mail: nina.agrins@mail.ioffe.ru

далась медленная релаксация сопротивления после приложения магнитного поля, изотропное отрицательное магнитосопротивление (МС) и гистерезис кривой намагниченности. Изотропный характер наблюдавшегося магнитосопротивления означает, что оно имеет спиновую природу (так как орбитальные степени свободы в 2D-структурах приводят к выраженной анизотропии МС в плоскости структуры и в перпендикулярном направлении). Комбинация спиновых эффектов и беспорядка (характерного для легированных полупроводников) привлекла наше внимание к концепции спинового стекла для легированных квантовых ям GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона [5].

Виртуальный переход Андерсона соответствует появлению делокализованных состояний в центре примесной зоны при концентрациях примесей, заметно меньших тех, что обычно соответствуют переходу Мотта – Андерсона. Делокализованные состояния возникают из-за аномально малого разброса энергий примесей, связанного с малым количеством компенсирующей примеси и удалением компенсирующей примеси из квантовых ям в барьеры. Из-за этого для части состояний в примесной зоне оказывается выполнен критерий перехода Андерсона. Важно при этом, что система по-прежнему находится на диэлектрической стороне перехода Мотта. Таким образом, делокализованные состояния однократно заполнены, и проводимость по ним возможна только в результате активационных процессов. Экспериментально виртуальный переход Андерсона проявляется в активационной температурной зависимости проводимости с малой энергией активации (на порядок меньшей чем энергия активации примеси в зону) и возможности ударной ионизации носителей в делокализованную часть примесной зоны, приводящей к пробою при низких температурах при измерении проводимости в режиме постоянного тока [6].

Таким образом, приведенные эксперименты [4, 5] были косвенным доказательством существования магнитно-упорядоченного состояния (ферромагнетизм или спиновое стекло) в системе заполненных акцепторов (немагнитные примеси). Такое состояние возникало вблизи от перехода МИ с изоляторной стороны. Однако для подтверждения данного утверждения необходимо также подробное исследование эффекта Холла в структурах с обеих сторон перехода МИ.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

В этом разделе мы приводим результаты измерений зависимости сопротивления и эффекта Холла от температуры и магнитного поля для образцов с квантовыми ямами GaAs–Al_{0.3}Ga_{0.7}As, выращенных методом молекулярной эпитаксии. Измерения магнитосопротивления и эффекта Холла проводились непосредственно после охлаждения образца в нулевом поле до нужной температуры при достаточно большой скорости развертки поля 5 Тл в минуту, для того чтобы избежать вклада медленных релаксационных явлений [5]. Намагниченность исследовалась на установке PPMS-14 с использованием вибрационного магнитометра при скорости развертки 0.3 Тл в минуту.

Образцы содержат 5 квантовых ям GaAs размером 15 нм и разделяющие их барьеры Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 100 нм. При этом акцепторами (Be) легировался центр квантовых ям (5 нм). В работе приведены результаты измерений для трех образцов. Исходя из степени легирования и транспортных данных образец 1 находился на металлической стороне перехода МИ ($N_A = 2.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$), а образцы 2 и 3 — на изоляторной стороне ($N_A = 8\text{--}10 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$). Компенсирующая примесь отсутствовала в образце 2. В образце 3 донорная примесь (Si) была внесена в узкую область шириной 5 нм в центре барьеров в концентрации на порядок меньше концентрации Be. Соответственно, степень компенсации донорными примесями была мала, $N_d/N_a \sim 0.1$. Существенно, что компенсирующие примеси располагаются вне двумерного проводящего слоя, что уменьшает энергетический беспорядок в примесной зоне и способствует виртуальному переходу Андерсона [7, 9].

При такой концентрации примеси и слабой компенсации в образцах 2 и 3 формируется узкая примесная зона, в центре которой располагается область делокализованных состояний [6]. В образце 1 примесная зона сливается с валентной зоной, что соответствует переходу Мотта – Андерсона.

При низких температурах ход сопротивления $R(T)$ (рис. 1) для образцов 2 и 3 следовал закону Аррениуса с малой энергией активации $\varepsilon_4 \approx 2 \text{ мэВ}$. Это соответствует активации носителей с уровня Ферми в делокализованные состояния в примесной зоне. При больших температурах энергия активации увеличивается до $\varepsilon_1 \approx 22 \text{ мэВ}$, что соответствует активации дырок в валентную зону. При температурах $T \approx 2.5 \text{ К}$ (образец 2) и $T \approx 4 \text{ К}$ (образец 3) в режиме постоянного тока 1 нА наблюдался пробой, характерный для систем с виртуальным переходом

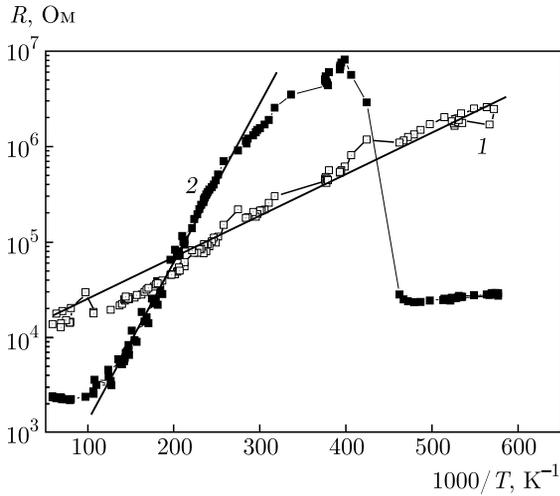


Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления образцов 1 и 2, снятые в режиме постоянного тока 1 нА

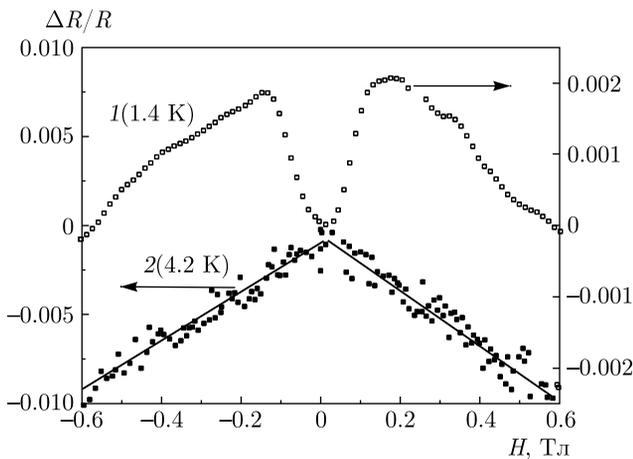


Рис. 2. Магнитосопротивление образца 1 при температуре 1.4 К и образца 2 при температуре 4.2 К в поле, перпендикулярном плоскости образца

Андерсона и связанный с ударной ионизацией носителей в делокализованную часть примесной зоны. Пробой наблюдался в образцах 2 и 3 при поле около (1–1.2) В/см, эта величина не зависит от тока и определяется только свойствами образца [8].

С другой стороны, в более сильно легированном образце 1 наблюдается существенно более слабый наклон $R(T) \varepsilon_4 \approx 0.8$ мэВ и отсутствуют явления пробоя.

На рис. 2 приведены результаты измерения магнитосопротивления в слабых магнитных полях, перпендикулярных плоскости образца для образцов 1 и 2, в образце 3 картина МС была аналогичной картине для образца 2. В образцах 2 и 3 при достаточно

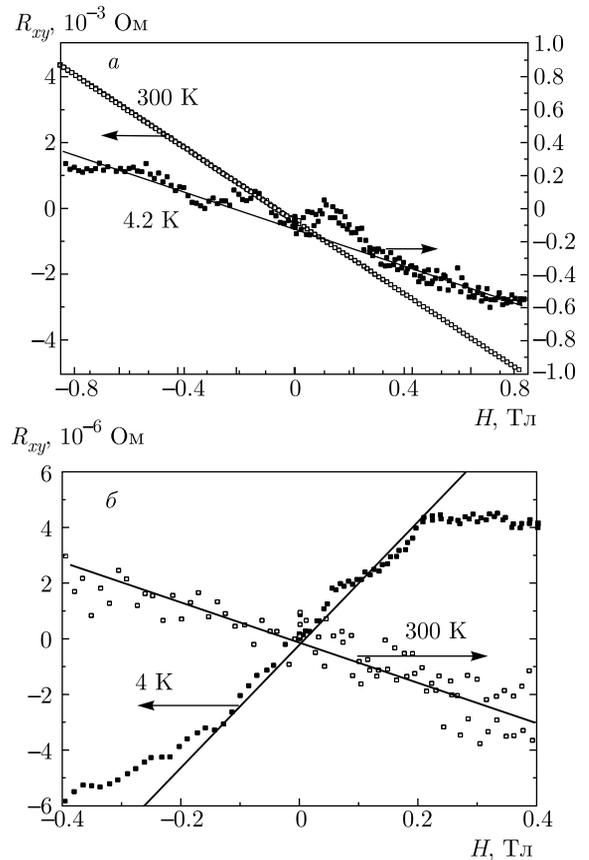


Рис. 3. Зависимость холловского сопротивления от магнитного поля в образцах типа 1 (а) и 2 (б) для двух температур

больших полях не менее 2 Тл магнитосопротивление положительно и сильно анизотропно, что естественно для двумерных структур с квантовыми ямами. Однако при малых полях МС оказывается изотропным, отрицательным и линейным по полю, что видно на рис. 2. Весь ход магнитосопротивления был подробно описан в работе [4]. Изотропный характер МС в двумерной структуре может указывать на его спиновую природу.

С другой стороны, в образце 1 в малых полях наблюдалось положительное МС, связанное с антилокализацией, и небольшое отрицательное МС, связанное со слабой локализацией, рис. 2. Такое поведение характерно для двумерного электронного газа [9].

Таким образом, поведение МС, а также температурные зависимости сопротивления (рис. 1) указывают, что образцы 2 и 3 находятся на изоляторной стороне перехода, а образец 1 — на металлической.

Измерения эффекта Холла для этих двух типов образцов также обнаруживают существенное разли-

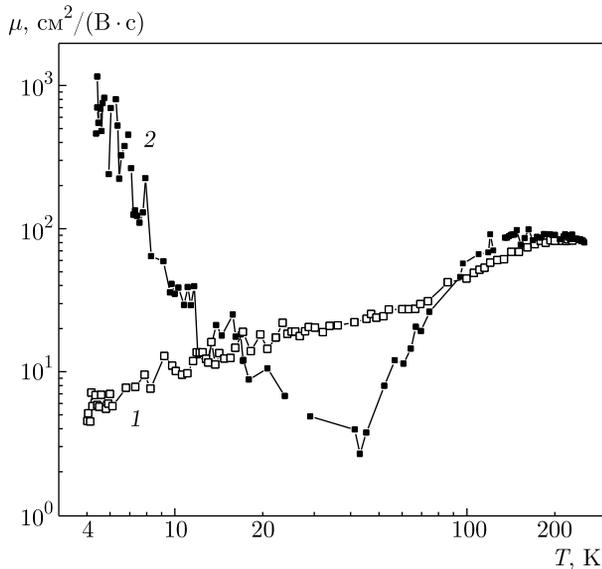


Рис. 4. Температурный ход абсолютной величины холловской подвижности образцов 1 и 2

чие, см. рис. 3.

В сильно легированном образце 1 знак эффекта Холла одинаков для двух температур и соответствует дырочному типу носителей, отличается лишь наклоном, связанный с уменьшением концентрации носителей при низких температурах. В более слабо легированных образцах 2 и 3 при низких температурах наклон ЭДС Холла меняет знак в полях менее 0.4 Тл и далее выходит на насыщение. Похожее поведение наблюдалось ранее в пленках Ge, легированных магнитной примесью Mn [10], и объяснялось вкладом аномального эффекта Холла, вызванным спонтанной намагнитизацией (M) образца $R_h \approx R_s M$.

На рис. 4 показана температурная зависимость абсолютной величины холловской подвижности образцов 1 и 2, снятая в очень слабом магнитном поле 0.5 кЭ. При высоких температурах преобладает рассеяние на фононах, далее при понижении температуры до 50 К рассеяние на примесях. В образце 1 подвижность плавно убывает с понижением температуры до 4 К. В образце 2 при понижении температуры наблюдается аномальное поведение подвижности, при $T \sim 40$ К она уменьшается почти до нуля и далее при $T < 40$ К резко растет и при 4 К превышает комнатную. Такое поведение подвижности мы в свое время объясняли смешанной проводимостью [11], которая возникает в результате одновременного участия в проводимости разрешенных состояний валентной зоны и делокализованных примесных состояний. С дальнейшим понижением температуры в проводимости участвуют только состояния примес-

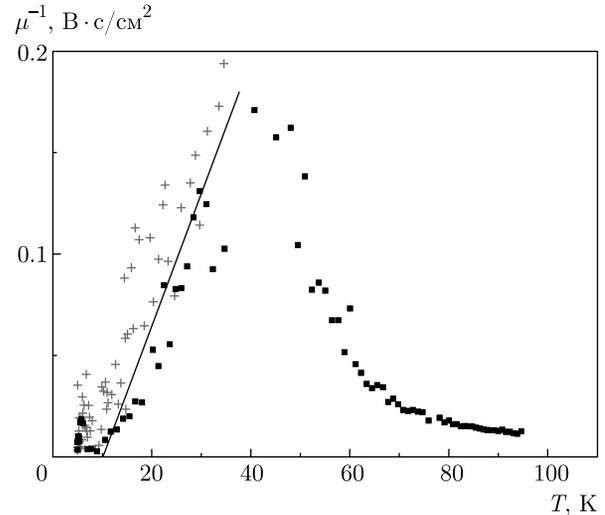


Рис. 5. Температурная зависимость обратной холловской подвижности образцов 2 и 3

ной зоны. При $T < 10$ К эффект Холла становится аномальным, и холловская подвижность не соответствует реальной, а определяется намагнитченностью.

Таким образом, при низких температурах и в слабых магнитных полях аномальная составляющая эффекта Холла, связанная с намагнитченностью M , превалирует и даже приводит к смене знака, при этом составляющей, связанной с обычным эффектом Холла можно пренебречь. В этом случае $R_h \approx \approx R_s M$, где R_s — сопротивление образца.

Холловская подвижность в этих условиях $\mu \approx \approx R_h/R_s \approx M$ пропорциональна намагнитченности. Для металлических ферромагнетиков зависимость намагнитченности от температуры следует закону Кюри–Вейса $M = \chi B$, где $\chi \approx C/(T - T_c)$ — магнитная восприимчивость, T_c — критическая температура ферромагнитного перехода. Несмотря на то, что наша система не является чистым ферромагнетиком, а скорее имеет свойства спинового стекла, закон Кюри–Вейса достаточно хорошо описывает температурную зависимость аномального эффекта Холла. На рис. 5 построена температурная зависимость обратной холловской подвижности для двух образцов 2 и 3. Видно, что она похожа на температурную зависимость намагнитченности, описанную законом Кюри–Вейса, с температурой отсечки $T_c \approx 10-15$ К. Наличие низкотемпературной спонтанной намагнитченности может также объяснять и линейное изотропное отрицательное МС, которое наблюдается при температуре ниже 15 К, при более высокой температуре магнитосопротивление становится анизотропным и положительным [4].

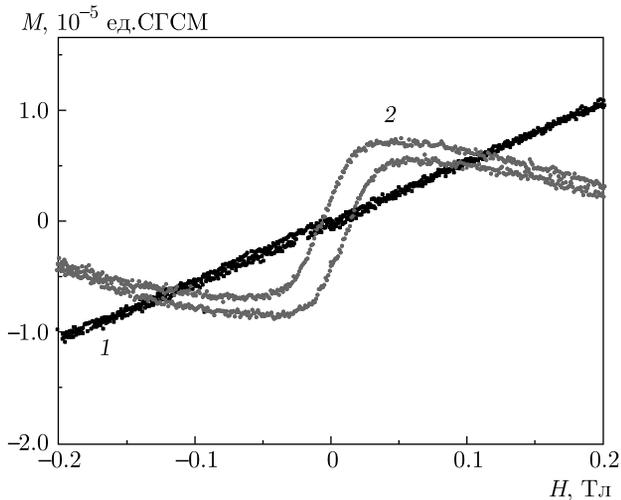


Рис. 6. Зависимость намагниченности образца 3 от поля при медленной развертке магнитного поля при $T = 5$ К, 1 — подложка, 2 — образец 3

Мы также провели непосредственное измерение намагниченности для образца 3 при температуре 5 К (рис. 6). Общий диамагнитный ход намагниченности связан со свойствами подложки. Тем не менее, на его фоне явно виден вклад от дырок в квантовых ямах, у которого наблюдается гистерезис в полях менее 0.2 Тл, связанный, вероятно, с переходом в упорядоченное спиновое состояние.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Транспортные и магнитные свойства, наблюдаемые в наших образцах, очень похожи на свойства изолирующих магнитных пленок $\text{Ge}_{(1-x)}\text{Mn}_x$, в частности, при $T < T_c$ наблюдается отрицательное почти линейное по полю магнитосопротивление, смена знака эффекта Холла и гистерезис кривой намагниченности. Эти явления объясняются с помощью модели ферромагнитных спиновых кластеров, связанных обменным взаимодействием через заряженные носители, движущиеся в примесной зоне Mn [10] или с помощью теории гранулированных ферромагнитных систем [12], однако полного понимания связи транспортных и магнитных свойств в $\text{Ge}_{(1-x)}\text{Mn}_x$ до сих пор не существует.

Часто поведение этих систем связывают с образованием спинового стекла (СС), которое обусловлено наличием в магнетике хаотически расположенных магнитных моментов и конкурирующих обменных взаимодействий, имеющих различные знаки, величины и пространственную зависимость. Ха-

рактерные свойства СС — неравновесность (зависимость физических свойств от времени) и наличие гистерезиса, т. е. зависимость физических свойств от магнитной и термической предыстории. Подобные свойства мы наблюдали в нашей системе: медленные релаксации сопротивления после приложения магнитного поля и гистерезис кривых намагниченности [5].

Ферромагнетизм в примесной зоне предполагает механизм ферромагнитного связывания через косвенный или двойной обмен. Виртуальный переход Андерсона в примесной зоне может приводить к такому косвенному обменному взаимодействию, не характерному ни для диэлектрических, ни для металлических систем. В работе [5] нами был предложен механизм такого взаимодействия. Оно связано с комбинацией сильно локализованных состояний и однократно заполненных делокализованных состояний в центре примесной зоны. Мы предполагали, что дырки в делокализованных состояниях остаются парамагнитными. Тем не менее они могут участвовать в обменном взаимодействии между спинами локализованных дырок. Такой обмен оказывается ферромагнитным или носит случайный знак в зависимости от деталей волновых функций делокализованных дырок. При низких температурах он приводит к спиновому упорядочению. При этом случайная спиновая энергия, связанная с обменом, оказывается частью энергии беспорядка, приводящей к локализации. Намагничивание образца приводит к изменению энергии беспорядка. Важно, что вблизи перехода металл–диэлектрик даже небольшое изменение беспорядка приводит к сильному изменению проводимости, что объясняет влияние магнитного поля на транспортные свойства (в том числе отрицательное магнитосопротивление).

Данная интерпретация магнитных и транспортных свойств относится только к изолирующим образцам с узкой примесной зоной, в которой произошел переход Андерсона. В более сильно легированных образцах такой отделенной примесной зоны нет, примесные состояния в основном делокализованы, и не наблюдается аномального поведения магнитных и транспортных свойств.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы приводим результаты экспериментов, указывающих на существование спинового стекла в легированных акцепторами (бериллием) квантовых ямах GaAs–AlGaAs. Данное состояние возникает при низких температурах ($T < 10$ К) и связано

с ферромагнитным упорядочением локализованных спинов (спиновое стекло) при концентрации примеси близкой к переходу металл–изолятор с изоляторной стороны перехода. Экспериментально при $T < 10$ К наблюдались изотропное отрицательное магнитосопротивление, аномальный эффект Холла с изменением знака, аномальная температурная зависимость холловской подвижности и гистерезис кривой намагниченности. В предыдущей работе мы наблюдали также медленные релаксации сопротивления образца после приложения магнитного поля [5]. Возникновение спинового стекла связано с непрямым обменом спинов сильно локализованных дырок через делокализованные состояния в области центра примесной зоны, в которой произошел виртуальный переход Андерсона.

Благодарности. Авторы признательны А. В. Шумилину за полезное обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Dietl and H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
2. N. V. Agrinskaya, V. A. Berezovets, A. Bouravlev, and V. I. Kozub, *Sol. State Comm.* **183**, 2730 (2014).
3. А. И. Вейнгер, А. Г. Забродский, Т. Л. Макарова, Т. В. Тиснек, С. И. Голощанов, П. В. Семенихин, *ЖЭТФ* **143**, 918 (2013).
4. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, N. Yu. Mikhailin, and D. V. Shamshur, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 477 (2017).
5. А. В. Шумилин, В. И. Козуб, Н. В. Агринская, Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур, *ЖЭТФ* **159**, 915 (2021).
6. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, Yu. M. Galperin, and D. V. Shamshur, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 395216 (2008).
7. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, Д. С. Полоскин, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 202 (2007).
8. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, N. Yu. Mikhailin, and D. V. Shamshur, *Sol. State Commun.* **260**, 6 (2017).
9. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, A. V. Chernyaev, D. V. Shamshur, and A. A. Zuzin, *Phys. Rev. B* **72**, 085337 (2005).
10. A. P. Li, J. F. Wendelken, J. Shen, L. C. Feldman, J. R. Thompson, and H. H. Weitering, *Phys. Rev. B* **72**, 195205 (2005).
11. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, Д. С. Полоскин, *Физика и техника полупроводников* **44**, 491 (2010).
12. I.-S. Yu, M. Jamet, A. Marty, T. Devillers, A. Barski, C. Beignй, P. Bayle-Guillemaud, and J. Cibert, *J. Appl. Phys.* **109**, 123906 (2011).

ПОДАВЛЕНИЕ ВЫНУЖДЕННОГО РАССЕЯНИЯ МАНДЕЛЬШТАМА – БРИЛЛЮЭНА В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ ПРИ МНОГОЧАСТОТНОМ РЕЖИМЕ ОБЛУЧЕНИЯ МИШЕНИ

Н. Н. Демченко^{}, Р. Д. Ивановских*

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

Поступила в редакцию 15 февраля 2022 г.,

после переработки 15 февраля 2022 г.

Принята к публикации 21 февраля 2022 г.

Рассмотрены условия, при которых возможно частично подавить вынужденное рассеяние Мандельштама–Бриллюэна в лазерной плазме. При подавлении вынужденного рассеяния удастся увеличить долю поглощенной лазерной энергии. Приведена аналитическая теория вынужденного рассеяния при взаимодействии двух встречных электромагнитных волн с ионно-звуковой волной в неоднородной разлетающейся плазме. Получены формулы, позволяющие вычислить коэффициент рассеяния и долю рассеянного излучения по заданным параметрам лазерного излучения и плазмы. Проведено численное моделирование процесса облучения CH_2 -мишени лазерным импульсом. Показано, что при многочастотном (две частоты и более) режиме облучения удастся увеличить долю поглощенной лазерной энергии в плазме за счет частичного подавления вынужденного рассеяния. При плотности потока падающего излучения Nd-лазера $5 \cdot 10^{14}$ Вт/см² в случае двух близких частот минимальная доля рассеяния составляет 0.87 от доли рассеяния, возникающей при одночастотном облучении. С ростом числа гармоник n в излучении подавление рассеяния увеличивается: $\delta_{sn}/\delta_{s1} = 0.68$ при $n = 5$ (δ_{sn} — доля рассеяния в случае n гармоник); $\delta_{sn}/\delta_{s1} = 0.51$ при $n = 11$. Такие значения δ_{sn}/δ_{s1} достигаются при $\Delta\omega_s/\omega_0 \approx 0.5\text{--}1.5\%$ в зависимости от числа гармоник ($\Delta\omega_s$ — ширина спектра, ω_0 — основная частота). При $\Delta\omega_s/\omega_0 > 1.5\%$ отношения δ_{sn}/δ_{s1} меняются слабо. Подавление вынужденного рассеяния происходит из-за биений, возникающих в излучении при сложении гармоник с близкими частотами. Подавление наступает, когда длина волны биений становится меньше характерного размера изменения скорости плазмы.

DOI: 10.31857/S0044451022070148

EDN: EFAPSA

1. ВВЕДЕНИЕ

Коэффициент усиления лазерной термоядерной мишени (отношение выделившейся энергии ядерных реакций к тепловой энергии плазмы) должен быть достаточно большим, чтобы компенсировать потери энергии, связанные с низким коэффициентом полезного действия лазера, потерями энергии вместе с разлетающейся плазмой, а также неполным поглощением лазерного излучения. Эффективность поглощения может быть снижена из-за процесса вынужденного рассеяния Мандельштама–Бриллюэна (ВРМБ). Вынужденное рассеяние пре-

пятствует прохождению лазерного излучения в более плотную плазму, где коэффициент поглощения выше. В разлетающейся лазерной плазме при нормальном падении излучения вынужденное рассеяние происходит при взаимодействии двух встречных электромагнитных волн с ионной волной [1]. При этом входящая в плазму электромагнитная волна ослабляется, а выходящая волна усиливается. Выходящая волна сначала возникает в результате линейного процесса отражения падающей волны от критической поверхности. Волновые векторы электромагнитных волн в общем случае составляют между собой угол, который меньше 180° . При многопучковом облучении сферической мишени встречные волны возникают как при отражении излучения одного пучка от поверхности каустики, так и при рефракции излучения от других пучков [2, 3]. Такой вид рассеяния был назван СВЕТ (crossed-beam energy

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

transfer).

В настоящее время рассеяние СВЕТ широко исследуется теоретически и экспериментально. Исследовано его влияние на уменьшение гидродинамической эффективности сжимаемых сферических мишеней [4, 5]. Рассеяние СВЕТ может проявляться и в схемах непрямого облучения мишени, когда лазерные пучки перекрываются во входных отверстиях полости. В этом случае предлагается использовать небольшой частотный сдвиг (порядка нескольких ангстрем) между перекрывающимися пучками [6–8]. С помощью частотного сдвига можно управлять процессом рассеяния и изменять угловое распределение падающего лазерного потока внутри полости.

В работе [2] предложен способ уменьшения доли рассеянного излучения при прямом многопучковом облучении мишени. Предложено использовать многочастотный режим облучения. Предполагается, что часть пучков должна иметь частоту излучения, немного отличающуюся от частоты в других пучках. Если рассмотреть две группы пучков, в которых разность частот $\Delta\omega \gg \omega_0 c_s/c$, где ω_0 — основная частота лазера, c_s — скорость звука в плазме, c — скорость света, то пересечение таких пучков не приведет к рассеянию [2]. При равенстве числа пучков в группах доля рассеяния должна уменьшиться в два раза. Это предположение нуждается в проверке. Точное рассмотрение задачи с двумя и более частотами усложняется тем, что при сложении полей возникают биения волн. Кроме размера неоднородности плазмы, где происходит рассеяние, в этом случае возникает еще один размер — длина волны биений λ_b . Волны биений распространяются с групповой скоростью v_g , которая стремится к нулю при приближении к критической поверхности. Поэтому существует некоторая область вблизи критической поверхности, в которой условия рассеяния не меняются при использовании многочастотного режима облучения. Период биений λ_b/v_g становится большим и сравнивается с длительностью лазерного импульса.

Из-за сложности аналитического исследования задачи о многочастотном облучении плазмы мы использовали численный метод, в котором рассматривались уравнения гидродинамики плазмы с учетом пондеромоторной силы в уравнении движения и уравнения Максвелла для каждой из парциальных волн на частоте ω_k [9, 10]. В работе [11] рассматривалась задача о подавлении рассеяния СВЕТ при многочастотном облучении плазмы. В ней рассматривались уравнения для акустических возмущений плотности плазмы при заданных невозмущенных про-

странственных распределениях плотности и скорости. Кроме того, уравнения Максвелла решались в предположении, что $|\partial^2 E_0/\partial t^2| \ll |\omega_0 \partial E_0/\partial t|$, где E_0 — медленно меняющаяся амплитуда поля. Поэтому вторая производная амплитуды поля не учитывалась. Однако при биениях производная $\partial E_0/\partial t = 0$ в максимуме амплитуды, а член $\partial^2 E_0/\partial t^2$ при этом достигает максимума. Поэтому модель, предложенная в работе [11], не точно описывает биения волн. Прежде чем перейти к результатам численных расчетов для многочастотного облучения плазмы, рассмотрим аналитическую теорию рассеяния СВЕТ в лазерной плазме при одночастотном облучении.

2. ВЫНУЖДЕННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ДВУХ ВСТРЕЧНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН С ИОННОЙ ВОЛНОЙ

Рассмотрим лазерную плазму, в которой плотность и скорость меняются вдоль координаты x , плотность уменьшается, а скорость возрастает. Лазерное излучение при этом падает в направлении, противоположном направлению оси x . Уравнения, описывающие изменение интенсивностей падающей q_0 и рассеянной q_1 волн без учета поглощения, получены в [1]:

$$\frac{dq_0}{dx} = Bq_0q_1, \tag{1}$$

$$\frac{dq_1}{dx} = Bq_0q_1, \tag{2}$$

$$B = \frac{\mu M k^2 G}{c\beta\rho_c^2 c_s^3}, \tag{3}$$

где

$$G = \left[(M^2 - 1)^2 + \left(\frac{2\mu k\beta M}{\rho c_s} \right)^2 \right]^{-1},$$

ω и $k = \omega/c$ — частота и волновое число лазера, $\beta = \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{1 - \rho/\rho_c}$, ρ — плотность плазмы, ρ_c — критическая плотность, c_s — скорость звука, $M = u/c_s$ — число Маха, μ — коэффициент ионной вязкости. Безразмерный множитель G в (3) имеет резонансный характер зависимости от числа Маха M с точкой резонанса $M = 1$. Из уравнений (1), (2) можно получить уравнение для коэффициента отражения $R = q_1/q_0$. Для этого надо умножить уравнение (1) на q_1 , а уравнение (2) на q_0 и вычесть из первого уравнения второе. В результате получаем

$$\frac{dR}{dx} = BqR, \tag{4}$$

где $q = q_0 - q_1 = \text{const}$ (это следует из (1), (2), если вычесть (2) из (1)). С помощью (4) можно решить граничную задачу, в которой слева от точки резонанса $M = 1$ задан коэффициент отражения R_L , а справа — падающий поток q_{0R} . Интегрирование выражения (4) дает

$$R_R = R_L \exp [b(1 - R_R)], \quad (5)$$

$$b = q_{0R} \int_{x_L}^{x_R} B dx \equiv q_{0R} I. \quad (6)$$

Интеграл I в (6) можно вычислить, если перейти от интегрирования по x к интегрированию по M : $dx = L_u dM$, где $L_u = c_s (\partial u / \partial x)_s^{-1}$ — характерный размер изменения скорости в точке резонанса $M = 1$. Отметим, что скорость плазмы должна рассматриваться относительно максимумов (или минимумов) пондеромоторного давления p_r , которые движутся вместе с движением критической поверхности. Поэтому достаточно рассматривать скорость относительно критической поверхности. Учитывая, что резонанс в точке $M = 1$ является узким по переменной M (это будет рассмотрено ниже), в диссипативном члене функции G в (3) можно приближенно считать $M = 1$, а также взять значения ρ и β в точке $M = 1$. Тогда с помощью замены

$$s = \frac{M^2 - 1}{a}, \quad a = \frac{2\mu k \beta_s}{\rho_s c_s} \quad (7)$$

получаем

$$I = \frac{k L_u (1 - \varepsilon_s)^2}{4c_s \rho_s c_s^2} \arctg s|_{s_L}^{s_R}. \quad (8)$$

Коэффициент вязкости μ входит в выражение (8) только в пределы интегрирования s_L и s_R . Если эти пределы велики по абсолютному значению, то в (8) вместо функции \arctg будет стоять число π и коэффициент вязкости не будет входить в I . Это свойство является характерным для любого резонанса. От диссипативного коэффициента зависят лишь ширина и максимум резонансной функции, а интеграл остается одним и тем же.

Пределы интегрирования s_L и s_R по порядку величины равны $1/a = \rho_s c_s / 2\mu k \beta_s$. Рассмотрим коэффициент ионной вязкости $\mu = \rho v_{Ti} l_i$, где v_{Ti} и l_i — соответственно тепловая скорость и длина пробега ионов. Такой коэффициент применим, если длина пробега ионов меньше длины волны λ пространственных осцилляций скорости. В противном случае

необходимо использовать ограниченный коэффициент вязкости. Вязкостное давление можно записать в виде $p_v = \rho v_{Ti} \Delta u$, где $\Delta u = l_i \partial u / \partial x$ в случае $l_i < \lambda$. При $l_i > \lambda$ в качестве Δu необходимо использовать максимальное изменение скорости $\Delta u = u_{max} - u_{min}$. Вместо l_i необходимо использовать эффективную величину l_{eff} порядка λ .

Определим более точно l_{eff} . Если возмущение скорости имеет вид $u_1 = \Delta u \sin^2 kx$, то максимум ее производной достигается при $kx = \pi/4$, и он равен $\Delta u k$. Эффективную величину l_{eff} определяем из соотношения $l_{eff} (\partial u_1 / \partial x)_{max} = \Delta u$. Так как $(\partial u_1 / \partial x)_{max} = \Delta u k$, то $l_{eff} = 1/k = \lambda/2\pi$. В лазерной плазме, как правило, $l_i > \lambda/2\pi$. Например, в условиях эксперимента на установке NIF (National Ignition Facility, США) [12] при температуре ионов 2.5 кэВ в СН-плазме $l_i = 0.66$ мкм [13], а $\lambda/2\pi = 0.056$ мкм. В этом случае в коэффициенте вязкости необходимо использовать l_{eff} . Отметим, что диссипация плотности импульса $\rho \Delta u$ должна происходить на кулоновской длине пробега l_i . Для этого необходимо выполнение условия $l_i \ll L_u$, что в лазерной плазме, как правило, выполняется (в условиях отмеченного эксперимента на установке NIF L_u составляет несколько сот микрометров).

В изложенной модели изучалась столкновительная диссипация ионных возмущений. В литературе рассматривается также бесстолкновительная диссипация на электронах. Бесстолкновительная диссипация на ионах с зарядом Z при $Z T_e \gg T_i$ мала, так как скорость звука определяется в основном электронным давлением. При этом в резонансе с волной находится экспоненциально малая часть ионов. Бесстолкновительная диссипация на электронах также мала из-за малости отношения масс электрона и иона [14]:

$$\gamma / \omega_s = \sqrt{\pi Z m_e / 8 m_i},$$

где γ и ω_s — декремент затухания и частота ионного звука, m_e и m_i — массы электрона и иона.

Сравним бесстолкновительную диссипацию на электронах со столкновительной диссипацией за счет ионной вязкости. Бесстолкновительная диссипация в уравнении движения записывается в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (p_T + p_r) - \gamma \delta u, \quad (9)$$

где $u = u_0 + \delta u$, u_0 — невозмущенная скорость, δu — возмущение скорости, вызванное пондеромоторным давлением p_r , p_T — тепловое давление. Запишем член бесстолкновительной диссипации $\gamma \delta u$ в виде эффективного вязкостного члена:

$$\gamma\delta u = -\frac{\mu_\gamma}{\rho} \frac{\partial^2 \delta u}{\partial x^2}. \quad (10)$$

Поскольку δu является осциллирующей функцией координаты x , взятие производной по x равносильно умножению на волновое число k_s . Тогда из (10) следует выражение $\mu_\gamma = \gamma\rho c_s^2/\omega_s^2$. Сравним коэффициент μ_γ со столкновительным коэффициентом $\mu = \rho v_{Ti} l_{eff}$ при $l_{eff} = \lambda/2\pi$ (рассматриваем ограниченную вязкость). Для отношения этих коэффициентов получаем

$$\frac{\mu_\gamma}{\mu} = \sqrt{\frac{\pi Z m_e}{8 m_i} \left(1 + \frac{Z T_e}{T_i}\right)}.$$

Так как $m_e/m_i \ll 1$, а в условиях лазерной плазмы отношение $Z T_e/T_i$ не настолько большое, чтобы компенсировать малость m_e/m_i , получаем $\mu_\gamma/\mu \ll 1$. Поэтому в лазерной плазме при $p_r < p_T$ бесстолкновительной диссипацией ионных возмущений можно пренебречь. Если $p_r > p_T$, то возможен нагрев ионов, при котором $T_i > Z T_e$ [15]. В этом случае возникает сильное затухание на ионах.

Как отмечено выше, пределы интегрирования s_L и s_R в (8) по порядку величины равны $\rho_s c_s/2\mu k\beta_s$. Если рассматривать ограниченную вязкость $\mu = \rho_s v_{Ti} \lambda/2\pi$, где $\lambda/2\pi = 1/k\beta$, то можно получить, что масштаб s_L и s_R определяется отношением $c_s/2v_{Ti}$, которое много больше единицы. Характерная ширина резонанса определяется значениями $s_L^* = -1$ и $s_R^* = 1$. Используя соотношения (7), можно получить значения M_L^* и M_R^* ,

$$M_L^* = \sqrt{1 - \frac{2v_{Ti}}{c_s}}, \quad M_R^* = \sqrt{1 + \frac{2v_{Ti}}{c_s}}, \quad (11)$$

которые незначительно отличаются от единицы. Это подтверждает то, что резонанс является достаточно узким по переменной M . Так как $s_L \ll -1$ и $s_R \gg 1$, то в (8) вместо функции \arctg будет стоять множитель π , и выражение (6) будет иметь вид

$$b = \frac{\pi q_{0R} k L_u (1 - \varepsilon_s)^2}{4c\varepsilon_s \rho_s c_s^2}. \quad (12)$$

Для определения R_R из (5) можно ввести отношение $\xi = R_R/R_L$ и искать эту величину из уравнения

$$\xi = \exp[-b(1 - R_L \xi)]. \quad (13)$$

Это уравнение решается итерациями. Если $b(1 - R_L \xi p) < 1$, то, заменяя экспоненту линейной функцией, находим приближенное решение:

$$\frac{R_R}{R_L} = \frac{1 + b}{1 + b R_L}. \quad (14)$$

Если найдено значение R_R , то q_{0L} можно найти, используя соотношение $q = q_0 - q_1 = \text{const}$. Равенство полного потока $q_L = q_R$ дает

$$q_{0L} = q_{0R} \frac{1 - R_R}{1 - R_L}. \quad (15)$$

Отметим, что в случае $q_0 \gg q_1$ в (2) можно считать q_0 постоянной величиной. Тогда для рассеянного потока q_1 получаем выражение $q_{1R}/q_{1L} = \exp(\kappa_s L_u)$, где κ_s — коэффициент рассеяния:

$$\kappa_s = \frac{\pi q_{0R} k (1 - \varepsilon_s)^2}{4c\varepsilon_s \rho_s c_s^2}. \quad (16)$$

Рассмотренная граничная задача имеет практический интерес при использовании этой модели рассеяния СВЕТ в гидродинамических расчетах, где лазерное излучение описывается с помощью потоков падающего и отраженного от точки поворота излучения.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДАВЛЕНИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МИШЕНИ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ, ИМЕЮЩИМ СПЕКТР БЛИЗКИХ ЧАСТОТ

Для расчета взаимодействия с плазмой лазерного излучения, имеющего конечную ширину спектра, была доработана существующая гидродинамическая программа RAPID-SP [9]. Новая версия позволяет проводить расчеты с учетом любого числа гармоник в падающем лазерном излучении. Физическая модель основывается на уравнениях гидродинамики плазмы (одномерная модель для плоской геометрии) и уравнениях Максвелла для лазерного излучения при нормальном падении на плазму.

Пусть лазерное излучение падает в направлении, противоположном направлению оси x , а электромагнитное поле волны имеет компоненты E_y и H_z (далее у полей индексы координат опускаем). Для уравнений гидродинамики используем лагранжевы переменные (m, t) . Система уравнений имеет вид

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial m}, \quad \frac{\partial x}{\partial t} = u, \quad (17)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial m}(p_T + p_r + p_v), \quad (18)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} = -p_{Te} \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial q_{Te}}{\partial m} - Q_{ei}(T_e - T_i) + \frac{V}{2} \sigma |E|^2, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} = -(p_{Ti} + p_v) \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial q_{Ti}}{\partial m} + Q_{ei}(T_e - T_i), \quad (20)$$

$$\frac{dE_k}{dx} = \frac{i\omega_k}{c} H_k, \quad (21)$$

$$\frac{dH_k}{dx} = \frac{i\omega_k}{c} \varepsilon(\omega_k) E_k, \quad (22)$$

где $V = 1/\rho$ – удельный объем, u – скорость, $p_T = p_{Te} + p_{Ti}$ – тепловое давление, p_r – пондеромоторное давление, $p_v = -\mu \partial u / \partial x$ – вязкостное давление, q_{Te} и q_{Ti} – электронный и ионный тепловые потоки, ε_e и ε_i – удельные внутренние энергии электронов и ионов, Q_{ei} – коэффициент электрон-ионной релаксации, $|E|$ – амплитуда электрического поля лазерного излучения, σ – высокочастотная проводимость плазмы на основной частоте лазера (предполагается, что ширина спектра излучения является узкой), $E_k(x)$ и $H_k(x)$ – комплексные фурье-компоненты электрического и магнитного полей на частоте ω_k . Суммарные поля можно записать в виде

$$E = E_s(x, t) \exp(-i\omega_0 t), \quad H = H_s(x, t) \exp(-i\omega_0 t),$$

где медленно меняющиеся амплитуды E_s и H_s записываются в виде

$$E_s(x, t) = \sum_{k=-K}^K E_k(x) e^{-ik\Delta\omega t}, \quad (23)$$

$$H_s(x, t) = \sum_{k=-K}^K H_k(x) e^{-ik\Delta\omega t}. \quad (24)$$

Здесь $k\Delta\omega = \omega_k - \omega_0$, $\Delta\omega$ – шаг по частоте, ω_0 – основная частота. Распределение интенсивностей I_k парциальных волн по частотам в принципе может быть любым. В частности использовалась лоренцева форма линии:

$$I_k = \frac{A}{(\omega_k - \omega_0)^2 + \gamma_L^2}, \quad (25)$$

где γ_L – ширина линии, A – нормировочный множитель, сумма интенсивностей I_k должна равняться усредненной по времени (за период биений) падающей лазерной интенсивности. Задавая в (25) величину γ_L очень большой (по сравнению с $\omega_k - \omega_0$), можно моделировать равномерное распределение интенсивности по частотам. Пондеромоторное давление в (18) записывается в виде

$$p_r = \frac{1}{16\pi} (|E|^2 + |H|^2). \quad (26)$$

Комплексная диэлектрическая проницаемость в (22) задается в виде $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$. Действительная часть $\varepsilon_1 = 1 - \omega_{pe}^2 / \omega_k^2$, где $\omega_{pe}^2 = 4\pi e^2 n_e / m_e$ –

плазменная частота. Мнимая часть $\varepsilon_2 = \omega_{pe}^2 \nu_{ei} / \omega_0^3$, где ν_{ei} – электрон-ионная частота столкновений.

Метод решения уравнений (21), (22) одинаков для всех гармоник. Делается переход от полей E и H к падающей и отраженной волнам P и R . При этом возникает уравнение для функции коэффициента отражения $V_R = R/P$. Описание этого метода приведено в работе [10]. Плазма представляется в виде набора тонких слоев (счетных ячеек) с постоянными плотностью и температурой в каждом слое. Внутри каждого слоя используются аналитические решения для P , R и V_R . Сначала расчет идет слева направо для определения V_R , затем в обратном направлении для определения всех остальных функций. Размер счетной ячейки должен быть значительно меньше длины волны излучения. Поэтому для описания взаимодействия с плазмой, имеющей большой характерный размер неоднородности по сравнению с длиной волны излучения, требуется большое число счетных ячеек (в рассмотренных ниже расчетах число ячеек составляло около трех тысяч).

Рассмотрим результаты расчетов, целью которых было определение влияния на процессы поглощения и рассеяния биений пондеромоторного потенциала, обусловленных конечной шириной спектра лазерного излучения. Расчеты проводились для CH_2 -мишени при плотности потока лазерного излучения в диапазоне $5 \cdot 10^{14} - 10^{15}$ Вт/см² при длине волны 1.06 мкм. Рассматривалась постоянная во времени форма импульса. На рис. 1 показаны профили пондеромоторного давления p_r , плотности ρ , электронной T_e и ионной T_i температур плазмы в момент времени 0.2 нс при воздействии лазерного излучения с одной частотой ($\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15}$ с⁻¹) при плотности потока $5 \cdot 10^{14}$ Вт/см². На рисунках лазерное излучение падает справа. На рис. 2 приведены профили тех же величин и в тот же момент времени при воздействии лазерного излучения с двумя близкими частотами при той же плотности потока. Гармоники имели одинаковую амплитуду, разность частот $\Delta\omega = 0.02\omega_0$. Сравнение рис. 1 и 2 приводит к следующим выводам. В случае одной частоты возникает значительное вынужденное рассеяние. Пондеромоторное давление p_r падает почти на порядок величины по мере приближения к критической поверхности (для CH_2 -мишени критическая плотность равна $2.98 \cdot 10^{-3}$ г/см³). В случае двух частот происходит меньшее падение пондеромоторного давления. Видна структура биений p_r . Здесь биения – это сложение падающей и отраженной волн биений. Поэтому получается волна биений типа стоячей вол-

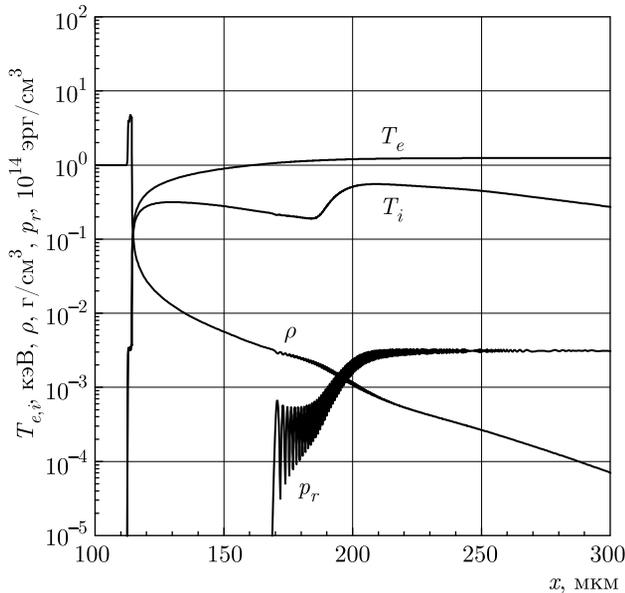


Рис. 1. Профили ponderомоторного давления p_r , плотности ρ , электронной T_e и ионной T_i температур в момент времени 0.2 нс при воздействии на CH_2 -мишень лазерного излучения с одной частотой ($\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$) при плотности потока $5 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$

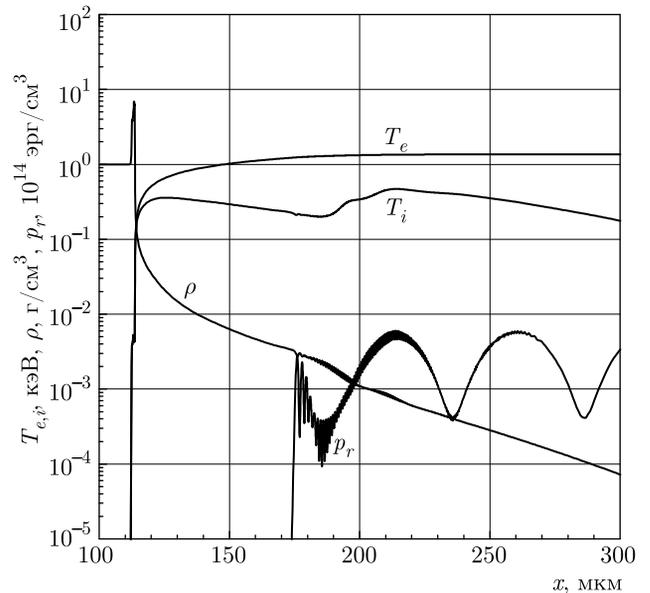


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но при воздействии на CH_2 -мишень лазерного излучения с двумя близкими частотами при плотности потока $5 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$. Гармоники имели одинаковую амплитуду, разность частот $\Delta\omega = 0.02\omega_0$, $\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$

ны, у которой есть узлы и максимумы амплитуды. В случае одной частоты вынужденное рассеяние возникает на масштабе длины, определяемой характерным размером неоднородности плотности плазмы. В случае двух частот масштаб длины, на которой возникает рассеяние, определяется длиной волны биеений ponderомоторного потенциала, а точнее, расстоянием между узлом и максимумом амплитуды. Это приводит к тому, что доля δ_a поглощенной лазерной энергии в случае двух частот больше по сравнению со случаем одной частоты в 1.34 раза.

Для большей наглядности различия рассеяния в приведенных выше двух случаях на рис. 3 показаны те же зависимости плотности и ponderомоторного давления, что и на рис. 1 и 2, однако масштабы по осям изменены. В случае двух частот (рис. 3б) видно разделение области рассеяния на две подобласти. В узле стоячей волны возмущения плотности отсутствуют.

Отметим, что рассеяние излучения на возмущениях плотности приводит к передаче плазме импульса от излучения. Это приводит к некоторой деформации профиля средней плотности и уменьшению ее размера неоднородности. Этот эффект можно видеть на рис. 1 и 2, однако при плотности потока $5 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$ он выражен слабо. Поэтому был проведен расчет при плотности потока, увеличен-

Таблица 1

τ_L , нс	δ_{a1}	δ_{a2}	δ_{a3}	δ_{a5}
0.2	0.0905	0.121	0.126	0.124
0.4	0.121	0.159	0.178	0.187
0.6	0.148	0.198	0.222	0.250
0.8	0.168	0.224	0.251	0.284

Таблица 2

τ_L , нс	δ_{a2}/δ_{a1}	δ_{a3}/δ_{a1}	δ_{a5}/δ_{a1}
0.2	1.337	1.392	1.370
0.4	1.314	1.471	1.545
0.6	1.338	1.500	1.689
0.8	1.333	1.494	1.690

ной в два раза. На рис. 4 показаны профили тех же величин что и на рис. 1, но для плотности потока 10^{15} Вт/см^2 в момент времени 0.09 нс. Здесь можно видеть значительную деформацию профиля средней плотности. Это влияет на долю рассеянного излучения. С одной стороны, доля рассеяния растет из-за увеличения интенсивности излучения и, соот-

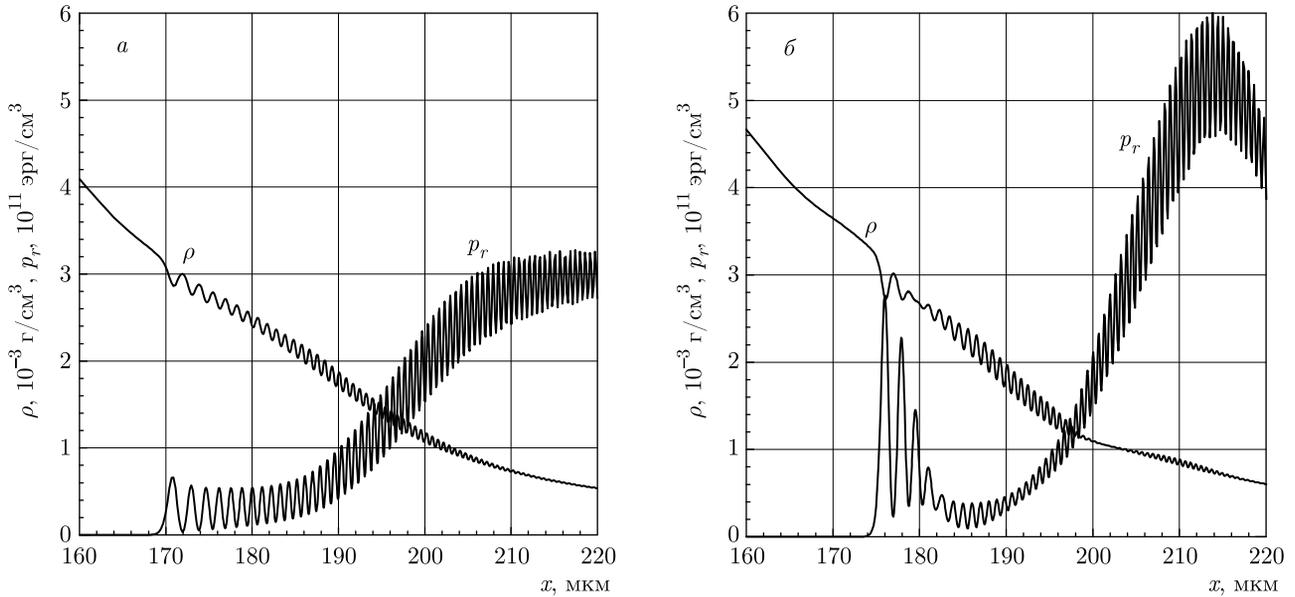


Рис. 3. Профили ponderomotive давления p_r и плотности ρ из рис. 1 (а) и рис. 2 (б), показанные в измененных масштабах по осям

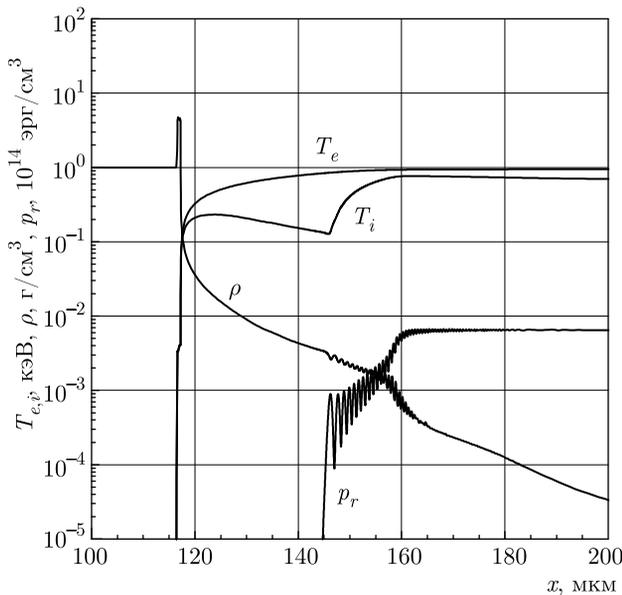


Рис. 4. Профили ponderomotive давления p_r , плотности ρ , электронной T_e и ионной T_i температур в момент времени 0.09 нс при воздействии на CH_2 -мишень лазерного излучения с одной частотой ($\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$) при плотности потока 10^{15} Вт/см^2

ответственно, амплитуды возмущений. С другой стороны, есть уменьшение размера неоднородности, которое приводит к снижению доли рассеяния.

Рассмотрим зависимость эффекта подавления вынужденного рассеяния (соответственно, увеличе-

ния эффективности поглощения) от длительности лазерного импульса τ_L и от числа гармоник в лазерном излучении, n . Для этого были проведены расчеты с $n = 1, 2, 3$ и 5 при суммарной ширине $\Delta\omega_s = 3.6 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ($\Delta\omega_s/\omega_0 = 0.02$) и плотности потока $5 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$. Спектральное распределение интенсивности было равномерным (гармоники равной амплитуды) при постоянной во времени плотности потока. В табл. 1 приведены значения доли δ_{an} поглощенной лазерной энергии в зависимости от длительности импульса τ_L и числа гармоник n . В табл. 2 приведены отношения δ_{an}/δ_{a1} , характеризующие увеличение эффективности поглощения в зависимости от длительности импульса и числа гармоник. Как следует из таблиц, с ростом длительности импульса растет и эффективность поглощения при любом числе гармоник в импульсе (табл. 1). Однако эффект подавления вынужденного рассеяния становится более сильным с ростом числа гармоник в излучении (табл. 2, увеличение поглощения в 1.69 раза в случае пяти гармоник).

На рис. 5 приведены профили p_r , ρ , T_e и T_i в окрестности критической плотности в момент времени 0.6 нс для варианта излучения с пятью гармониками. На рис. 6 более подробно показаны профили p_r и ρ из рис. 5 (изменены масштабы по осям). На рис. 5 видно, что в случае пяти гармоник существует несколько характерных размеров по оси x , на которых изменяется p_r . Из рис. 6 следует, что область рассеяния распадается на несколько подоблас-

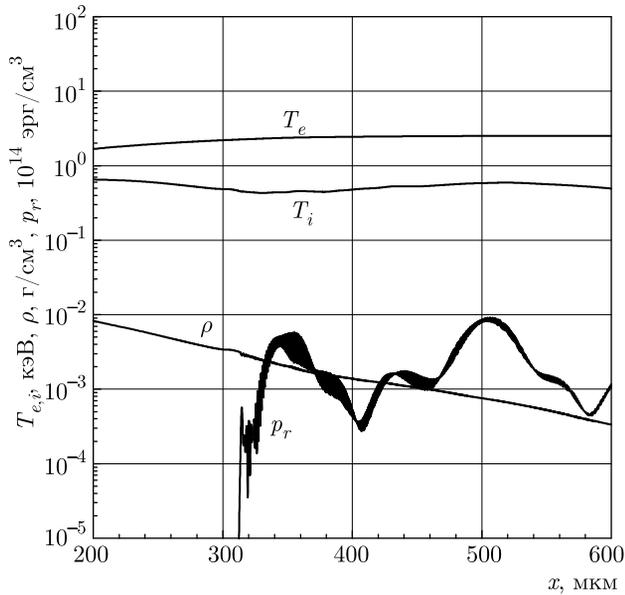


Рис. 5. То же, что на рис. 4, в момент времени 0.6 нс при воздействии на CH_2 -мишень лазерного излучения с пятью частотами при плотности потока $5 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Гармоники имели одинаковую амплитуду и суммарную ширину спектра $\Delta\omega_s = 0.02\omega_0$, $\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15}$ с⁻¹

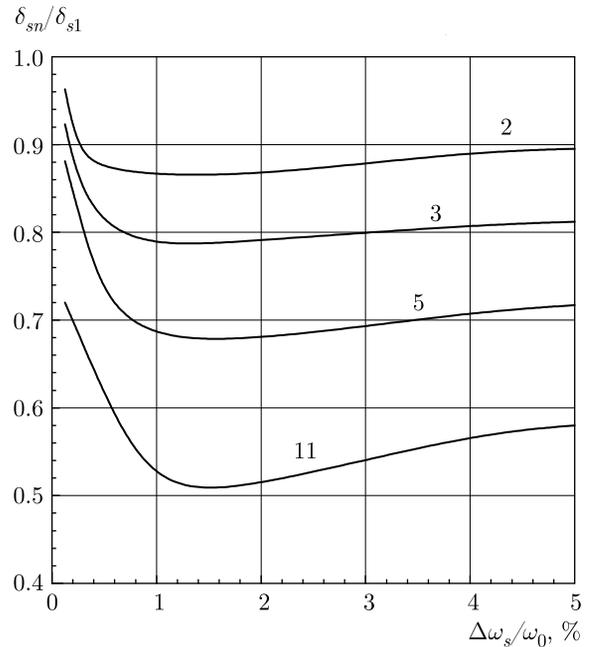


Рис. 7. Зависимость от ширины спектра $\Delta\omega_s/\omega_0$ и числа гармоник n отношения долей рассеянной энергии при многочастотном δ_{sn} и одночастотном δ_{s1} облучениях. Числами у кривых обозначено число гармоник

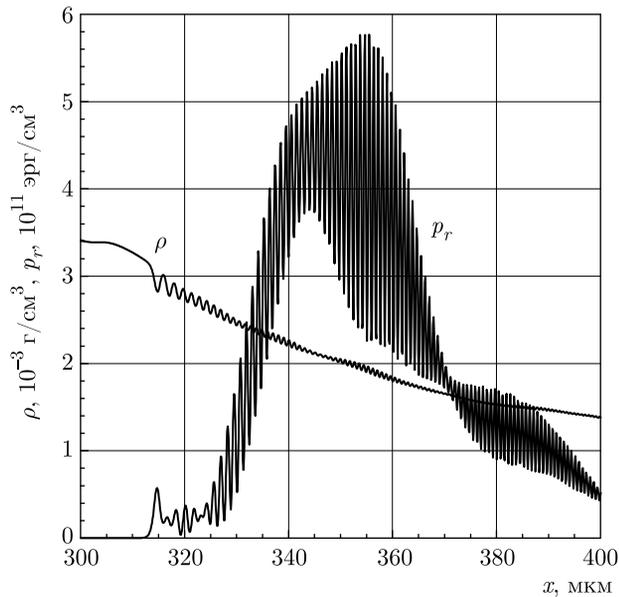


Рис. 6. Профили пондеромоторного давления p_r и плотности ρ из рис. 5, показанные в измененных масштабах по осям

тей. При этом размер основной области рассеяния вблизи критической плотности сокращается.

Проведены расчеты, в которых была выделена доля энергии излучения, теряемая за счет рассея-

ния. Для этого в каждом варианте проводились два расчета. Один расчет учитывал p_r в уравнении (18), а в другом полагалось $p_r = 0$. По разности долей поглощенной энергии вычислялась доля рассеянной энергии. Исследовался вариант облучения CH_2 -мишени при плотности потока $5 \cdot 10^{14}$ Вт/см² (основная частота $\omega_0 = 1.8 \cdot 10^{15}$ с⁻¹). Доля рассеянной энергии рассматривалась за период времени 0.6 нс от начала импульса. Определены доли рассеянной энергии δ_{sn} для излучения, состоящего из n гармоник ($n = 1, 2, 3, 5, 11$). Распределение интенсивности по гармоникам было равномерным, разность между соседними частотами (при $n > 2$) была одинаковой. Суммарная ширина спектра $\Delta\omega_s = \omega_{max} - \omega_{min}$ варьировалась.

На рис. 7 приведены зависимости от $\Delta\omega_s/\omega_0$ отношения $k_n = \delta_{sn}/\delta_{s1}$. Это отношение характеризует степень подавления вынужденного рассеяния при многочастотном облучении мишени по сравнению с облучением на одной частоте. Из рис. 7 следует, что доля рассеяния падает с ростом числа гармоник. При $n = 11$ рассеяние можно подавить почти в два раза.

Зависимости на рис. 7 можно объяснить влиянием следующих факторов. Резкое уменьшение отношения k_n в окрестности точки $\Delta\omega_s/\omega_0 = 0$ связано с

тем, что суммарная длина биений, в которых могут возникать возмущения плотности плазмы, сокращается и сравнивается с характерным размером изменения скорости L_u . Этот размер, согласно выражению (12), определяет величину рассеяния при одночастотном облучении. Суммарная длина, где возникают возмущения плотности, уменьшается с ростом числа гармоник.

При увеличении числа гармоник область рассеяния распадается на отдельные подобласти, и число подобластей растет (см. рис. 3б и 6). При увеличении $\Delta\omega_s/\omega_0$ для фиксированного значения n размер одной подобласти с возмущениями плотности уменьшается, а число подобластей растет, так как в этом случае L_u значительно больше размера одной подобласти. Действительно, увеличение $\Delta\omega_s$, согласно (23), (24), равносильно сжатию оси времени и уменьшению временного периода волн биений. При фиксированной групповой скорости этих волн, $d\omega/dk = c\varepsilon^{1/2}$, где ε берется при $\omega = \omega_0$, увеличение $\Delta\omega_s$ приводит к уменьшению длин волн биений. При этом число подобластей с возмущениями плотности возрастает, так как L_u почти не изменяется.

Отметим, что на рис. 7 кривые δ_{sn}/δ_{s1} начинаются при $\Delta\omega_s/\omega_0 > 0$. Это связано с тем, что рассматривался импульс с конечной длительностью $\tau = 0.6$ нс, которая приводит к конечной, не равной нулю, ширине спектра $\Delta\omega_\tau$. В задаче необходимо выполнение условия $\Delta\omega_s \gg \Delta\omega_\tau$ для того, чтобы произошло усреднение поглощенной энергии за время значительно большее, чем период волны биения.

В работе [11] получены зависимости, аналогичные приведенным на рис. 7, для случаев $n = 2, 3$ и для сплошного спектра с относительной шириной $\Delta\omega_s/\omega_0$. В случае $n = 2, 3$ результаты оказались качественно похожими приведенным на рис. 7. В случае сплошного спектра в работе [11] показана возможность полного подавления вынужденного рассеяния. В нашей модели рассматривается дискретный набор частот, а сплошной спектр может быть рассмотрен как предел при увеличении числа гармоник до бесконечности. Согласно рис. 7, тенденция к уменьшению вынужденного рассеяния наблюдается при увеличении числа гармоник. Вопрос о полном подавлении остается открытым, так как модель работы [11] не точно учитывает волны биений (не учитывается вторая производная по времени от амплитуды поля). Всегда будет некоторая окрестность критической плотности, в которой групповая скорость волн близка к нулю и возникнет небольшое рассеяние.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вынужденное рассеяние СВЕТ может значительно снизить эффективность поглощения лазерного излучения в плазме. Одним из способов подавления рассеяния СВЕТ является использование многочастотного лазерного излучения. Рассмотрены условия, при которых возможно частично подавить рассеяние СВЕТ и увеличить долю поглощенной лазерной энергии. Приведена аналитическая теория рассеяния СВЕТ при взаимодействии двух встречных электромагнитных волн с ионно-звуковой волной в неоднородной разлетающейся плазме. Получены формулы, позволяющие вычислить коэффициент рассеяния и долю рассеянного потока излучения по заданным параметрам лазерного излучения и плазмы.

Проведено численное моделирование процесса облучения CH_2 -мишени лазерным импульсом. Численная модель основывается на уравнениях гидродинамики плазмы с учетом ponderomotorной силы и уравнениях Максвелла для излучения, имеющего спектр близких частот. В модели самосогласованным образом учитываются возникновение мелкомасштабных возмущений плотности, на которых происходит рассеяние излучения, и обратное влияние рассеяния на размер неоднородности средней плотности плазмы. Показано, что при многочастотном режиме облучения мишени удается увеличить долю поглощенной лазерной энергии в плазме за счет частичного подавления рассеяния СВЕТ. В случае двух близких частот ($n = 2$) отношение $k_n = \delta_{sn}/\delta_{s1} = 0.87$, где δ_{sn} — доля рассеянной энергии излучения, состоящего из n гармоник. С ростом числа гармоник в излучении величина k_n уменьшается: $k_n = 0.68$ при $n = 5$, $k_n = 0.51$ при $n = 11$. Такие значения k_n достигаются при значениях $\Delta\omega_s/\omega_0$, лежащих в диапазоне 0.5–1.5% в зависимости от числа гармоник ($\Delta\omega_s$ — ширина спектра). При $\Delta\omega_s/\omega_0 > 1.5\%$ значения k_n меняются слабо.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-11-00102).

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Н. Демченко, В. Б. Розанов, ЖЭТФ **103**, 2008 (1993).

2. I. V. Igumenshchev, W. Seka, D. H. Edgell et al., *Phys. Plasmas* **19**, 056314 (2012).
3. I. V. Igumenshchev, D. H. Edgell, V. N. Goncharov et al., *Phys. Plasmas* **17**, 122708 (2010).
4. T. R. Boehly, D. L. Brown, R. S. Craxton et al., *Opt. Comm.* **133**, 495 (1997).
5. V. N. Goncharov, T. S. Sangster, R. Betti et al., *Phys. Plasmas* **21**, 056315 (2014).
6. N. B. Meezan, L. J. Atherton, D. A. Callahan et al., *Phys. Plasmas* **17**, 056304 (2010).
7. R. P. J. Town, M. D. Rosen, P. A. Michel et al., *Phys. Plasmas* **18**, 056302 (2011).
8. G. A. Kyrala, J. L. Kline, S. Dixit et al., *Phys. Plasmas* **18**, 056307 (2011).
9. N. N. Demchenko and V. B. Rozanov, *ECLIM 2002, Proc. SPIE* **5228**, 427 (2003).
10. Ю. В. Афанасьев, Н. Н. Демченко, О. Н. Крохин и др., *ЖЭТФ* **72**, 170 (1977).
11. J. W. Bates, R. K. Follett, J. G. Shaw et al., *High Energy Density Physics* **36**, 100772 (2020).
12. M. J. Rosenberg, A. A. Solodov, J. F. Myatt et al., *Phys. Rev. Lett.* **120**, 055001 (2018).
13. Н. Н. Демченко, *ЖЭТФ* **157**, 1 (2020).
14. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979), с. 171.
15. С. Ю. Гуськов, Н. Н. Демченко, К. Н. Макаров и др., *КЭ* **41**, 886 (2011).

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ СОЛИТОНОВ И КОЛЛАПС ЗВУКОВЫХ ВОЛН В СРЕДАХ С ПОЛОЖИТЕЛЬНОЙ ДИСПЕРСИЕЙ

*Е. А. Кузнецов**

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

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

*Сколковский институт науки и технологий
143026, Сколково, Москва, Россия*

*Институт космических исследований Российской академии наук
117997, Москва, Россия*

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

Представлен краткий обзор результатов исследования коллапса звуковых волн в средах с положительной дисперсией, который описывается в рамках трехмерного уравнения Кадомцева – Петвиашвили (КП) [1]. Рассмотрена неустойчивость КП одномерных солитонов в длинноволновом пределе с помощью разложения для соответствующей спектральной задачи. Продемонстрировано, что неустойчивость КП имеет место также для двумерных солитонов в рамках трехмерного уравнения КП с положительной дисперсией. Согласно [2] эта неустойчивость относится к самофокусирующему типу. Нелинейная стадия этой неустойчивости представляет собой коллапс. Одним из критериев коллапса является неограниченность гамильтониана снизу при фиксированной проекции импульса, совпадающей с L_2 -нормой. Этот факт следует из масштабных преобразований, сохраняющих эту норму постоянной. Коллапс по этой причине можно представлять как процесс падения частицы в самосогласованном неограниченном потенциале. Показано, что излучение волн из области с отрицательным гамильтонианом, благодаря его неограниченности снизу, способствует коллапсу волн. Этот сценарий был подтвержден численными экспериментами [3,4]. Представлены два аналитических подхода исследования коллапса: с помощью вариационного метода и квазиклассического приближения. В отличие от нелинейного уравнения Шредингера с фокусирующей нелинейностью особенность квазиклассического подхода для описания звукового коллапса состоит в том, что этот метод предложен для трехмерного уравнения КП как системы с гидродинамической нелинейностью. В рамках квазиклассического описания найдено семейство автомодельных коллапсов. Верхняя граница этого семейства соответствует сильному коллапсу, при котором энергия, захваченная в особенность, конечна. Существование такого режима подтверждается также с помощью вариационного подхода. Другая граница коллапсирующей иерархии совпадает с автомодельным решением трехмерного уравнения КП, описывающим наиболее быстрый слабый коллапс.

DOI: 10.31857/S004445102207015X
EDN: EFCRQF

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время хорошо известно, какую роль в нелинейной физике играет коллапс волн — процесс

образования особенности за конечное время (см., например, обзор [5]). Если уединенные волны — солитоны — характерны для низкоразмерных нелинейных волновых систем, то коллапсы, в отличие от солитонов, типичны для многомерных систем. Причина такого поведения, как известно, связана с усилением нелинейности с ростом размерности пространства. Например, для одномерных нелинейных волновых систем, таких как уравнения Кортевега – де

* E-mail: kuznetso@itp.ac.ru

Вриза (КДВ) или нелинейные уравнения Шредингера, солитоны играют существенную роль в их динамике. С гамильтоновой точки зрения, солитоны в этих моделях, являясь стационарными точками гамильтониана \mathcal{H} при фиксации соответствующих младших положительно определенных интегралов движения, реализуют минимум \mathcal{H} и тем самым оказываются устойчивыми по Ляпунову. Как правило, гамильтонианы для этих моделей имеют два вклада, соответствующих волновой дисперсии (положительно определенной) и нелинейности. Баланс этих двух факторов приводит к существованию солитонов в таких моделях. В отличие от устойчивых по Ляпунову солитонов коллапс возникает в волновых системах с неограниченными гамильтонианами. Когда гамильтониан является неограниченным функционалом (снизу или сверху), коллапс волн, приводящий к образованию особенности, представляется наиболее вероятным сценарием поведения нелинейной волновой системы. В этом случае коллапс подобен процессу падения частицы в самосогласованном потенциале (см., например, [4–6]).

Основная цель настоящей статьи — дать краткий обзор результатов, полученных при изучении коллапса звуковых волн в средах со слабой положительной дисперсией. Такой коллапс можно описать в рамках уравнения Кадомцева–Петвиашвили (КП) [1, 2]. Как известно (см., например, [7]), волны акустического типа в жидком гелии He^4 при температурах ниже лямбда-точки для некоторой области давлений имеют положительную дисперсию. Положительной дисперсией обладает также спектр Боголюбова для волн малой амплитуды в газовых бозе-эйнштейновских конденсатах с отталкиванием между атомами в рамках уравнения Гросса–Питаевского [8, 9]. В сильно замагниченной плазме с $\beta = 8\pi p/B^2 \ll 1$ быстрые магнитоакустические волны представляют собой другой пример волн акустического типа с положительной дисперсией, реализующийся практически для всех углов распространения (см. [4], где этот вопрос подробно обсуждается).

Уравнение КП, как известно, представляет собой многомерное обобщение уравнения КДВ. Напомним, что уравнение КДВ для акустических волн со слабой дисперсией может быть выведено исходя из систем гидродинамического типа с помощью многомасштабного разложения (см., например, [10]). Дисперсия разного типа (положительная или отрицательная) для уравнения КДВ проявляется в том, что для солитонов КДВ знак отклонения плотности от среднего значения противоположен знаку дисперсии. При положительной дисперсии это ямы плотно-

сти, которые распространяются со скоростью, меньшей скорости звука c_s . Ситуация для отрицательной дисперсии обратная: солитоны представляют собой горбы плотности, движущиеся со скоростью, большей c_s (в частности, для гравитационных волн в пределе мелкой воды такие солитоны представляют собой движущиеся с постоянной скоростью возвышения водной поверхности). Именно это физическое свойство — корреляция между отклонением плотности от равновесной и знаком дисперсии — является ключевым моментом для понимания происхождения неустойчивости КП одномерных солитонов по отношению к поперечным возмущениям [1]. Солитоны в средах с отрицательной дисперсией оказываются устойчивыми, а при положительной дисперсии — неустойчивыми. Как было указано Кадомцевым [2], эта неустойчивость имеет самофокусирующую природу.

Уравнение КП учитывает не только дисперсию, но и дифракцию звуковых пучков в направлении, поперечном к их распространению. Уравнение КП может быть получено по той же схеме, что и уравнение КДВ, с учетом нелинейной перенормировки скорости звука, линейной дисперсии и дифракции; все эти факторы считаются слабыми по сравнению с основным распространением (скажем, вдоль x) акустических пучков со средней скоростью звука c_s и по этой причине они могут быть учтены пертурбативно. Очевидно, что распространение пучка со скоростью c_s можно исключить с помощью преобразования Галилея. Остальные малые члены, однако, могут быть одного порядка. Гамильтонова структура уравнения КП с учетом дифракционного члена остается такой же, как и в случае уравнения КДВ. Гамильтониан \mathcal{H} уравнения КП из-за дифракции получает дополнительный квадратичный вклад. В случае положительной дисперсии квадратичная часть \mathcal{H} оказывается положительно определенной (в случае отрицательной дисперсии квадратичный вклад не является знакоопределенным). Как и уравнение КДВ, уравнение КП кроме \mathcal{H} сохраняет x -проекцию импульса P , которая является положительно определенной величиной. Динамика звуковых волн с положительной дисперсией, описываемая уравнением КП, существенно зависит от размерности пространства d .

Как было показано в работе [11], двумерное уравнение КП принадлежит к интегрируемым моделям, обладающим представлением Лакса, что дает возможность эффективно исследовать эту модель с помощью метода обратной задачи рассеяния. Применение этого подхода позволило аналитически найти

локализованное двумерное солитонное решение, так называемый ламп [12]. Отметим, что впервые такие решения были обнаружены численно Петвиашвили [13]. В виде солитона ламп,двигающийся вдоль оси x с постоянной скоростью, представляет собой стационарную точку гамильтониана при фиксированном импульсе P . Как было показано [14], при фиксированном P гамильтониан оказывается ограниченным снизу функционалом, достигая своего минимума, соответствующего солитонному решению. По этой причине двумерное солитонное решение — ламп — оказывается устойчивым по Ляпунову при $d = 2$.

Однако в трехмерной геометрии ситуация кардинально меняется: гамильтониан КП оказывается неограниченным снизу функционалом (см. [3, 4, 14]), что легко проверяется путем применения двух независимых масштабных преобразований вдоль оси x и в поперечной плоскости, для каждого из которых P остается инвариантным. Именно это свойство стало отправной точкой для проведения численных экспериментов по наблюдению коллапса [3] (см. также [4]).

Результаты этих численных экспериментов показали тенденцию к формированию сингулярности за конечное время. В этих расчетах было изучено влияние излучения волн малой амплитуды на процесс схлопывания. Было показано, что излучение способствует коллапсу, приводящему к образованию особенностей слабого типа, когда волновая энергия, захваченная в особенность, формально стремится к нулю, но в действительности из-за малой диссипации оказывается конечной, но достаточно малой величиной. Как было показано в [4], для сильно замагниченной плазмы коллапс быстрых магнито-звуковых волн играет весьма существенную роль в динамике косых (относительно среднего магнитного поля) ударных волн, определяя тонкую структуру фронта и его ширину. Коллапс в этом случае представляет собой эффективный механизм передачи энергии волн ионам.

Необходимо отметить, что примерно в то же время, когда проводились численные эксперименты по наблюдению коллапса звуковых волн, т. е. около 1985 г., в рамках нелинейного уравнения Шредингера (НУШ) разрабатывалась трехмерная квазиклассическая теория волнового коллапса [6]. В рамках этой теории дана классификация волновых коллапсов, начиная с сильного коллапса, когда захваченная в особенность энергия конечна, и заканчивая слабыми коллапсами. В [6] (см. также обзор [5]) было установлено, что решение в виде сильного кол-

лапса для трехмерного НУШ соответствует квазиклассическому сжатию волнового пакета как целого. Кроме того, было указано на существование целого семейства квазиклассических слабых коллапсов. Верхняя граница этого семейства совпадает с автомодельным решением НУШ, которое описывает наиболее быстрый процесс формирования особенности в режиме слабого коллапса.

В настоящем обзоре представлена квазиклассическая теория акустического коллапса на основе работы [15]. Такого рода описание коллапсов применительно к звуковым волнам с положительной дисперсией имеет ряд особенностей, связанных с нелинейностью гидродинамического типа, отличной от той, которая есть в НУШ. Несмотря на это, удается развить вариационный подход для трехмерного уравнения КП. Как известно, такой подход может претендовать лишь на некоторое качественное описание коллапса. Важно отметить, что решение в рамках вариационного подхода к НУШ дало ту же автомодельность, что и точное квазиклассическое решение, найденное в [6]. Такое же поведение прослеживается и относительно акустического коллапса в квазиклассическом пределе. Для трехмерного уравнения КП, как и для трехмерного НУШ, находятся автомодельности для целого семейства квазиклассических коллапсирующих распределений.

Следует отметить, что в рамках трехмерного уравнения КП можно увидеть много общего в задаче о коллапсе в уравнении КДВ со степенной нелинейностью ($\sim u^{p-2}u_x$), другом примере системы с гидродинамической нелинейностью [16]. Это уравнение демонстрирует критическое поведение при степени $p = 6$. При меньшем значении p гамильтониан оказывается ограниченным снизу при фиксированном импульсе P . В этом случае солитоны реализуют минимум \mathcal{H} и, соответственно, устойчивы по Ляпунову [17] (см. также [5]). При $p \geq 6$ гамильтониан становится неограниченным функционалом, и поэтому в таком случае возникает коллапс, что численно наблюдалось в [16]. Отметим, что для коллапса в уравнении КДВ со степенной нелинейностью так же, как и для трехмерного уравнения КП, находятся автомодельности для целого семейства квазиклассических коллапсирующих распределений, имеется соответствие между квазиклассическим автомодельным решением и предсказаниями вариационного подхода.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 обсуждаются общие свойства уравнения КП для сред с положительной дисперсией. Вначале в качестве примера приводится вывод уравнения КП с

помощью дефокусирующего НУШ на основе применения многомасштабного разложения (об этом методе см., например, [10]). В этом случае одномерный солитон (солитонное решение уравнения КДВ) представляет собой яму плотности, распространяющуюся со скоростью, меньшей средней скорости звука. Именно это свойство является ключевым в понимании природы неустойчивости КП [1, 2]. Далее мы обсуждаем гамильтонову структуру уравнения КП и общие свойства солитонов как стационарных точек гамильтониана при фиксированном импульсе P . Найдено, как значение гамильтониана на солитонных решениях при произвольной размерности d выражается через импульс солитонов. Эти соотношения получаются с помощью масштабных преобразований, сохраняющих P . Раздел 3 посвящен неустойчивости КП солитонов относительно длинноволновых поперечных возмущений. Вначале рассмотрена задача об устойчивости одномерных (КДВ) солитонов, ключевая по нашему мнению, с помощью метода, предложенного в работе [14]. Далее этот подход используется при анализе неустойчивости двумерных солитонов КП относительно трехмерных возмущений (аналог трехмерной неустойчивости КП). На основе этого метода была предсказана неустойчивость типа КП для серых/темных солитонов в рамках дефокусирующего НУШ [18]. Факт существования этой неустойчивости был подтвержден экспериментально, а также численно в работах [19, 20] при стационарном распространении электромагнитных волн в дефокусирующих керровских средах. В этих работах было выяснено, что нелинейная стадия этой неустойчивости приводит к образованию периодической цепочки точечных вихрей (см. также [21]).

В этом же разделе рассмотрена задача об устойчивости двумерных солитонов для дефокусирующего НУШ. Солитоны такого типа имеют ряд особенностей. Когда глубина ям плотности солитона достаточно мала, такие солитоны асимптотически совпадают с лампами. С увеличением глубины в солитоне и соответственно уменьшением его скорости V , как было впервые численно показано в [22], существует некоторое критическое значение V_{cr} , при котором плотность в центре солитона обращается в нуль. Ниже этого критического значения солитонное решение претерпевает бифуркацию, связанную с появлением двух нулей в плотности, соответствующих двум вихрям с противоположными циркуляциями. Это дипольная пара, распространяющаяся в направлении, перпендикулярном диполю. При дальнейшем уменьшении скорости солитонов эта пара

превращается в вихревую пару для двумерной гидродинамики Эйлера. Как показано в [23], все это семейство двумерных солитонов неустойчиво относительно поперечных возмущений (вдоль третьей оси z). Для малой амплитуды солитона эта неустойчивость представляет собой аналог неустойчивости КП для лампы; для солитонов, распространяющихся со скоростями меньше критической, эта неустойчивость переходит в неустойчивость Кроу, которая впервые была открыта для дипольной вихревой пары в рамках несжимаемых уравнений Эйлера [24].

В разд. 4 рассматривается вопрос о коллапсе для трехмерного уравнения КП. Показана неограниченность гамильтониана \mathcal{H} снизу, следующая из скейлинговых преобразований, сохраняющих P . Вследствие неограниченности гамильтониана излучение волн малой амплитуды из области с отрицательным значением \mathcal{H} способствует коллапсу, благодаря чему происходит формирование особенностей слабого типа. Далее представлены два аналитических подхода исследования коллапса: с помощью вариационного метода и квазиклассического приближения. Выяснено, что решение квазиклассических уравнений Уизема для сильного коллапса и анзац в рамках вариационного подхода имеют вблизи особенности одинаковую автомодельную асимптотику. В рамках квазиклассического описания найдено семейство автомодельных коллапсов. Верхняя граница этого семейства соответствует сильному коллапсу, при котором энергия, захваченная в особенность, конечна. Существование такого режима подтверждается также исходя из вариационного подхода. Другая граница коллапсирующей иерархии совпадает с автомодельным решением трехмерного уравнения КП, описывающим наиболее быстрый слабый коллапс.

В Заключение перечислены основные результаты данного обзора и обсуждены проблемы, которые остаются до сих пор нерешенными. Среди этих проблем важная относится к нахождению достаточного условия коллапса. Напомним, что для фокусирующего НУШ впервые такой критерий был получен в двумерном случае Власовым, Петрицевым и Талановым [25], а затем обобщен Захаровым на трехмерное НУШ [26]. Как для $d = 2$, так и для $d = 3$ достаточным условием коллапса является отрицательность гамильтониана \mathcal{H} .

2. ОБЩИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЯ КАДОМЦЕВА – ПЕТВИАШВИЛИ И СОЛИТОННЫЕ РЕШЕНИЯ

Рассмотрим вначале общие свойства уравнения КП с положительной дисперсией, часто называемого уравнением КП-I. Прежде всего покажем, как это уравнение выводится исходя из уравнения движения для сред с гидродинамической нелинейностью. В качестве примера рассмотрим дефокусирующее нелинейное уравнение Шредингера:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta \psi + (1 - |\psi|^2) \psi = 0. \quad (1)$$

Это уравнение записано в безразмерном виде. Применительно к газовым бозе-эйнштейновским конденсатам (БЭК) при температуре $T \rightarrow 0$ величина ψ имеет смысл волновой функции конденсата (в этом контексте уравнение (1) называется уравнением Гросса – Питаевского), $|\psi|^2$ представляет собой плотность конденсата n . В нелинейной оптике ψ – огибающая волнового пакета электрического поля в средах с дефокусирующей керровской нелинейностью.

Будем предполагать, что волновая функция стремится к 1 при $r \rightarrow \infty$, а соответственно плотность $n \rightarrow 1$. В этом случае, как хорошо известно, волны малой амплитуды имеют закон дисперсии

$$\omega = k \sqrt{1 + k^2/4}, \quad (2)$$

это так называемый спектр Боголюбова. При $k \rightarrow 0$ этот спектр преобразуется в закон дисперсии акустического типа с положительной дисперсией

$$\omega = k(1 + k^2/8 + \dots), \quad (3)$$

где скорость звука $c_s = 1$. Чтобы вывести отсюда уравнение КП из (1), рассмотрим пучок звуковых волн малой (но конечной) амплитуды, распространяющийся в основном в одном направлении (скажем, вдоль x) с малым угловым распределением ($k_{\perp}/k_x \ll 1$). Последнее означает, что для таких волновых пучков дисперсионное соотношение (3) записывается в виде

$$\omega = k_x \left[1 + \frac{k_x^2}{8} + \frac{1}{2} \left(\frac{k_{\perp}}{k_x} \right)^2 \right]. \quad (4)$$

В этом случае первый член в скобке может быть исключен с помощью галилеевского преобразования в систему координат,двигающуюся со скоростью звука вдоль оси x , так что (4) имеет стандартный для КП вид закона дисперсии:

$$\Omega = k_x \left[k_x^2/8 + \frac{1}{2} (k_{\perp}/k_x)^2 \right]. \quad (5)$$

Данный закон дисперсии учитывает как слабую положительную дисперсию, так и дифракцию в поперечном направлении. Оба эти члена в (5) становятся одного порядка, если $k_x^4 \propto k_{\perp}^2$. Именно это простое наблюдение является одним из ключевых при выводе уравнения КП.

Для вывода уравнения КП перепишем НУШ в виде системы гидродинамического типа для плотности n и фазы φ ($\psi = \sqrt{n} e^{i\varphi}$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(n \nabla \varphi) &= 0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + n - 1 &= \frac{\Delta \sqrt{n}}{2\sqrt{n}}. \end{aligned}$$

Далее к этой системе будем применять многомасштабное разложение, следуя работе [10] (см. также [18]).

Введем медленное время и медленные координаты,

$$t' = \varepsilon^3 t, \quad x' = \varepsilon(x - t), \quad r'_{\perp} = \varepsilon^2 r_{\perp},$$

и будем искать решение этой системы в виде ряда по степеням малого параметра ε ,

$$n = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^{2k} n_k(x', r'_{\perp}, t').$$

Первые два порядка легко находятся (см., например, [10, 18]). Уравнение КП-I получается в рамках этой теории возмущений как условие разрешимости третьего порядка ($\sim \varepsilon^3$):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(n_{1t} + \frac{3}{2} n_1 n_{1x} - \frac{1}{8} n_{1xxx} \right) = -\frac{1}{2} \Delta_{\perp} n_1, \quad (6)$$

где $\Delta_{\perp} = \partial_y^2 + \partial_z^2$ – поперечный оператор Лапласа (штрихи ниже опущены).

Как известно, уравнение КП (6) представляет собой многомерное обобщение одномерного уравнения КДВ ($\Delta_{\perp} = 0$). В последнем случае солитонное решение имеет вид

$$n_1 = -\frac{\nu^2}{\text{ch}^2 \nu(x + \nu^2 t/2 - x_0)}, \quad (7)$$

оно представляет собой ямки плотности ($n_1 < 0$),двигающиеся со скоростью $c_s - \nu^2/2$, меньшей скорости звука. Отметим, что это условие имеет место также и для многомерных солитонов. Это требование эквивалентно отсутствию черенковского резонанса между солитоном и линейными волнами (см., например, [27]). Таким образом, в одномерном случае скорость солитона уменьшается с увеличением амплитуды солитона. Это свойство является

ключевым для понимания происхождения неустойчивости КП [1] относительно возмущений, поперечных солитону КДВ. Как показал Кадомцев [2], эта неустойчивость имеет самофокусирующий характер. Пусть солитон промодулирован в поперечном направлении. Тогда согласно (7) области солитона с большей амплитудой будут двигаться медленнее тех участков, которые имеют меньшую амплитуду. В результате области с меньшей амплитудой будут обгонять области с повышенной амплитудой, что приведет к фокусировке фронта солитона и аккумуляции его энергии. Легко понять, что эти аргументы применимы также на нелинейной стадии неустойчивости, т. е. на стадии формирования коллапса, описываемого в рамках трехмерного уравнения КП (7) (см. следующие разделы).

2.1. Гамильтонова структура и солитоны

Прежде чем обсуждать гамильтонову структуру уравнения КП, солитоны и их устойчивость, перепишем (6) в стандартной форме, которую можно получить с помощью простых замен и перемасштабированием:

$$\frac{\partial}{\partial x} (u_t + 6uu_x + u_{xxx}) = \Delta_{\perp} u. \quad (8)$$

В одномерном случае это уравнение принимает стандартный вид, принятый для уравнения КДВ. Как и уравнение КДВ, уравнение (8) относится к гамильтоновским уравнениям

$$u_t = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$$

с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \int \left[\frac{u_x^2}{2} + \frac{(\nabla_{\perp} w)^2}{2} - u^3 \right] dr \equiv \frac{1}{2} I_1 + \frac{1}{2} I_2 - I_3, \quad (9)$$

где $w_x = u$. Здесь первый член ответствен за дисперсию волн, второй учитывает дифракцию акустического пучка в поперечном направлении, последний член описывает нелинейность акустических волн. Помимо \mathcal{H} , уравнение КП сохраняет полный импульс, x -компонента которого является положительной определенной величиной,

$$P = \frac{1}{2} \int u^2 dr.$$

Уравнение КДВ отсюда следует при $w = 0$. В переменных u солитон КДВ (7) переписывается как

$$u_s = \frac{2\kappa^2}{\text{ch}^2 \kappa (x - 4\kappa^2 t - x_0)}. \quad (10)$$

Данное решение представляет собой стационарную точку гамильтониана \mathcal{H} при фиксированном P ,

$$\delta(\mathcal{H} + VP) = 0. \quad (11)$$

Эта вариационная задача эквивалентна стационарному уравнению КДВ

$$-Vu_x + 6uu_x + u_{xxx} = 0 \quad (12)$$

с решением (10) в виде солитона, движущегося со скоростью $V = 4\kappa^2$. В многомерном случае, а именно в рамках уравнения КП (8), солитонные решения, распространяющиеся вдоль оси x с постоянными скоростями V , также являются стационарными точками \mathcal{H} при фиксированном P . В двумерном случае это локализованные по всем направлениям так называемые решения в виде лампы со степенной асимптотикой при $r \rightarrow \infty$. Впервые такие решения были обнаружены численно Петвиашвили [13]. Затем в работе [12] лампы были найдены как точные решения уравнения КП на основе применения метода обратной задачи рассеяния.

В трехмерном случае солитоны такого типа могут быть найдены численно, возможно и аналитически, с привлечением схемы Хироты [28]. Представление Хироты, как было выяснено сравнительно недавно в ряде работ (см. [29–34]), применимо к уравнению КП при произвольной размерности. Однако этот вопрос — вопрос об аналитическом нахождении солитонного решения в трехмерном случае — пока остается открытым.

Несмотря на это, для солитонов уравнения КП (8) при произвольной размерности пространства d можно установить ряд соотношений, в частности связь между значениями гамильтониана и импульса P на солитонном решении. Эти соотношения являются следствиями вариационной задачи (9), которая справедлива при произвольной размерности d . Впервые этот факт был установлен в работе [14] (см. также [3, 4]). Для этого требуется найти связи между интегралами, входящими в \mathcal{H} . Первое такое соотношение между интегралами получается, если уравнение для солитона

$$-Vu_x + 6uu_x + u_{xxx} = \Delta_{\perp} w$$

сначала умножить на w , а затем проинтегрировать по \mathbf{r} . Это дает

$$2VP + I_1 + I_2 - 3I_3 = 0. \quad (13)$$

Два других соотношения следуют из вариационной задачи (11) после применения масштабных преобразований, сохраняющих P ,

$$u(x, r_{\perp}) \rightarrow a^{-1/2} b^{(1-d)/2} u(x/a, r_{\perp}/b).$$

При этих преобразованиях \mathcal{H} становится функцией масштабных параметров a и b :

$$\mathcal{H}(a, b) = \frac{1}{2}a^{-2}I_1 + \frac{1}{2}a^2b^{-2}I_2 - a^{-1/2}b^{(1-d)/2}I_3. \quad (14)$$

В соответствии с вариационной задачей (12) на солитонном решении производные от $\mathcal{H}(a, b)$ относительно a, b должны обратиться в нуль при $a = b = 1$, что приводит к двум дополнительным соотношениям:

$$-I_1 + I_2 + \frac{1}{2}I_3 = 0, \quad (15)$$

$$-I_2 - \frac{1-d}{2}I_3 = 0. \quad (16)$$

Выражая далее I_1, I_2 и I_3 из соотношений (13), (15), (16) через P_s на солитонном решении, для \mathcal{H}_s находим

$$\mathcal{H}_s = \frac{2d-5}{7-2d}VP_s.$$

В одномерном и двумерном случаях гамильтониан на солитонном решении отрицателен, равный соответственно $-(3/5)VP_s$ и $-(1/3)VP_s$. Более того, в обоих случаях гамильтониан оказывается ограниченным снизу при фиксированном P [14] (см. также [5]) не только относительно масштабных преобразований, но и относительно возмущений общего вида. При этом \mathcal{H} достигает своего минимума на солитонном решении в одномерном и двумерном случаях. Это означает, что солитоны при $d = 1$ и 2 устойчивы по Ляпунову. В трехмерном случае ситуация обратная: гамильтониан на солитоне $\mathcal{H}_s = VP_s$ положителен, а соответствующая стационарная точка представляет собой седло (по этой причине трехмерный солитон неустойчив, см. разд. 4) и, кроме того, \mathcal{H} оказывается неограниченным снизу функционалом. Чтобы проверить последнее, достаточно рассмотреть линии наискорейшего спуска функции $\mathcal{H}(a, b)$ $a^2/b = \text{const}$. Неограниченный характер гамильтониана, обусловленный нелинейным членом, приводит к тому, что его роль с уменьшением масштабов a, b становится доминирующей по сравнению как с дисперсионным, так и с дифракционным членами, при этом $\mathcal{H} \rightarrow -\infty$. Как мы увидим в следующих разделах, неограниченность гамильтониана снизу играет весьма существенную роль в формировании сингулярности, т. е. при коллапсе.

3. НЕУСТОЙЧИВОСТЬ КАДОМЦЕВА – ПЕТВИАШВИЛИ

Неустойчивость КП для солитонов КДВ была впервые получена Кадомцевым и Петвиашвили [1,2]

в длинноволновом пределе. Здесь мы применим метод, несколько отличающийся от того, который использовали Кадомцев и Петвиашвили. Будет показано, как можно исследовать КП-неустойчивость одномерного солитона в длинноволновом пределе с помощью теории возмущений, следуя [14] (см. также [35, 36]). Отметим, что изначально этот метод был применен при исследовании устойчивости двумерных солитонов по отношению к трехмерным возмущениям. Позже он успешно использовался для задач устойчивости одномерных темных/серых солитонов относительно поперечных возмущений в рамках дефокусирующего НУШ [18], а также двумерных солитонов относительно трехмерных возмущений [23]. Впоследствии этот подход показал свою эффективность при исследовании устойчивости одномерных солитонов, распространяющихся в пограничном слое [37], в рамках уравнения Шриры [38] (двумерное обобщение уравнения Бенджамина – Оно).

3.1. Неустойчивость солитонов Кортвега – де Вриза

Начнем наш анализ с устойчивости одномерных солитонов.

Решение в уравнении КП (8) будем искать в виде

$$u = u_s(x - Vt) + \psi(x - Vt, r_\perp, t),$$

где ψ предполагается малым возмущением по сравнению с солитоном КДВ u_s (10).

Переходя далее в систему координат, двигающуюся со скоростью V , и линеаризуя уравнение (8) на фоне u_s , для возмущения

$$\psi(x, r_\perp, t) = \varphi(x) \exp(-i\omega t + ikr_\perp)$$

приходим к следующей спектральной задаче:

$$-i\omega \frac{\partial}{\partial x} \varphi + k^2 \varphi = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-V + 6u_s + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi \equiv L\varphi.$$

Ищем решение этого уравнения в длинноволновом пределе, разлагая φ и ω в ряды по малому k :

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_0 + \varphi_1 + \varphi_2 + \dots, \\ \omega &= \omega_1 + \omega_2 + \dots \end{aligned}$$

В главном порядке

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-V + 6u_s + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi_0 \equiv L\varphi_0 = 0.$$

Сравнивая с (12), легко увидеть, что это уравнение выполняется для $\varphi_0 = \partial u_s / \partial x$. Эта нейтрально

устойчивая мода соответствует малому сдвигу солитона как целого.

В следующем порядке имеем

$$-i\omega_1 \frac{\partial}{\partial x} \varphi_0 = L\varphi_1.$$

Чтобы найти φ_1 , рассмотрим уравнение (12), производная по V которого записывается в виде

$$-\frac{\partial u_s}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-V + 6u_s + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \frac{\partial u_s}{\partial V}.$$

Отсюда из сравнения двух последних уравнений заключаем, что

$$\varphi_1 = i\omega_1 \frac{\partial u_s}{\partial V}.$$

В результате второй порядок записывается как

$$-i\omega_1 \frac{\partial}{\partial x} \varphi_1 + k^2 \varphi_0 = L\varphi_2. \quad (17)$$

Условие разрешимости этого уравнения (для φ_2) состоит в ортогональности левой части этого уравнения собственной функции χ с нулевым собственным значением оператора, сопряженного к L ,

$$\left(-V + 6u_s + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \chi = 0.$$

Легко видеть, что

$$\frac{\partial}{\partial x} \chi = u_s,$$

т. е. χ есть гидродинамический потенциал w_s солитона. Отсюда, подставляя

$$\varphi_0 = \frac{\partial}{\partial x} u_s, \quad \varphi_1 = i\omega_1 \frac{\partial u_s}{\partial V}$$

в (17) и затем скалярно умножая на χ , получаем

$$\omega_1^2 \int \chi \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_s}{\partial V} dx + k^2 \int \chi \frac{\partial}{\partial x} u_s = 0.$$

Интегрирование по частям в стоящих здесь двух интегралах дает

$$\omega^2 = -k^2 \frac{2P}{\partial P / \partial V}.$$

Для солитона КДВ импульс $P \propto V^{3/2}$, откуда окончательно имеем

$$\omega^2 = -\frac{4V}{3} k^2 < 0. \quad (18)$$

Таким образом, мы приходим к неустойчивости. Это и есть неустойчивость Кадомцева–Петвиашвили.

Следует отметить, что точное выражение для инкремента этой неустойчивости было найдено Захаровым [40] с помощью метода обратной задачи рассеяния (МОЗР), примененного к уравнению КП (8).

Причина этой неустойчивости, как объяснил Кадомцев в своей книге [2], связана с тем, что солитоны звуковых волн с положительной дисперсией представляют собой ямы плотности, скорость которых уменьшается с увеличением амплитуды солитона (см., например, уравнение (7)). Как следствие, если такой солитон модулируется в поперечном направлении, то области с большей амплитудой будут отставать от областей с меньшей амплитудой. Это приводит к неустойчивости самофокусирующего типа, развитие которой ведет к фокусировке фронта солитона и аккумуляции волновой энергии.

Эти аргументы справедливы для всех упомянутых выше неустойчивостей типа КП, а именно, неустойчивостей одномерных темных/серых солитонов в рамках дефокусирующего НУШ относительно поперечных возмущений [18], двумерных солитонов на фоне трехмерных возмущений [23], а также для одномерных солитонов, распространяющихся в пограничном слое [37], в рамках так называемого уравнения Шриры [38]. Поскольку неустойчивость КП относится к самофокусирующему типу, такая аргументация может быть использована и на нелинейной стадии этой неустойчивости в рамках трехмерного уравнения КП с положительной дисперсией. Следует отметить, что в двумерном случае наличие устойчивых двумерных солитонов — лампов — существенно влияет на развитие неустойчивости КП. Как показано в [39], неустойчивость на нелинейной стадии приводит к отщеплению от солитона цепочки лампов, которые, в свою очередь, также испытывают неустойчивость относительно поперечных возмущений.

3.2. Неустойчивость двумерных КП солитонов

Рассмотрим теперь, следуя [14], задачу о линейной устойчивости лампа относительно возмущений по третьей координате z . Решение в виде лампа $u = u_s(x - Vt, y)$, распространяющегося со скоростью V вдоль оси x , удовлетворяет стационарному уравнению КП,

$$\left[-V \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^4}{\partial x^4} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] u_s + 3 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_s^2 = 0. \quad (19)$$

Как отмечалось выше, двумерное солитонное решение этого уравнения впервые численно было полу-

чено Петвиашвили [13]. Позднее точное решение в виде лампа было найдено в [12] с помощью метода обратной задачи рассеяния.

Для решения линейной задачи устойчивости лампа будем считать возмущение малым, зависящим от времени и координаты z экспоненциально:

$$\psi = \psi(x - Vt, y) \exp(-i\omega t + ikz).$$

Тогда линеаризация (8) на фоне стационарного решения уравнения (8) приводит к следующей спектральной задаче:

$$A\psi - i\omega \frac{\partial \psi}{\partial x} = -k^2 \psi, \quad (20)$$

где оператор

$$A = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [-V + 6u_s] + \frac{\partial^4}{\partial x^4} - \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (21)$$

Как и в предыдущем примере, решение этой задачи на собственные значения будем искать в длинноволновом пределе, $k \rightarrow 0$, в виде ряда

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2 + \dots$$

Здесь ψ_0 определяется из уравнения

$$A\psi_0 = 0,$$

т.е. ψ_0 есть нейтрально устойчивая мода, которую можно представить как суперпозицию двух бесконечно малых сдвигов солитона как целого вдоль направлений x и y ,

$$\psi_0 = C_1 \frac{\partial u_s}{\partial x} + C_2 \frac{\partial u_s}{\partial y}.$$

Оба сдвига, очевидно, независимые и могут быть рассмотрены по отдельности.

В следующем порядке для первой моды имеем

$$A\psi_{01} - i\omega \frac{\partial}{\partial x} u_{sx} = 0.$$

Как и в одномерном случае, дифференцирование стационарного уравнения (19) по V позволяет найти ψ_{11} :

$$\psi_{11} = i\omega \frac{\partial u_s}{\partial V}.$$

Следующий порядок записывается как

$$A\psi_2 = -\omega^2 \frac{\partial^2 u_s}{\partial x \partial V} - k^2 \frac{\partial u_s}{\partial x}.$$

Чтобы найти $\omega(k)$ из этого уравнения, нужно воспользоваться условием разрешимости — ортогональностью правой части этого уравнения к собственной функции ϕ_0 с нулевым собственным значением для оператора, сопряженного к A . Легко найти, что $\phi_0 = w_s$. Отсюда имеем

$$\omega^2 \int w_s \frac{\partial^2 u_s}{\partial x \partial V} dx dy = -k^2 \int w_s \frac{\partial u_s}{\partial x} dx dy.$$

Интегрирование по частям дает

$$\omega^2 \frac{\partial P}{\partial V} = -2k^2 P.$$

Для решения в виде лампа $P \sim V^{1/2}$. В результате мы получаем неустойчивость:

$$\omega^2 = -4k^2 V < 0.$$

Для нейтрально устойчивой моды $\partial u_s / \partial y$ такого рода процедура приводит к устойчивости.

3.3. Неустойчивость

Кадомцева – Петвиашвили серых/темных солитонов

Для НУШ (1) решение в виде серого/темного солитона $\psi_0(x - \kappa t)$ находится в виде уединенной одномерной волны, двигающейся со скоростью κ . В этом случае $\psi_0(x - \kappa t)$ удовлетворяет следующему обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$-i\kappa \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial x^2} + (1 - |\psi_0|^2) \psi_0 = 0, \quad (22)$$

$$|\psi_0|^2 \rightarrow 1 \text{ при } |x| \rightarrow \infty.$$

Его решение записывается как

$$\psi_0 = \nu \operatorname{th} \nu(x - \kappa t - x_0) + i\kappa, \quad \kappa^2 + \nu^2 = 1. \quad (23)$$

Когда $\kappa = 0$, это решение представляет собой темный солитон (или доменную стенку). Если $\kappa \neq 0$, мы имеем серые солитоны. Когда κ стремится к скорости звука (равной в наших переменных 1), эти решения трансформируются в солитоны КДВ (7).

Для решения задачи устойчивости таких солитонов будем следовать работе [18]. Предполагая малые возмущения $\phi_1 = \delta\psi$, $\phi_2 = \delta\psi^*$, распространяющиеся со скоростью κ и зависящие от времени и координаты y экспоненциально, $\propto \exp(-i\omega t +iky)$, приходим к следующей спектральной задаче для матричного дифференциального оператора:

$$\omega \sigma_3 u - \frac{1}{2} k^2 u + Lu = 0, \quad (24)$$

где

$$\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

— матрица Паули,

$$u = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

и

$$L = -i\kappa\sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \begin{pmatrix} 2|\psi_0|^2 - 1 & \psi_0^2 \\ \psi_0^{*2} & 2|\psi_0|^2 - 1 \end{pmatrix}$$

— эрмитовский оператор.

Решение этой задачи на собственные значения будем искать, как и прежде, в длинноволновом пределе ($k \rightarrow 0$) в виде степенных рядов относительно k ,

$$u = u_0 + u_1 + u_2 + \dots, \quad \omega = \omega_1 + \omega_2 + \dots$$

Здесь u_0 — нейтрально устойчивая мода, $Lu_0 = 0$, соответствующая бесконечно малым сдвигам солитона как целое,

$$u_0 = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_0^* \end{pmatrix}.$$

В следующем порядке имеем

$$\omega\sigma_3 u_0 + Lu_1 = 0.$$

Что касается u_1 , то оно находится с помощью того же трюка, который мы использовали в предыдущем разделе. Дифференцируя уравнение (22) по скорости κ , получаем

$$u_1 = i\omega \frac{\partial}{\partial \kappa} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_0^* \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Если подставить (23) в это выражение, то получится, что u_1 стремится к постоянному значению при $|x| \rightarrow \infty$. На первый взгляд поэтому кажется, что u_1 принадлежит непрерывному спектру и не может обеспечить неустойчивость, поскольку возмущения из непрерывного спектра, очевидно, устойчивы. На самом деле, как было продемонстрировано в [18], в этом случае необходимо учитывать более аккуратно асимптотическое поведение этой функции на бесконечности на основе точного линейризованного уравнения (24) путем решения задачи сшивки асимптотик. Проведенный анализ [18] дает, что u_1 при $|x| \rightarrow \infty$ затухает экспоненциально с показателем $\sim k$

и по этой причине принадлежит связанному состоянию.

Второй порядок записывается как

$$\omega\sigma_3 u_1 - \frac{1}{2}k^2 u_0 = -Lu_2.$$

Разрешимость этого уравнения приводит к следующей зависимости $\omega(k)$:

$$\omega \langle u_0 | \sigma_3 | u_1 \rangle = \frac{k^2}{2} \langle u_0 | u_0 \rangle,$$

что дает неустойчивость

$$\omega^2 = -\frac{k^2 \nu^2}{3} < 0.$$

Отметим, что при малых $\nu^2 = 1 - \kappa^2 \ll 1$ инкремент этой неустойчивости совпадает с найденным для солитона КДВ (ср. с (18)). Данная неустойчивость представляет собой естественное продолжение неустойчивости КП для серых (темных) солитонов. В заключение этого раздела необходимо отметить, что неустойчивость темных солитонов была подтверждена экспериментально, а также численно [19, 20]. В этих работах, в частности, показано, что нелинейная стадия неустойчивости солитона приводит к образованию дорожки точечных вихрей, аналогичных вихревой дорожке фон Кармана в жидкостях.

3.4. Двумерные солитоны НУШ и их устойчивость

В заключение этого раздела рассмотрим двумерные солитоны НУШ в рамках уравнения (1). Эти солитоны имеют много общих свойств с решением в виде лампов.

Мы ограничимся рассмотрением только осесимметричных солитонов

$$\psi_0(x', y) = \psi_0(x', -y), \quad x' = x - Vt,$$

которые представляют собой стационарные точки гамильтониана \mathcal{H} при фиксированном полном импульсе P (очевидно, имеющим только одну ненулевую x -проекцию):

$$\delta(H - VP) = 0, \quad (26)$$

где

$$H = \frac{1}{2} \int [|\nabla\psi|^2 + (|\psi|^2 - 1)^2] dx dy, \quad (27)$$

$$P = \frac{i}{2} \int \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx dy. \quad (28)$$

Пусть ε есть энергия солитона — значение гамильтониана на солитонном решении, и P — его импульс. Тогда, согласно (26), скорость солитона V записывается через ε и P в следующем виде:

$$V = \frac{\partial \varepsilon}{\partial P}. \tag{29}$$

Вариационная задача (26) позволяет так же, как для лампов, выразить все интегралы в (27) на солитонном решении через ε и P (28).

Для этого выполним два независимых масштабных преобразования вдоль осей x и y :

$$\psi_0(x, y) \rightarrow \psi_0(ax, y), \quad \psi_0(x, y) \rightarrow \psi_0(x, by),$$

где a и b — скейлинговые параметры. Отсюда благодаря (26) легко получить два соотношения:

$$\frac{\partial}{\partial a}(H - VP)|_{a=1} = \frac{\partial}{\partial b}(H - VP)|_{b=1} = 0,$$

из которых следуют значения интегралов на солитонном решении:

$$\begin{aligned} \int \left| \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx dy &= \varepsilon, \\ \int \left| \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|^2 dx dy &= \varepsilon - VP, \\ \int (|\psi|^2 - 1)^2 dx dy &= VP. \end{aligned}$$

Сравнивая с (29), отсюда мы получаем неравенство

$$\frac{\varepsilon}{P} > \frac{\partial \varepsilon}{\partial P},$$

которое для линейных волн в соответствии со спектром Боголюбова (2) имеет противоположный знак,

$$\frac{\omega}{k} < \frac{\partial \omega}{\partial k}.$$

Отметим еще раз, что скорость солитона должна быть меньше минимальной фазовой скорости линейных волн, в нашем случае это скорость звука ($c_s = 1$). Напомним, что это требование эквивалентно отсутствию черенковского резонанса между солитоном и линейными волнами.

Легко видеть, что вариационная задача (26) сводится к нахождению решения стационарного уравнения для солитонов

$$-iV \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + \frac{1}{2} \nabla^2 \psi_0 + (1 - |\psi_0|^2) \psi_0 = 0. \tag{30}$$

Когда ямы плотности (интенсивности) малы, но $c_s - V > 0$, решение этого уравнения будет приближаться к двумерному солитону КП (лампу) и соответственно уравнение (30) переходит в стационарное уравнение КП (19). Отсюда сразу можно сделать вывод, что эти двумерные солитоны в пределе мелких ям будут подвержены КП-неустойчивости относительно модуляций вдоль направления z . Для большей амплитуды солитона данный вопрос требует дополнительного анализа.

Увеличение глубины этих ям и соответственно уменьшение скорости солитона V , как впервые было численно показано в работе [22], происходит вплоть до некоторого критического значения V_{cr} . Для этого значения скорости плотность в центре солитона обращается в нуль. Ниже этого критического значения солитонное решение претерпевает бифуркацию, связанную с появлением двух нулей плотности, соответствующих двум вихрям с противоположными циркуляциями. Это дипольная пара, распространяющаяся в направлении, перпендикулярном диполю. При дальнейшем увеличении скорости солитона эта пара нулей превращается в вихревую пару для двумерной гидродинамики Эйлера.

Покажем теперь, следуя [23], что все семейство двумерных солитонов неустойчиво по отношению к поперечным (относительно оси z) возмущениям. Очевидно, что при малой амплитуде солитона эта неустойчивость совпадает с КП-неустойчивостью лампы в полном согласии с результатами предыдущих разделов. Для солитонов, распространяющихся со скоростями ниже критической, эта неустойчивость с ростом расстояния между вихрями переходит в неустойчивость, открытую впервые Кроу для диполей двух точечных вихрей в случае идеальных несжимаемых жидкостей [24].

В длинноволновом пределе инкремент для всего семейства солитонных решений находится по той же схеме, что и выше. Для малых возмущений, распространяющихся со скоростью V , которые в этой системе отсчета зависят от z и t экспоненциально, $\sim \exp(-i\omega t + ikz)$, мы приходим к следующей задаче на собственные значения:

$$\omega \sigma_z u - \frac{1}{2} k^2 u + Lu = 0, \tag{31}$$

где вместо второй производной по x в операторе L для спектральной задачи (24) стоит оператор Лапласа относительно x и y :

$$L = -ik\sigma_z \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta - \begin{pmatrix} 2|\psi_0|^2 - 1 & \psi_0^2 \\ \psi_0^{*2} & 2|\psi_0|^2 - 1 \end{pmatrix}.$$

В этом случае, как и раньше, ищем решение (31) в виде степенных рядов относительно малых k :

$$u = u_0 + u_1 + u_2 + \dots, \quad \omega = \omega_1 + \omega_2 + \dots$$

В нулевом приближении, $Lu_0 = 0$, мы имеем две безразлично устойчивых моды, соответствующих двум независимым малым сдвигам солитона,

$$u_0 = C_1 u_{01} + C_2 u_{02},$$

где

$$u_{01} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_0^* \end{pmatrix}, \quad u_{02} = \frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_0^* \end{pmatrix},$$

C_1 и C_2 — константы.

Уравнение следующего порядка для первой моды, соответствующей малому сдвигу u_{01} ,

$$\omega \sigma_3 u_{01} + Lu_{11} = 0,$$

имеет решение, аналогичное (25),

$$u_1 = i\omega \frac{\partial}{\partial V} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_0^* \end{pmatrix}.$$

Последующая процедура нахождения инкремента, аналогичная предыдущей, дает следующее выражение для ω^2 :

$$\omega^2 = \frac{\varepsilon}{\partial P / \partial V} k^2.$$

Как было показано аналитически в работе [23], производная $\partial P / \partial V$ отрицательна в двух предельных случаях: для лампы и для солитонов с малыми скоростями $V \ll c_s = 1$. В первом случае

$$\gamma^2 = 2(1 - V)k^2 > 0,$$

что совпадает с квадратом инкремента неустойчивости для лампы. Для малых скоростей $V \rightarrow 0$ расстояние L между вихрями растет пропорционально V^{-1} , а энергия $\varepsilon \approx 2\pi \log(1/V)$. Тогда из определения скорости (29) следует отрицательность искомой производной: $\partial P / \partial V = -2\pi V^{-2}$. В результате в этом пределе мы получаем неустойчивость с инкрементом γ , квадрат которого

$$\gamma^2 = 2(kV)^2 \log(1/V) > 0.$$

Этот инкремент совпадает с выражением для инкремента неустойчивости Кроу [24] для двух антипараллельных точечных вихрей для идеальных несжимаемых жидкостей.

В общем случае, согласно численным результатам [22], производная $\partial P / \partial V$ отрицательна для всего семейства двумерных солитонов.

Таким образом, две неустойчивости, т. е. неустойчивости КП и Кроу, в некотором смысле аналогичны друг другу. Неустойчивость КП при уменьшении скорости солитона переходит в неустойчивость Кроу, и поэтому эти неустойчивости следует объединить. Обе эти неустойчивости относятся к самофокусировочному типу.

В заключение этого раздела хотелось бы отметить, что неустойчивость типа КП может быть получена также для одномерных солитонов [37] в рамках так называемого уравнения Шриры [38], описывающего длинноволновые нелинейные возмущения в пограничном слое.

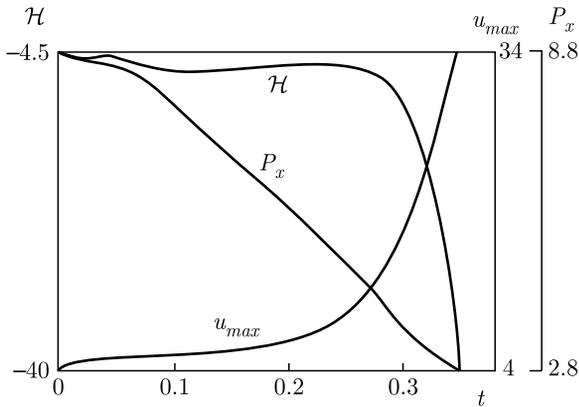
4. КОЛЛАПС

Как было показано в разд. 2, гамильтониан (9) для трехмерного уравнения КП с положительной дисперсией при фиксированном P представляет собой неограниченный снизу функционал, что следует из скейлинговых преобразований для $\mathcal{H}(a, b)$ (14). Неограниченность \mathcal{H} возникает на малых масштабах благодаря нелинейному члену. Хорошо известно (см., например, обзор [5]), что неограниченность гамильтониана для нелинейных волновых систем является одним из основных критериев возникновения коллапса. Коллапс в этом случае можно понимать как процесс падения частицы в самосогласованном неограниченном потенциале.

Обратим внимание на то, что при масштабных преобразованиях вдоль парабол $b \propto a^2$ первые два члена в (14) ведут себя как a^{-2} , а кубический член, ответственный за нелинейность, меняется пропорционально $a^{-5/2}$. По этой причине возможный коллапс не является критическим — он должен быть слабым, как мы увидим ниже, соответствует автономному коллапсу. В таких режимах излучение волн малой амплитуды из области коллапса способствует коллапсу, что опять-таки связано с неограниченностью \mathcal{H} .

Чтобы это показать, рассмотрим некоторую область Ω с отрицательным гамильтонианом, $\mathcal{H}_\Omega < 0$. Используя теорему о среднем значении, мы можем записать оценку для максимального значения $|u|_{max}$ в этой области:

$$\int_{\Omega} u^3 d\mathbf{r} \leq |u|_{max} \int_{\Omega} u^2 d\mathbf{r}.$$



Зависимости гамильтониана \mathcal{H} , P_x и максимальной амплитуды от времени

Используя это неравенство при выполнении условия $\mathcal{H}_\Omega < 0$, можно получить следующую оценку для $|u|_{max}$ [4]:

$$|u|_{max} \geq \frac{|\mathcal{H}_\Omega|}{2P_\Omega}. \quad (32)$$

Отсюда видно, что за счет излучения волн из этой области отношение в правой части этого неравенства со временем будет только расти. Во-первых, излученные волны уносят положительную часть гамильтониана, поскольку вдали от этой области они становятся линейными, для которых нелинейность стремится к нулю. Это приводит к уменьшению \mathcal{H}_Ω (т. е. гамильтониан становится более отрицательным из-за неограниченности \mathcal{H}) и, соответственно, увеличению $|\mathcal{H}_\Omega|$. Во-вторых, в то же время P_Ω как положительная величина уменьшается. Отсюда следует, что отношение в (32) растет, а значит, увеличивается $|u|_{max}$. Этот процесс, подобный испарению капель воды, приводит к формированию слабых сингулярностей, когда энергия захваченных в особенность звуковых волн E (с точностью до постоянного множителя совпадающая с P) формально в момент коллапса обращается в нуль.

Численный эксперимент [3, 4] по моделированию звукового коллапса полностью подтвердил, что излучение из области каверны способствует коллапсу. В этих численных экспериментах для цилиндрически-симметричных распределений ($P_\perp = 0$) ставились нулевые граничные условия для u по r и x , которые в силу нелокальности уравнения КП не сохраняют ни \mathcal{H} , ни P_x . Это позволило выяснить, как излучение из области коллапса влияет на изменения гамильтониана, импульса и максимального значения u .

На рисунке представлены зависимости гамильтониана \mathcal{H} и P_x , вычисленные по области интегрирования, и максимальной амплитуды от времени. Видно, что со временем происходит уменьшение импульса P_x и увеличение $|\mathcal{H}|$ при одновременном росте $\max_r u$, это как раз свидетельствует о том, что коллапс является слабым.

Таким образом, можно сказать, что излучение волн из области коллапса способствует коллапсу, ускоряет его, что приводит к образованию слабых особенностей.

4.1. Вариационный анзац

Все изложенные выше соображения, однако, не дают ответа на главный вопрос о конечности времени формирования особенности. Мы приведем некоторые аргументы в пользу конечности этого времени, используя так называемый вариационный метод. Следует отметить, что этот подход является достаточно грубым. Например, в задаче о релаксации солитонов в одномерном НУШ с фокусирующей нелинейностью, допускающим интегрирование методом обратной задач рассеяния, применение вариационного подхода дает неправильный ответ. Вместо колебаний солитона, предсказываемых при применении этого метода, точное решение дает затухающие со временем колебания релаксационного типа [41]. Однако в задаче коллапса для трехмерного НУШ оказалось, что применение вариационного подхода продемонстрировало качественно правильное поведение для описания режима сильного коллапса [6].

Как известно, действие для уравнения КП (8) может записываться как

$$S = \int \left[\frac{1}{2} w_t w_x - \frac{1}{2} w_{xx}^2 - \frac{1}{2} (\nabla_\perp w)^2 + w_x^3 \right] dt dr, \quad (33)$$

так что $\delta S = 0$ эквивалентно уравнению (8). Тестовую функцию выберем в автомодельном виде:

$$w = a^{1/2} b^{-1} f(\xi_\parallel, \xi_\perp), \quad u = a^{-1/2} b^{-1} U(\xi_\parallel, \xi_\perp), \quad (34)$$

где предполагается, что скейлинговые параметры a и b являются неизвестными функциями времени t , $\xi_\parallel = x/a$ и $\xi_\perp = r_\perp/b$ — автомодельные переменные. Функция $U(\xi_\parallel, \xi_\perp) = \partial f / \partial \xi_\parallel$ есть решение (8) для трехмерного солитона с известными значениями интегралов I_1 , I_2 и I_3 , определяемых (13), (15), (16):

$$I_1 = 6VP, \quad I_2 = I_3 = 4VP.$$

Подставляя тестовую функцию (34) в (33) и усредняя по пространственным переменным, получаем

следующее выражение для лагранжиана в переменных a и b :

$$L = a \frac{b_t}{b} M - \mathcal{H}(a, b).$$

Здесь константа

$$M = \frac{1}{2} \int f \xi_{\perp} \nabla_{\xi_{\perp}} U d^3 \xi,$$

а $\mathcal{H}(a, b)$ — уже известная функция, задаваемая (14) при $d = 3$, исходя из скейлинговых преобразований.

Для данного лагранжиана уравнения Эйлера–Лагранжа записываются в виде

$$M a_t = -b \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial b} = a^2 b^{-2} I_2 - a^{-1/2} b^{-1} I_3, \quad (35)$$

$$M b_t = b \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a} = \beta \left[-a^{-3} I_1 + a b^{-2} I_2 + \frac{1}{2} a^{-3/2} b^{-1} I_3 \right]. \quad (36)$$

Эти уравнения по построению имеют стационарное решение в виде трехмерного солитона при $a = b = 1$. Линейная устойчивость этого решения определяется из линеаризованных уравнений (35), (36) для малых возмущений α, β ($a = 1 + \alpha, b = 1 + \beta$):

$$\begin{aligned} M \alpha_t &= VP(10\alpha - 4\beta), \\ M \beta_t &= VP(19\alpha - 10\beta). \end{aligned}$$

Отсюда следует, независимо от знака M , неустойчивость этого решения с инкрементом

$$\gamma = \pm 2\sqrt{6} \frac{VP}{M}.$$

Собственный вектор неустойчивой моды имеет один и тот же знак для обоих компонентов α и β . Таким образом, солитонное решение представляет собой седловую точку.

Рассмотрим теперь, что происходит на нелинейной стадии этой неустойчивости. Как упоминалось выше, при фиксированном импульсе P гамильтониан трехмерного уравнения КП представляет собой неограниченный снизу функционал. В данном случае мы имеем дело с неограниченной снизу функцией $\mathcal{H}(a, b)$.

Ввиду гамильтоновости система (35), (36) сохраняет энергию $E = \mathcal{H}(a, b)$, что позволяет выразить b через a :

$$b^{-1} = \frac{1}{I_2 a^2} \left[a^{-1/2} I_3 \pm \sqrt{a^{-1} I_3^2 - I_1 I_2 + 2a^2 E I_2} \right],$$

и далее после исключения b определить зависимость $a(t)$ вблизи особенности для обоих корней. При $a \rightarrow 0$

$$b_1 = \frac{I_2}{2I_3} a^{5/2}, \quad b_2 = \frac{2I_3}{I_1} a^{3/2}.$$

Отсюда для первого корня имеем

$$M a_t = \frac{2I_3^2}{I_2 a^3}.$$

Это приводит к сингулярному решению

$$a \rightarrow (t_0 - t)^{1/4}, \quad (37)$$

если константа $M < 0$. В этом случае вблизи момента коллапса $t = t_0$ в $\mathcal{H}(a, b)$ дисперсионный и нелинейный члены компенсируют друг друга. Для положительных M решение с особенностью отсутствует.

Для другого корня $b = b_2$ при $a \rightarrow 0$ уравнение (35) асимптотически преобразуется к следующему:

$$M a_t = -\frac{I_1}{2a^2},$$

которое при $M > 0$ имеет решение коллапсирующего вида

$$a \rightarrow (t_0 - t)^{1/3}.$$

Для этой асимптотики нелинейный член в $\mathcal{H}(a, b)$ и дифракционный член сокращаются.

Ниже будет показано, что режим (37) реализуется для квазиклассических начальных условий.

4.2. Квазиклассический коллапс

Рассмотрим начальные распределения u , при которых можно пренебречь как дисперсией, так и дифракцией. Тогда, по крайней мере вначале, временное поведение u будет определяться уравнением

$$u_t + 6uu_x = 0,$$

где u зависит от \mathbf{r}_{\perp} как от параметра. Как известно, это уравнение описывает опрокидывание волны или градиентную катастрофу, возникающую в некоторой точке $r = r_0$. Вблизи точки опрокидывания наше предположение относительно дисперсии и дифракции становится несправедливым, и мы должны учитывать как дифракционные, так и дисперсионные члены. В результате за счет таких линейных эффектов вблизи этой точки будет развиваться осциллирующая пространственная структура. Напомним, что в одномерном случае такого рода структура имеет вид расплывающегося со временем солитонного пуга [42], характерного для бесстолкновительных ударных волн.

В трехмерном случае, как мы выяснили, все типы солитонов неустойчивы. Одномерные солитоны неустойчивы по отношению к поперечным модуляциям благодаря неустойчивости КП. То же утверждение верно для двумерных и трехмерных солитонов [14]. Нелинейной стадией этой неустойчивости должен быть коллапс. Это означает, что вместо пучка солитонов в одномерной геометрии следует ожидать образования осциллирующих структур, содержащих коллапсирующие солитоны.

Для описания структур такого типа нужно обратиться к квазиклассической теории. Решение в этом случае следует представлять в виде

$$u = u(r, t, \Phi(\mathbf{r}, t)),$$

где u как функция фазы Φ является 2π -периодической, а относительно двух первых аргументов r и t — медленно меняющейся функцией. Зависимость $\Phi(r, t)$ предполагается такой, что ее производные Φ_t и $\nabla\Phi$ являются также медленно меняющимися функциями от \mathbf{r} и t .

Вначале рассмотрим линейный случай, когда u подчиняется линейному уравнению КП:

$$\frac{\partial}{\partial x}(u_t + u_{xxx}) = \Delta_{\perp} u. \quad (38)$$

В этой ситуации можно ограничиться зависимостью в виде одной гармоники:

$$u = Ae^{i\Phi} + \text{с.с.}$$

Тогда первый порядок в квазиклассическом приближении дает уравнение Гамильтона – Якоби,

$$\Phi_t + \omega(\nabla\Phi) = 0, \quad (39)$$

где

$$\omega = \omega(k) = -k_x^3 - \frac{k_{\perp}^2}{k_x}$$

есть закон дисперсии (38), а $\mathbf{k} = \nabla\Phi$ — соответственно волновой вектор.

В следующем порядке получаем уравнение непрерывности для A^2 (здесь для простоты амплитуда A предполагается действительной величиной),

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{2A} \text{div}(A^2 \mathbf{v}) = 0, \quad (40)$$

где $\mathbf{v} = \partial\omega(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ — групповая скорость (ср. с [6, 43]).

Из-за нелинейности исходного уравнения (8) необходимо учитывать все гармоники,

$$u = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{in\Phi},$$

$$A_n = A_{-n} = A_n^*.$$

В результате вместо (40) и (39) для $n \neq 0$ получаем

$$\frac{\partial A_n}{\partial t} + \frac{1}{2A_n} \text{div}(A_n^2 \mathbf{v}_n) + 3 \frac{\partial}{\partial x} s_n = 0, \quad (41)$$

$$\Phi_{nt} + \omega(\nabla\Phi_n) + 3\Phi_{nx} \frac{s_n}{A_n} = 0, \quad (42)$$

где

$$\Phi_n = n\Phi, \quad s_n = \sum_{n=n_1+n_2} A_{n_1} A_{n_2}.$$

Для нулевой гармоники возникает отдельное уравнение,

$$\frac{\partial A_0}{\partial t} + 3 \frac{\partial}{\partial x} \langle u^2 \rangle = 0. \quad (43)$$

Здесь

$$\langle u^2 \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n^2 = s_0.$$

Следует отметить, что эта бесконечная система является переопределенной: из (41), (42) для каждого $n, m \neq 0$ следуют соотношения

$$\pi_n(r, t) = \pi_m(r, t), \quad (44)$$

где

$$\pi_n(r, t) = n^2 \Phi_x^2 - \frac{s_n}{A_n}.$$

На первый взгляд кажется, что эти уравнения весьма сложны и вряд ли могут быть проанализированы. В действительности данная система уравнений полностью эквивалентна уравнениям, которые следуют из процедуры Уизема [42, 44] для случая КДВ. Прежде всего, легко найти число независимых функций с учетом всех ограничений (44). Это всего лишь три функции, в качестве которых мы можем, например, выбрать $\langle u \rangle$, $\langle u^2 \rangle$ и Φ . Более того, условия (44) можно разрешить, если представить u с помощью эллиптической функции Вейерштрасса в виде кноидальной волны (см., например, [45]). В результате можно получить обычную форму уравнений Уизема. Однако, по нашему мнению, уравнения (41), (43) для исследования квазиклассического коллапса представляются более удобными, чем уравнения Уизема.

4.3. Иерархия коллапсов

Будем искать решение системы (41)–(43) в автономном виде:

$$A_n(r, t) = (t_0 - t)^{-\alpha} f_n \left(\frac{x}{(t_0 - t)^{\beta}}, \frac{r_{\perp}}{(t_0 - t)^{\gamma}} \right), \quad (45)$$

$$\Phi(r, t) = \lambda^2 \int \frac{dt}{(t_0 - t)^{\kappa+1}} + (t_0 - t)^{-\kappa} \varphi \left(\frac{x}{(t_0 - t)^\beta}, \frac{r_\perp}{(t_0 - t)^\gamma} \right), \quad (46)$$

где t_0 — время коллапса, константа $\lambda^2 > 0$, α, β, γ и κ — неизвестные показатели.

После подстановки (45), (46) в систему (41)–(43) легко найти, что только один показатель является свободным (скажем, пусть это будет α), в этом случае все остальные индексы выражаются через него:

$$\beta = 1 - \alpha, \quad \gamma = 1 - \alpha/2, \quad \kappa = 3\alpha/2 - 1.$$

Таким образом, мы имеем целое семейство автомодельных решений (более точно — автомодельных подстановок). Только некоторые из этих решений имеют физический смысл. Согласно (45), (46), продольный размер коллапсирующей области (каверны) и ее поперечный размер пропорциональны соответственно $(t_0 - t)^\beta$ и $(t_0 - t)^\gamma$. Физическое требование состоит в том, что полный импульс каверны P (фактически это энергия звуковых волн с точностью до постоянного множителя) во время коллапса благодаря излучению может только уменьшаться:

$$P_{cav} = \frac{1}{2} \int_{cav} u^2 d^3r \propto (t_0 - t)^{3-4\alpha},$$

т.е. $\alpha \leq 3/4$. Отсюда видно, что режиму сильного коллапса будет соответствовать $\alpha = 3/4$. Следует отметить, что автомодельность для данного типа коллапсов та же самая, что и для асимптотики (37) в случае вариационного анзаца. Это дает основание считать, что такой режим может существовать. Все остальные коллапсы являются слабыми.

Для автомодельного семейства (45), (46) нижняя граница определяется исходя из квазиклассического критерия. Последнее означает, что отношение между характерным периодом, $\sim \omega^{-1} = (\partial_t \Phi)^{-1}$, и характерным временем изменения амплитуды $\sim (t_0 - t)$, или отношение длины волны $k_x^{-1} = (\partial_x \Phi)^{-1}$ к характерному пространственному размеру амплитуды, должны быть большими ($\gg 1$). Оба эти отношения приводят к одному и тому же критерию:

$$\omega(t_0 - t) \propto (t_0 - t)^{1-3\alpha/2}, \\ k_x(t_0 - t)^{1-\alpha} \propto (t_0 - t)^{1-3\alpha/2}.$$

Отсюда видно, что при $\alpha > 2/3$ критерий квазиклассичности улучшается по мере приближения к точке коллапса. Значение $\alpha = 2/3$ представляет собой

нижнюю границу этого семейства, где критерий квазиклассичности нарушается. Значение $\alpha = 2/3$ отвечает автомодельному решению трехмерного уравнения КП, описывающему наиболее быстрый слабый коллапс.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы продемонстрировали возможность коллапса звуковых волн в средах с положительной дисперсией на основе трехмерного уравнения Кадомцева–Петвиашвили. Этот процесс можно рассматривать как нелинейную стадию КП-неустойчивости солитонов КДВ в поперечном направлении. Эта неустойчивость имеет простое объяснение, данное впервые Кадомцевым [2]. Солитоны при положительной дисперсии представляют собой области с пониженной плотностью, скорость которых убывает с увеличением амплитуды солитона. По этой причине при модуляции солитона в поперечном направлении к его распространению области с пониженной амплитудой обгоняют области с большей амплитудой. В результате фронт солитона испытывает неустойчивость самофокусировочного типа, которая приводит к аккумуляции солитонного распределения. Этот факт является ключевым моментом для понимания природы неустойчивости КП. Важно, что характер неустойчивости сохраняется и на ее нелинейной стадии, которая в трехмерном случае ведет к коллапсу. При меньших размерностях, например в двумерном случае, солитон уравнения КП — ламп — реализует минимум гамильтониана при фиксированном импульсе P и по этой причине оказывается устойчивым по Ляпунову. В трехмерной геометрии солитоны представляют собой седловые точки гамильтониана и по этой причине оказываются неустойчивыми. Развитие этой неустойчивости приводит к коллапсу, одним из критериев которого является неограниченность гамильтониана \mathcal{H} снизу при фиксированном импульсе P . Коллапс в этом случае можно понимать как процесс падения частицы в самосогласованном неограниченном снизу потенциале. Благодаря неограниченности гамильтониана образование особенности оказывается возможным за счет излучения волн малой амплитуды из областей, имеющих отрицательные значения \mathcal{H} , что способствует коллапсу. При этом излучение способствует формированию слабого коллапса, когда захватываемая в особенность энергия волн (совпадающая с точностью до множителя

с L_2 -нормой) формально стремится к нулю по мере приближения к точке особенности. Показано, что при квазиклассическом описании коллапса звуковых волн с положительной дисперсией возможно целое семейство автомодельных коллапсирующих режимов, начиная с сильного, когда захваченная в сингулярность энергия конечна, вплоть до слабых коллапсов, сопровождаемых волновым излучением. Нижняя граница этого семейства соответствует автомодельному решению трехмерного уравнения КП, которое описывает наиболее быстрый из слабых коллапсов. Тенденция к уменьшению \mathcal{H} при коллапсе за счет излучения было впервые продемонстрировано в численном моделировании [3, 4]. В этих численных экспериментах было показано, что гамильтониан каверны становится со временем все более и более отрицательным, одновременно с этим значение P уменьшается, что способствует росту амплитуды в коллапсирующей области.

Несмотря на предсказания иерархии квазиклассических коллапсов, роли излучения в этих процессах и пр., в этой проблеме существует множество открытых вопросов. С нашей точки зрения, наиболее важным является вопрос относительно точного критерия коллапса для трехмерного уравнения КП (8), причем такого же уровня строгости, как и критерий Власова–Петрицева–Таланова для двумерного фокусирующего НУШ [25] или его обобщение для трехмерного случая, найденное Захаровым [26] (о других обобщениях см. [46]). Эти критерии дают достаточное условие возникновения коллапса для начальных распределений с отрицательным гамильтонианом. Следует особо отметить, что критерий для трехмерного уравнения КП, но с кубической нелинейностью фокусирующего типа, был получен в работе Турицына и Фальковича [47]. Согласно этой работе, достаточным условием для коллапса также является отрицательность гамильтониана.

Другой открытый вопрос касается построения аналитического решения для трехмерного уравнения КП. Напомним, что, как было показано в [11], двумерное уравнение КП допускает представление Лакса и соответственно применение метода обратной задачи рассеяния, использование которого показало большую эффективность в аналитических исследованиях двумерного уравнения КП. Достаточно здесь упомянуть работу [12], в которой было построено решение в виде лампа и исследована задача о рассеянии двумерных солитонов. Как известно, существует другой подход, так называемый метод Хироты [28], который позволяет строить некоторые аналитические решения для большого числа инте-

грируемых моделей. Сравнительно недавно было продемонстрировано, что трехмерное уравнение КП также допускает представление Хироты [29, 30]. Однако до сих пор все построенные решения для трехмерного КП, основанные на этом подходе, оказываются только двумерными, см. также [31–34]. Поэтому одна из главных задач — это задача построения точных трехмерных решений, имеющих физический смысл. Необходимо подчеркнуть, что, строго говоря, существование представления Хироты не гарантирует наличие представления Лакса.

Благодарности. Автор благодарит А. М. Камчатного и Ю. А. Степанянца за полезные обсуждения и замечания.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 17-01-00622).

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Б. Кадомцев, В. И. Петвиашвили, ДАН СССР **192**, 753 (1970) [Sov. Phys. Dokl. **15**, 539 (1970)].
2. Б. Б. Кадомцев, *Коллективные явления в плазме*, Физматгиз, Москва (1976).
3. Е. А. Кузнецов, С. Л. Мушер, А. В. Шафаренко, Письма ЖЭТФ **37**, 204 (1983) [JETP Lett. **37**, 241 (1983)].
4. Е. А. Кузнецов, С. Л. Мушер, ЖЭТФ **64**, 947 (1986) [Sov. Phys. JETP **64**, 947 (1986)].
5. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, УФН **182**, 569 (2012) [Phys. Usp. **55**, 535 (2012)].
6. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, ЖЭТФ **91**, 1310 (1986) [Sov. Phys. JETP **64**, 773 (1986)].
7. В. Л. Гуревич, *Кинетика фононных систем*, Наука, Москва (1980).
8. E. P. Gross, Nuovo Cim. **20**, 454 (1961).
9. Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **40**, 646 (1961) [Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961)].
10. V. E. Zakharov and E. A. Kuznetsov, Physica D **8**, 455 (1986).
11. В. С. Дрюма, Письма в ЖЭТФ **19**, 753 (1974) [JETP Lett. **19**, 387 (1974)].
12. S. V. Manakov, V. E. Zakharov, L. A. Bordag, A. R. Its, and V. A. Matveev, Phys. Lett. A **63**, 205 (1977).

13. В. И. Петвиашвили, *Физика плазмы* **2**, 469 (1976) [Sov. J. Plasma Phys. **2**, 257 (1976)].
14. Е. А. Кузнецов, С. К. Турицын, *ЖЭТФ* **82**, 1457 (1982) [Sov. Phys. JETP **55**, 844 (1982)].
15. R. Blaha, E. A. Kuznetsov, E. W. Laedke, and K. H. Spatschek, in *Nonlinear World, Proc. of IV Workshop Nonlinear and Turbulent Processes in Physics*, ed. by V. G. Bar'yakhtar et al., World Sci., Singapore (1990), Vol. 1, pp. 25–36.
16. R. Blaha, E. W. Laedke, and K. H. Spatschek, *Physica D* **40**, 249 (1989).
17. E. A. Kuznetsov, *Phys. Lett. A* **101**, 314 (1984).
18. Е. А. Кузнецов, С. К. Турицын, *ЖЭТФ* **94**, 119 (1988) [Sov. Phys. JETP **67**, 1583 (1988)].
19. G. A. Swartzlander and C. T. Law, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2503 (1992).
20. C. T. Law and G. A. Swartzlander, *Opt. Lett.* **18**, 586 (1993).
21. D.E. Pelinovsky, Yu.A. Stepanyants, and Yu.S. Kivshar, *Phys. Rev. E* **51**, 5016 (1995).
22. C. A. Jones and P. H. Roberts, *J. Phys. A* **15**, 2599 (1982).
23. E. A. Kuznetsov and J. J. Rasmussen, *Phys. Rev. E* **51**, 4479 (1995).
24. S. C. Crow, *AIAA J.* **8**, 2172 (1970).
25. С. Н. Власов, В. А. Петрицев, В. И. Таланов, *Изв. вузов. Радиофизика* **14**, 1453 (1971) [*Radiophys. Quant. Electron.* **14**, 1062 (1971)].
26. В. Е. Захаров, *ЖЭТФ* **62**, 1745 (1972) [Sov. Phys. JETP **35**, 908 (1972)].
27. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, *ЖЭТФ* **113**, 1892 (1998) [Sov. Phys. JETP **86**, 1035 (1998)].
28. R. Hirota, *The Direct Method in Soliton Theory*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2004).
29. Wen-Xiu Ma, *Comm. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **16**, 2663 (2011).
30. Chao Qian, Ji-Guang Rao, and Jing-Song He, *Chinese Phys. Lett.* **33**, 110201 (2016).
31. X. B. Wang, S. F. Tian, C. Y. Qin, and T. T. Zhang, *Appl. Math. Lett.* **72**, 58 (2017).
32. J. J. Mao, S. F. Tian, X. J. Yan, and T. T. Zhang, *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow* **29**, 3417 (2019).
33. Dan-Dan Zhang, Lei Wang, Lei Liu, Tai-Xing Liu, and Wen-Rong Sun, *Commun. Theor. Phys.* **73**, 095001 (2021).
34. О. В. Капцов, Д. О. Капцов, *Прикл. мех. тех. физ.* **62**, 142 (2021) [*J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **62**, 649 (2021)].
35. E. A. Kuznetsov, A. M. Rubenchik, and V. E. Zakharov, *Phys. Rep.* **142**, 103 (1986).
36. Yu. S. Kivshar and D. E. Pelinovsky, *Phys. Rep.* **331**, 117 (2000).
37. A. I. Dyachenko and E. A. Kuznetsov, *Physica D* **87**, 301 (1995).
38. В. И. Шприра, *ДАН СССР* **308**, 732 (1989) [Trans. USSR Acad. Sci., Earth Sci. Sec. **308**, 276 (1989)].
39. Д.Е. Пелиновский, Ю.А. Степанянц, *ЖЭТФ* **104**, 3387 (1993) [D.E. Pelinovsky and Yu.A. Stepanyants *JETP* **77**, 602 (1993)].
40. В. Е. Захаров, *Письма в ЖЭТФ* **22**, 364 (1975) [*JETP Lett.* **22**, 172 (1975)].
41. E. A. Kuznetsov, A. V. Mikhailov, and I. A. Shimo-khin, *Physica D* **87**, 201 (1995).
42. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, *Письма в ЖЭТФ* **17**, 268 (1973); *ЖЭТФ* **65**, 590 (1973) [Sov. Phys. JETP **38**, 291 (1974)].
43. Е. А. Кузнецов, С. К. Турицын, *Физика плазмы* **16**, 901 (1990) [Sov. J. Plasma Phys. **16**, 524 (1990)].
44. G. B. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves*, John Wiley & Sons (2011).
45. Е. А. Кузнецов, А. В. Михайлов, *ЖЭТФ* **40**, 855 (1974) [Sov. Phys. JETP **40**, 855 (1975)].
46. E. A. Kuznetsov, S. K. Turitsyn, J. J. Rasmussen, and K. Rypdal, *Physica D* **87**, 273 (1995).
47. С. К. Турицын, Г. Е. Фалькович, *ЖЭТФ* **89**, 258 (1985) [Sov. Phys. JETP **62**, 146 (1985)].

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

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

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова