#### РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

#### ЖУРНАЛ

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

OCHOBAH В МАРТЕ 1873 ГОДА ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД М O С K В A

ТОМ 159, ВЫПУСК 2 ФЕВРАЛЬ 2021

PAH

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

#### СОДЕРЖАНИЕ

#### АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Возможны ли изотропные метаматериалы и метаматериалы с отрицательными проницаемостями $\varepsilon$ и $\mu$ ?	195
Исследования фрагментации сферических алюминиевых ударников на тяжелой сетке при скоростях до 7 км/с	
Мягков Н. Н., Калмыков П. Н., Лапичев Н. В., Леонтьев А. И., Номаконова В. Н., Пономарев А. В., Сальников А. В., Соколов О. А., Шумихин Т. А.	216
Эффект встречной поляризации ансамбля щелочных атомов при оптической накачке: исследование при учете движения атомов	
Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Пазгалёв А. С., Вершовский А. К.	231
Тригонометрические операторы разности фаз квантовых электромагнитных полей	244
Встречное четырехфотонное смешивание в формировании фантомных изображений	258
Эффективный квантовый осциллятор резонатора с осциллирующими параметрами	262
Источник экстремального ультрафиолетового излучения на основе разряда, поддерживаемого импульсом излучения терагерцевого лазера на свободных электронах	270

<sup>©</sup> Российская академия наук, 2021

<sup>©</sup> Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

Лазерная изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул с небольшим изотопическим сдвигом в спектрах поглощения в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения	
	281
Полуклассическое описание ондуляторного излучения	297
порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах	
Ферромагнитный резонанс и упругие колебания в эпитаксиальных пленках феррит-граната иттрия	307
Эффект тренировки электросопротивления в обменно-смещенном кобальтите ${\rm GdBaCo_2O_{5.5}}$ Солин Н. И., Наумов С. В.	315
Нуклеация и рост зародышей стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости Юкавы Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В.	330
СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ	
Собственные колебания границы магнитного барьера, обтекаемого плазмой: мембранная модель границы, линейные и нелинейные резонансы и связи с внутренними модами	
Савин С. П., Ляхов В. В., Нещадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Ванг Ч., Ли Х., Бленцки Я., Рош ЖЛ., Козак Л., Суворова А., Лежен Л. А.	339
Статистические свойства систем многих частиц с иерархической структурой	350
Моделирование нестационарных неустойчивостей Бенара – Марангони в испаряющихся летучих каплях на нагретой подложке	359
Конвекция коллоидной суспензии в горизонтальном слое при нагреве снизу с учетом взаимодействия наночастиц	371

## ВОЗМОЖНЫ ЛИ ИЗОТРОПНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМИ ПРОНИЦАЕМОСТЯМИ $\varepsilon$ И $\mu$ ?

М. В. Давидович\*

Национальный исследовательский Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского 410012, Саратов, Россия

Поступила в редакцию 12 февраля 2020 г., после переработки 22 июля 2020 г. Принята к публикации 26 июля 2020 г.

Предпринята попытка ответа на поставленный в заглавии вопрос. Рассмотрены периодические метаматериалы — кубические фотонные кристаллы с диэлектрическими включениями, в том числе с металлическими свойствами, методы введения материальных уравнений (гомогенизации), возможность описания метаматериалов двумя скалярными проницаемостями (или двумя скалярными параметрами), в том числе с отрицательными значениями их действительных частей. Для фотонных кристаллов подтвержден вывод Ландау об отсутствии высокочастотных (оптических) магнитных свойств. В частности, невозможны отрицательные значения магнитной проницаемости или каких-либо ее компонент. Приведены конфигурации метаматериалов, обладающие почти изотропными свойствами при пренебрежении пространственной дисперсией.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020012

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Под метаматериалами в широком смысле будем понимать любые искусственные среды (ИС), которые благодаря развитию современных технологий, включая нанотехнологии, в последние два десятилетия усиленно создаются и широко теоретически исследуются. Их исследование началось более ста лет назад, и уже к середине прошлого столетия были получены важные результаты по искусственным диэлектрикам и структурам (см., например, обзор [1]). Создаваемые ИС могут быть периодическими и хаотическими, т. е. с периодическим и хаотическим расположением частиц или метаатомов (МА) в основе — обычно некой однородной и изотропной диэлектрической среде. Другой тип ИС создают и исследуют на основе теории смесей, формул смешения, теории перколяции, метода компактных групп и ряда других подходов [2,3]. Здесь мы такие метаматериалы не рассматриваем, а будем исследовать только периодические ИС, которые также называют фотонными кристаллами. Соответственно имеет место аналогия между ними и кристаллами в оптике,

а аналогией для смесей служат аморфные диэлектрики. Часто метаматериалы понимаются в узком смысле как периодические ИС, содержащие металлические МА или частицы, и даже в более узком смысле как ИС с «одновременно отрицательными диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\varepsilon$  и магнитной проницаемостью (МП)  $\mu$ » [2, 4]. Также их ассоциируют с ИС, в которых распространяются объемные обратные волны (ОВ) [4]. В последнее время возрос интерес к метаповерхностям, вдоль которых возможны ОВ, при этом требование одновременной отрицательности ДП и МП (или каких-либо их компонент) не является обязательным [5]. Сразу оговоримся, что ни  $\varepsilon$ , ни  $\mu$  отрицательными быть не могут, поскольку это комплексные величины, тем более что потери в металлических МА существенные, а рассматриваемые структуры с ОВ резонансные. Кроме того, ОВ существуют в любом фотонном кристалле, который строго описывается только тензорной ДП с учетом пространственной дисперсии [6–8]. Поэтому много работ было посвящено получению и исследованию полностью диэлектрических ИС с одновременно электрическими и магнитными откликами. Ответ на вопрос о том, возможно ли получить отрицательные эффективные значения  $\varepsilon$  и  $\mu$  (а тем

<sup>\*</sup> E-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

более их одновременно отрицательные значения) в полностью диэлектрических ИС, является одной из целей данной работы и будет дан ниже. Обычно «одновременность» понимается как значения на одной фиксированной частоте. Эта идея заманчива, поскольку тангенс угла потерь хороших диэлектриков в широком диапазоне от микроволн до оптики может быть порядка и меньше  $10^{-4}$ , при этом не требуется криогенных температур. Однако эти параметры зависят и от волнового вектора  ${\bf k}$ , т. е. надо понимать одновременность как принадлежность к фиксированной точке поверхности изочастот (дисперсионной поверхности в **k**-пространстве). Соответственно переход от одной области дисперсионной поверхности или ветви к другой может сопровождаться переходом от прямых волн к обратным. Снизить потери на два порядка можно, используя гелиевые температуры. Такие периодические ИС с металлическими МА уже можно рассматривать как фотонные кристаллы наряду с диэлектрическими ИС. В подобных электромагнитных кристаллах поглощением фотонов можно пренебречь, и тогда поведение последних аналогично поведению электронов в обычных кристаллах. Так же как электроны и дырки в твердотельном кристалле, это квазичастицы — квазифотоны или поляритоны, обладающие дисперсией и позволяющие эффективно управлять светом, чем и обусловлен большой интерес к таким структурам нанофотоники. Квазифотоны обладают дисперсией, причем для них возможны почти запрещенные зоны. Слово «почти» можно опустить, если пренебречь диссипацией и рассматривать бесконечный периодический фотонный кристалл.

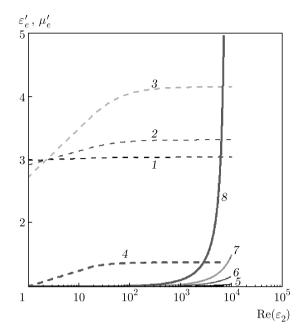
В электродинамике сплошных сред известно утверждение, что с ростом частоты МП  $\mu$  все более теряет свой смысл, а в области оптических частот  $\mu \approx 1$ , и рассматривать магнитный отклик бессмысленно [9] §79, §103. Это утверждение за последние двадцать лет многократно подвергалось сомнению и опровержению (см., например, [10]). Однако вывод о нецелесообразности высокочастотного описания природных материалов и метаматериалов с помощью МП верен. В данной работе этот вывод, полученный в [9] в общем случае, подтверждается конкретно для фотонных кристаллов с привлечением классической электродинамики и гомогенизации. Его можно распространить на взаимодействие излучения с периодически расположенными МА как квантовыми точками. Также рассмотрен вопрос о создании изотропных метаматериалов. Важным в этом случае является размер кристалла или число периодов. Их должно быть так много, чтобы радиационными потерями можно было пренебречь. Именно в этих приближениях мы и будем рассматривать задачу. Например, тонкая пленка в 100 нм с пятью периодами и двумя разными слоями по 10 нм в периоде не является 1D-кристаллом. Она более соответствует оптическому фильтру [11, 12]. Чтобы возникло подобие запрещенной зоны, пленка должна иметь толщину более 800 нм, когда число периодов больше или равно 40 [12]. Фотонный кристалл (как и обычный) описывается тензором ДП  $\hat{\varepsilon}$ , а никак не отрицательным скаляром. Однако имеется весьма много работ, в которых периодические ИС описываются с помощью ДП  $\varepsilon < 0$  и МП  $\mu < 0$ . Часто такие параметры просто вводят и анализируются какие-то свойства, например, поведение лучей. Тогда волновая векторная электродинамика заменяется лучевой оптикой. В лучшем случае такие проницаемости вводят в уравнения Максвелла. Это связано с тем, что строгие решения весьма сложны и в известных нам работах не применялись (за исключением использования коммерческих программных пакетов). Ниже приведены подходы к строгому численно-аналитическому решению подобных задач.

Известно, что внутреннее поле играет огромную роль при описании ДП и МП в природных веществах. Обычно ДП и МП вводят путем усреднения полей, индукций и поляризаций микроскопических уравнений Максвелла-Лоренца по физически бесконечно малому объему [6-8, 13]. Для кристаллов и смесей такой процесс называется гомогенизацией. Для смесей усреднение проводится по малому объему с линейным размером, существенно меньшим длины волны, но в котором много МА. Для фотонного кристалла будем делать усреднение по ячейке периодичности. Требовать ее малость по сравнению с длиной волны не обязательно, но для локальности материальных уравнений необходимо. Низкочастотная гомогенизация означает  $\mathbf{k} = 0$ , т.е. пренебрежение пространственной дисперсией (ПД). Для рассчитанной зонной структуры гомогенизация зависит от точки на дисперсионной поверхности. Упомянутое усреднение изначально зависит и от модели среды [1,4–8,14]. Так, можно вовсе не вводить МП, т. е. не использовать симметричный подход, а определять только тензор  $\hat{\varepsilon}$ . Для определения его шести компонент (в общем случае комплексных) вполне достаточно шести скалярных уравнений Максвелла, что и определяет его преимущества. Симметричный же подход на основе  $\hat{\varepsilon}$  и  $\hat{\mu}$  требует введения дополнительных условий, обычно связанных с симметрией [15, 16].

#### 2. ИСТОРИЯ ВОПРОСА

В первых работах по гомогенизации [17–19] при задании модели среды в виде скаляров  $\varepsilon$  и  $\mu$  были получены магнитные свойства с использованием только диэлектрических МА. Так, Левин [17, 18] рассматривал отражение нормально падающей волны от кубической решетки сферических магнитодиэлектрических МА. Поляризация волны была фиксирована вдоль одной из осей. Использовался ряд приближений. Для металлических МА был получен диамагнетизм. Для диэлектрических МА с большой  $\Pi$  получена широкая вариация значений  $\mu$  с утверждением, что эта величина может лежать почти в любой точке комплексной плоскости. Это не совсем так. На рис. 1 приведены результаты вычислений по формулам из [17,18], из которых видно, что  $\mu'_e > 0$ ,  $\mu_e^{\prime\prime}>0$  в области  $\varepsilon_2^{\prime}<5000.$  При более высоких значениях ДП и достаточно больших шариках возможны резонансы с малой зоной отрицательной ДП. Однако веществ с такими большими линейными изотропными ДП нет, а сами резонансы обусловлены введенной в [18] функцией  $F(k_0 a_1/\overline{\varepsilon_2 \mu_2})$  и являются нефизическими. При больших ДП шариков ДП  $\varepsilon_e'$ насыщается, что также говорит об ограниченности модели. ДП основы в расчетах равнялась 3-i0.0003, при этом получено  $\mu_e''/\mu_e' \sim 10^{-4}$ . ДП шариков изменялась от 1 до 10000, при этом тангенс угла потерь брался равным  $10^{-4}$ . Сам автор отметил, что результаты пригодны только для макроскопического коэффициента отражения при нормальном падении. То есть при падении под углом параметры могут измениться. Результаты справедливы в предположении  $k_0 a \ll 1$ , где a — радиус шариков, тогда как для гомогенизации надо использовать более жесткое условие  $k_0 d \ll 1$ , где  $a \ll d$ , d — период. Если это жесткое условие выполнено, эффективная ДП мало отличается от проницаемостей основы, а МП уменьшается на порядок и более. Таким образом, условие  $\mu_e'\gg 1$  есть результат сильного взаимовлияния MA (влияния внутреннего поля), при этом модель становится менее строгой из-за пространственной дисперсии и других факторов. Основное ограничение модели при увеличении размеров — исчезновение сферической симметрии, используемой при выводе формул.

В работе Рытова [19] рассмотрена плоскослоистая периодическая среда. Для нее найдены скалярные ДП и МП, описывающие волны двух поперечных направлений. Условия получены путем приравнивания волнового сопротивления и коэффициента замедления своим эффективным значениям:



**Рис. 1.**  $\mathrm{Re}\left(\varepsilon_{e}\right)$  (кривые  $1\!-\!4$ ) и  $\mathrm{Re}\left(\mu_{e}\right)$  ( $5\!-\!8$ ) в зависимости от  $\mathrm{Re}\left(\varepsilon_{2}\right)$  согласно [12,13] при  $\mu_{1}=\mu_{2}=1,\,k_{0}d\sqrt{\varepsilon_{1}}=0.1$ :  $\varepsilon_{1}=3$  ( $1\!-\!3,\,5\!-\!7$ ), 1 ( $4,\,8$ ). Кривые  $1,\,5$  соответствуют a/d=0.1; кривые  $2,\,3-a/d=0.2$ ; кривые  $4,\,7,\,8-a/d=0.3$ 

 $\sqrt{\mu_e/\varepsilon_e}$  и  $n=\sqrt{\varepsilon_e\mu_e}$ . Два условия определяют две эффективные величины  $\varepsilon_e$  и  $\mu_e$ . Эти величины различны по разным направлениям. При этом даже если слои диэлектрические, возникает МП. С другой стороны, в длинноволновом пределе получены материальные уравнения для такой одноосной диэлектрической ИС:  $\varepsilon_{e\perp} = (\varepsilon_1 d_1 + \varepsilon_2 d_2)/d, \ \varepsilon_{e\parallel}^{-1} =$  $=\left(\varepsilon_{1}^{-1}d_{1}+\varepsilon_{2}^{-1}d_{2}\right)/d$ , а также аналогичная формула для МП в случае ИС с магнитными слоями. Такие 1D-метаматериалы описываются диагональными тензорами, в которые входят проницаемости слоев и их толщины. Если магнитных свойств у слоев нет, то  $\mu_1 = \mu_2 = 1$  и  $\mu_e = 1$ , т.е. нет их и у ИС. Однако такой метаматериал можно описать моделью, учитывающей магнитные свойства, введя два скалярных параметра  $\varepsilon_e$  и  $\mu_e$  вместо тензора  $\hat{\varepsilon}_e$ . Например, можно потребовать, чтобы коэффициент отражения R от такой среды был равен коэффициенту отражения от изотропной эффективной среды. Коэффициент отражения зависит от угла падения, т. е. от вектора  ${\bf k}$  в среде, поэтому подход позволяет учесть ПД. Его можно распространить на структуру типа мелкомасштабный период в крупномасштабном периоде [20]. Если структура имеет большое число N периодов по два диэлектрических слоя в периоде, то ее коэффициент отражения и коэффициент прохождения рассчитываются точно. Удобно использовать матрицу передачи. Описывая структуру как однородную с двумя параметрами  $\varepsilon_e$  и  $\mu_e$ , мы можем их связать с параметрами слоев. Такая модель будет достаточно правильно описывать дифракцию на плоскослоистых структурах при других больших значениях N, т. е. при других толщинах всей структуры. Однако она не применима для описания волн внутри. Более подходит модель на основе тензора ДП одноосного кристалла. Приведенная выше модель, описывающая  $\varepsilon_{e\perp}$  и  $\varepsilon_{e\parallel}^{-1}$ , является приближенной. Можно учесть ПД, сшив поля и вычислив поляризацию под воздействием плоской волны направления  $\mathbf{k}$  [1]:

$$\begin{split} \varepsilon_{xx} &= k_0^{-1} \left \lfloor k_x^2 + k_{1z}^2 d^{-2} \left ( d_1^2 + d_1 d_2 \right ) + \right. \\ &\left. + \left. k_{2z}^2 d^{-2} \left ( d_2^2 + d_1 d_2 \right ) \right \rfloor, \end{split}$$

$$\begin{split} &\varepsilon_{zz} = k_0^{-2} k_x^2 \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{k_{1z}^2 d^{-2} \left( d_1^2 + d_1 d_2 \varepsilon_2 / \varepsilon_1 \right) + k_{2z}^2 d^{-2} \left( d_2^2 + d_1 d_2 \varepsilon_1 / \varepsilon_2 \right)}{k_x^2 + k_{1z}^2 d^{-2} \left( d_1^2 + d_1 d_2 \right) + k_{2z}^2 d^{-2} \left( d_2^2 + d_1 d_2 \right)} \right\}^{-1}. \end{split}$$

Здесь обозначены ДП  $\varepsilon_n$  и толщина слоев  $d_n$ ,  $k_{nz}^2 = k_0^2 \varepsilon_n - k_x^2$ ,  $d = d_1 + d_2$ . Интересно отметить, что результат этих формул в ряде частных случаев совпадает с результатом приведенных выше. Нормированное к импедансу  $Z_0 =$  $=\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$  волновое сопротивление необыкновенной волны в таком 1D-фотонном кристалле равно  $\sqrt{\varepsilon_{xx}^{-1}-(k_x^2/k_0^2)/(\varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz})}$ . В вакууме  $\tilde{Z}_0=E_x/H_y=$  $= Z_0 \sqrt{1 - k_x^2/k_0^2}$ . Коэффициент отражения R = $= (Z/Z_0 - 1)/(Z/Z_0 + 1)$  связываем с тензором ДП, что дает еще одну возможность теоретического и экспериментального определения его компонент. С другой стороны, из уравнения Флоке-Блоха  $\cos\left(\tilde{k}d\right) = \left(a_{11} + a_{22}\right)/2$  можно определить блоховское волновое число  $\tilde{k}$  и импеданс E-волны в направлении z:  $Z = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} k_0 \tilde{k} / (\tilde{k}^2 + k_x^2)$ . Здесь  $a_{nn}$  элементы матрицы передачи одного периода из двух слоев. Отличие двух импедансов в том, что первый построен на основе гомогенизации в виде уравнения Френеля, а второй соответствует строгому решению уравнения Флоке-Блоха. Во вторую формулу для коэффициента отражения эффективные проницаемости не входят. Приравнивая оба коэффициента отражения, получим формулу для гомогенизации:

$$\sqrt{1 - \frac{k_x^2/k_0^2}{\varepsilon_{zz}}} = \frac{k_0\sqrt{\varepsilon_{xx}}\tilde{k}}{\tilde{k}^2 + k_x^2}.$$

Для исследования свойств метаматериалов применялись коммерческие пакеты программ, позволяющие рассчитывать конфигурационно сложные периодические микроструктуры. Такие пакеты могут демонстрировать решения, иллюстрирующие отрицательную рефракцию (ОР) или преломление. Однако OP никак не означает, что  $\varepsilon < 0$  и  $\mu < 0$ , и даже ничего не говорит о том, что какие-то компоненты тензоров отрицательны. Обычно ОР связывают с объемными ОВ. Однако ОВ и ОР — явления разные и могут существовать независимо [1,4]. Часто такие ИС называют левыми, метаматериалами с отрицательной групповой скоростью или с отрицательным показателем преломления. Отрицательным показатель преломления быть не может [21]. Это понятие введено в оптике на заре ее развития и применимо для изотропных сред, когда длина волны в  $10^5$  раз и более превышает размеры молекул. Для ИС это соотношение как минимум на три порядка меньше, и для них ДП  $\hat{\varepsilon}(\omega, \mathbf{k})$  есть тензор, причем зависящий от волнового вектора k [4, 6–8]. Объемные волны в таком кристалле удовлетворяют уравнению Френеля в общем случае четвертого порядка по  $\mathbf{k}$  и шестого по волновому числу  $k_0$ . Максимальное количество таких волн — четыре, а вопрос о прямой или обратной объемной волне в недиссипативном фотонном кристалле решается посредством определения угла между векторами k и  $\mathbf{v}_{q} = \nabla_{k}\omega\left(\hat{\varepsilon},\mathbf{k}\right)$ . Тип волны зависит от направления групповой скорости (нормали к поверхности изочастот) по отношению к вектору к. В диссипативном кристалле вместо  $\mathbf{v}_q$  следует использовать вектор Пойнтинга  $\mathbf{S} = \operatorname{Re}\left(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\right)/2$ . В общем случае без бианизотропии поверхность изочастот определяется уравнением  $\omega\left(\hat{\varepsilon}\left(\omega,\mathbf{k}\right),\hat{\mu}\left(\omega,\mathbf{k}\right),\mathbf{k}\right)=\mathrm{const},$ в котором учтена ПД. Для гиперболического метаматериала это приводит к ограниченности поверхности изочастот [1]. Обладающий магнитным откликом бианизотропный метаматериал описывается еще двумя тензорами кросс-поляризации [14–16]. Он характеризуется сильной ПД. Однако он также может быть описан только одним тензором ДП, но такой тензор в общем случае не может быть приведен к диагональному виду. Для получения отрицательной рефракции важно, под каким углом волна падает и какова оптическая плотность среды падения [4]. При падении из среды с ДП  $\tilde{\varepsilon}$  касательная к поверхности компонента вектора  $\tilde{\mathbf{k}}$  сохраняется, а сам вектор удовлетворяет уравнению Френеля  $\mathbf{k} = k_0^2 \tilde{\varepsilon}$ . Внутри кристалла вектор  $\mathbf{k}$  удовлетворяет более сложному уравнению Френеля. Изменяя угол падения, мы изменяем положение конца вектора на поверхности изочастот. Ввести один показатель преломления для таких кристаллов нельзя, даже если взять его тензорным. Да и вводить его нецелесообразно: в электродинамике вводится вектор  ${\bf k}$  и волновые матричные импедансы, поскольку гомогенизированные (макроскопические) уравнения Максвелла принимают вид

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -Z_0 k_0 \hat{\varepsilon}_e (\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E},$$
  
$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = -Z_0^{-1} k_0 \hat{\mu}_e (\omega, \mathbf{k}) \mathbf{H},$$

а импедансы определяются из них, когда определена зависимость  $\mathbf{k}\left(\omega\right)$  для конкретной дисперсионной ветви и получены эффективные параметры  $\hat{\varepsilon}_e(\omega, \mathbf{k})$ и  $\hat{\mu}_e(\omega, \mathbf{k})$ . В диссипативных ИС отрицательная групповая скорость и объемные ОВ — понятия не тождественные. При диссипации k-пространство уже не является трехмерным: оно шестимерное комплексное, что не позволяет определить групповую скорость как градиент скаляра. Поэтому скорость движения энергии и групповая скорость — также понятия различные. В металлических фотонных кристаллах в области плазмонного резонанса  $|\varepsilon'| \sim$  $\sim \varepsilon''$ , а сделать  $\varepsilon''/|\varepsilon'| < 10^{-3}$  при комнатной температуре практически невозможно. Поверхностные волны также могут быть обратными [22], и для этого не требуется наличие магнитных свойств у среды, хотя есть и обратные магнитостатические волны [23]. В отличие от наведенного магнетизма в ИС анизотропный магнитный отклик в ферритах проявляется в СВЧ-диапазоне в присутствии внешнего магнитного поля, что связано с ограниченностью намагниченности насыщения. Поверхностные ОВ могут испытывать отрицательное преломление на метаповерхностях.

Рассмотренные выше понятия требуют корректного использования. Часто ряд из них лишен физического смысла. Так, формальная подстановка в уравнения Максвелла однородных и изотропных величин  $\varepsilon_e = \varepsilon' - i\varepsilon''$  и  $\mu_e = \mu' - i\mu''$  при  $\varepsilon'' > 0$  и  $\mu'' > 0$ дает для показателя преломления  $n_e = n' - in''$  значение n' < 0, если взять  $\varepsilon' < 0$  и  $\mu' < 0$ . Цель данной работы — рассмотреть, возможно ли получить изотропную среду с  $\varepsilon' < 0$  и  $\mu' < 0$ . Ниже показано, что это невозможно, что в некотором роде перекликается с выводами работы [24]. Волны в таком метаматериале в низкочастотном пределе подчиняются уравнению Френеля  $\mathbf{k}^2 = k_0^2 \varepsilon_e \mu_e$ . Построенный как кристалл, он должен обладать следующими свойствами. Решетка должна быть кубической с периодом  $a \ll \Lambda$ , где  $\Lambda$  — минимальная внутренняя длина волны, а  $\lambda = \Lambda \sqrt{\varepsilon_e \mu_e}$  — длина волны в вакууме. Включенные в узлы решетки частицы должны быть симметричными, т. е. иметь одинаковые дипольные моменты (коэффициенты поляризуемости) вдоль каждой из осей. Диссипация должна быть малой:  $|\mathbf{k}''|/|\mathbf{k}'| \ll 1$ ,  $|n''/n'| \ll 1$ , где  $\mathbf{k} = \mathbf{k}' - i\mathbf{k}'' - i\mathbf{k}''$ волновой вектор,  $n = \sqrt{\varepsilon_e \mu_e} = n' - i n'' - получен$ ный гомогенизацией показатель преломления (заметим, что можно ввести вектор  $\mathbf{n}' = \mathbf{k}'/k_0$ , модуль которого определяет замедление в направлении  $\mathbf{k}'$ ). ПД и биизотропия должны быть пренебрежимо малыми. Последнее соответствует тому, что метаматериал следует рассматривать вдали от резонансов и запрещенных зон при малых |k| и больших по сравнению с размерами частиц длинах волн Л. Пренебрежение биизотропией означает, что вторичные электрические поля, создаваемые за счет поляризации каждой частицы, не вносят вклад в ее магнитную поляризацию и в магнитную поляризацию ее соседей. Это же относится и к магнитным полям. Еще раз подчеркнем, что использование в уравнениях Максвелла скалярных величин  $\varepsilon < 0$  и  $\mu < 0$ дает решение в виде плоской волны, для которой  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{S} < 0$ , что не требует введения ни отрицательного показателя преломления, ни отрицательной групповой скорости. В монохроматической волне нет группы волн, поэтому нет и основания для ее введения.

#### 3. ПОЧТИ ИЗОТРОПНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ

Электрический диполь длины l хорошо моделируется малым тонким металлическим цилиндром малого радиуса  $r \ll l$ . Изотропный диполь представляет собой три таких взаимно перпендикулярных цилиндра (рис. 2a). Его излучение изотропно. Магнитный диполь представляет собой проволочную рамку. Изотропный магнитный диполь представим как три скрещенные рамки (рис. 2). Поместим два (магнитный и электрический) изотропных диполя в каждый узел кубической решетки (рис. 2a). Для устранения взаимного влияния диполей соседних узлов предположим, что  $R \ll a$ . Считаем l < R. Даже в этом случае имеет место ближнепольное взаимное влияние диполей в узле: возбуждение электрического диполя приводит к излучению, которое возбуждает токи в рамках, а возбуждение рамок, в свою очередь, возбуждает электрические диполи. Поэтому такой кристалл не совсем удовлетворяет нашим требованиям. Он, скорее, будет биизотропным. В нем каждый излучатель в узле принадлежит восьми кубическим ячейкам. Поскольку в кубе их восемь, одному кубу принадлежит один из-

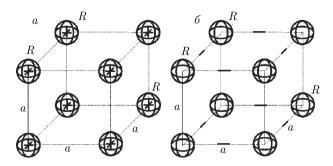


Рис. 2. Фотонный кристалл с магнитными и электрическими диполями в кубической решетке

лучатель. Его можно расположить в центре куба. Тогда надо задать разложение токов в проволочках, вычислить для них поля, используя периодическую функцию Грина (ФГ) данного фотонного кристалла и наложить граничные условия на проволочках. Это позволяет сформулировать дисперсионное уравнение. Его будем называть микроскопическим. Оно позволяет построить точную зонную структуру и микроскопическую поверхность изочастот. Для ее построения нужно дисперсионное уравнение, в которое входят только поля, частота и волновой вектор k. Теперь можно выполнить гомогенизацию, определить средние поля, индукции и поляризации, что позволяет определить усредненные (эффективные) гомогенные в общем случае тензорные проницаемости. Им соответствует уравнение Френеля для фотонного кристалла, в которое входят величины  $\hat{\varepsilon}_e$ ,  $\hat{\mu}_e$ , **k**,  $k_0$ . При фиксации  $k_0$  оно дает макроскопическую поверхность изочастот и может считаться макроскопическим дисперсионным уравнением.

На рис. 26 представлена ИС, которая более соответствует требованиям изотропности. Очевидно, три кольцевых рамки можно заменить металлическим шаром. Кольцевые токи на поверхности шара наводят магнитную поляризацию. Это низкочастотные токи. Шар также может представлять собой электрический диполь, квадруполь, октуполь и т.п. [25]. Мультипольные резонансные токи соответствуют более высоким частотам, хотя они существуют на любых частотах в силу разложений полного тока по мультиполям, т.е. по производным полиномов Лежандра. Однако ориентацию оси z можно выбрать произвольно, поэтому это изотропные излучатели. Часто токи считают поверхностными. Для этого глубина проникновения должна быть существенно меньше размеров МА. Говоря далее о токах, мы всегда подразумеваем их плотности, за исключением отдельно оговоренных случаев. Слишком низкие частоты или слишком малые размеры могут

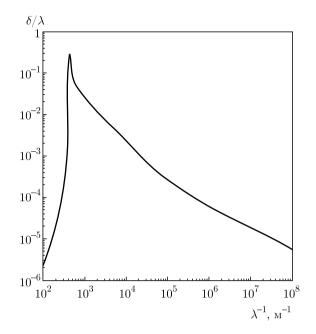
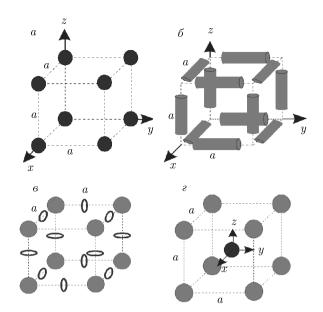


Рис. 3. Нормированная глубина проникновения в серебро в зависимости от обратной длины волны

приводить к полному проникновению поля в шарики или проволочки. Для наноразмерных металлических структур оно возможно в широких частотных диапазонах, включая оптические и УФ-области. На рис. З приведена кривая нормированной к длине волны глубины проникновения в серебро в зависимости от обратной длины волны в метрах. Использована формула Друде – Лоренца для объемного образца. Для наноразмерных пленок и квантовых нитей эти результаты являются приближенными, поскольку вычисление требует квантовых подходов.

Различные резонансные излучатели типа разомкнутых колец, двойных разомкнутых колец и т.п. не являются изотропными. Фотонные кристаллы на их основе не являются изотропными средами. В общем случае метаматериалы с такими МА являются бианизотропными: электрическое поле наводит в них как электрическую, так и магнитную поляризации, а магнитное поле — соответственно магнитную и электрическую поляризации. Такие ИС могут демонстрировать ОР, но никак не являются структурами с  $\varepsilon < 0$  и  $\mu < 0$  или с n < 0. Их строгий анализ весьма сложен. Другие почти изотропные структуры приведены на рис. 4. Они более простые для анализа и гомогенизации. Для металлических шариков (рис. 4a) имеет место диамагнетизм и малая эффективная ДП [26]. Металлические цилиндры (рис. 46) демонстрируют изотропную электрическую и магнитную поляризации. Диэлектри-



**Рис. 4.** Элементарные ячейки кубических фотонных кристаллов с шаровыми (a, e), цилиндрическими (b), шаровыми и кольцевыми (b) включениями MA в диэлектрическую основу (матрицу)

ческие шары и металлические кольца (рис. 4в) демонстрируют изотропную поляризацию обоих типов. Структура (рис. 4г) из двух сдвинутых прямоугольных решеток с различными диэлектрическими шарами в рассматриваемом низкочастотном приближении может создавать только изотропную электрическую поляризацию. Такой метаматериал представляет собой две сдвинутые на полпериода одинаковые кубические решетки с разными шаровыми МА в них. Замена металлических цилиндров на диэлектрические возможна. Замена шаров на симметрично расположенные кубики также возможна. Кубики существенно удобнее для моделирования. Но технологически кубики невозможно расположить в узлах решетки без случайных поворотов. В ряде работ было предложено использовать ИС рис. 4г как метаматериал с одновременно отрицательными  $\varepsilon$  и  $\mu$  [27–31]. Приводилось такое объяснение. Пусть совпадают резонансные частоты какихлибо Е-мод и Н-мод для двух различных шариков. Тогда они дают вклад в поляризацию как электрическую, так и магнитную. Чуть сдвигая частоту вверх, мы как бы должны получить поляризации, сдвинутые по фазе относительно полей. Здесь можно возразить так. Во-первых, все резонансы высокочастотные. Известные изотропные диэлектрики с малыми потерями не обладают очень большими ДП. МА необходимо включить в диэлектрическую основу, что снижает эффект. Во-вторых, мода отдельного резонатора и поле резонатора в фотонном кристалле при движении волны в нем совершенно различны. Волна заданного направления  ${\bf k}$  в кристалле из таких МА соответствует определенной точке на дисперсионной поверхности, и изменение частоты ведет к изменению k. От этого зависит направление поляризации. В силу открытости сферического резонатора его моды являются квазисобственными с комплексными резонансными частотами. Они не образуют полную систему функций, а МА обменивается энергией со всеми соседями, включая удаленные. Поле внутри МА при возбуждении рассматриваемой волной состоит из бесконечного набора таких мод и функций непрерывного спектра, т. е. нельзя выделить одну моду. В-третьих, рассматриваемый кристалл обладает сильной ПД, т.е. не является изотропным, поскольку на высоких резонансных частотах возбуждение шара зависит от направления k, а отклик не является локальным. Вчетвертых, в диэлектрических структурах магнитные свойства можно не вводить, описывая их только тензором ДП. В-пятых, даже если из каких-то соображений вводится магнитная поляризация, необходимо доказывать, что какие-то ее компоненты находятся в противофазе к магнитному полю, чтобы утверждать об отрицательности компонент МП.

#### 4. ИНТЕГРАЛЬНОЕ И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим фотонный кристалл с кубическими ячейками с размером граней а, заполненными диэлектрической средой с ДП  $\tilde{\varepsilon}$ , и диэлектрические тела или MA в ней объема V с поверхностью S. Область может быть многосвязной, т.е. объем может состоять из суммы объемов, ограниченных не контактирующими поверхностями. Комплексную ДП  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon'(\omega)$  МА считаем не зависящей от координаты **r** внутри тела, а границы МА резкими, т. е. ДП при переходе через границу терпит скачок:  $\varepsilon^-(\omega, \mathbf{r}) \neq \varepsilon^+(\omega, \mathbf{r}) = \tilde{\varepsilon}, \ \mathbf{r} \in S$ . При этом на поверхности S терпит скачок и нормальная компонента электрического поля:  $E_n^- \tilde{\varepsilon} = E_n^+ \tilde{\varepsilon}$ , а на границе имеются источники — наведенная поверхностная плотность связанных зарядов. Очевидно, что ее интеграл по всей поверхности, т.е. полный связанный заряд, равен нулю. В такой постановке задачу удобно решать методом объемных интегральных уравнений с использованием периодической скалярной  $\Phi\Gamma$  [1]:

$$\tilde{G}\left(\mathbf{r}\right) = \frac{1}{a^3} \times$$

$$\times \sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-i\left[\tilde{k}_{xk}x + \tilde{k}_{yl}y + \tilde{k}_{zm}z\right]\right)}{\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 - k_0^2 \tilde{\varepsilon}}.$$
 (1)

Здесь  $\tilde{k}_{xk}=k_x+2k\pi/a$ ,  $\tilde{k}_{yl}=k_y+2l\pi/a$ ,  $\tilde{k}_{zm}=k_z+2m\pi/a$ , что и определяет периодичность по  $\mathbf{k}'$  с точностью до пространственных гармоник. В случае учета потерь  $\mathbf{k}=\mathbf{k}'-i\mathbf{k}''$ .  $\Phi\Gamma$  (1) удовлетворяет уравнению

$$\left(\nabla^{2}+k_{0}^{2}\tilde{\varepsilon}\right)\tilde{G}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)=-\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\exp\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'\right).$$

Диэлектрическое тело с ДП  $\varepsilon$  в основе с ДП  $\tilde{\varepsilon}$ создает плотность тока поляризации  $\mathbf{J}_{p}(\mathbf{r})=$  $=i\omega\varepsilon_0\left(\varepsilon-\tilde{\varepsilon}\right)\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right)$ . Ток поляризации является дополнительным к току смещения в основе. Отсюда нетрудно видеть, что в среде с отрицательной ДП имеет место сдвиг по фазе на  $-\pi/2$ между током поляризации и полем, тогда как в обычном диэлектрике этот сдвиг равен  $\pi/2$ . Такой подход применим для всех частот и любых рассматриваемых МА. Для сверхнизких частот  $\mathbf{J}_{p}\left(\mathbf{r}\right)=\left(\varepsilon_{0}\omega_{p}^{2}/\omega_{c}\right)\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right)=\sigma_{0}\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right),$  где обозначена проводимость на постоянном токе. На низких частотах это проводимость Друде. В оптике существенен член Лоренца. Для тонких и длинных проволочных структур важна только продольная компонента тока, что упрощает расчет. Интеграл от  $\Phi\Gamma$  (1) с плотностью  $\mathbf{J}_{p}\left(\mathbf{r}\right)$  дает векторпотенциал A(r), дифференцируя который приходим к объемному интегральному уравнению в виде  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = (i\omega\varepsilon_0\tilde{\varepsilon})^{-1} \left(\nabla\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}) + k_0^2\tilde{\varepsilon}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)$ . Далее обозначим  $k=k_0\sqrt{\tilde{\varepsilon}}$ . Кроме этого имеем магнитное поле  $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ . Можно записать несколько уравнений для поля Е, для поля Н, для их комбинации, а также уравнения, нагруженные поверхностными интегралами по границе S, и без них [1]. В общем случае они имеют форму интегродифференциальных уравнений, поскольку искомые величины находятся как под знаком интеграла, так и под знаком производных. Использование поверхностных интегралов, как видно из рис. 2, 4, неудобно для алгоритмизации. Мы будем использовать объемное интегральное уравнение

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) (2 + \varepsilon (\mathbf{r}) / \tilde{\varepsilon}) / 3 =$$

$$= \text{p.v.} \int_{V} \hat{L} \hat{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\varepsilon (\mathbf{r}') / \tilde{\varepsilon} - 1) \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^{3}r'. \quad (2)$$

Здесь обозначен оператор  $\hat{L} \equiv k^2 \hat{I} + \nabla \otimes \nabla$ . Интеграл в (2) берется как главное значение по Коши. Зависимость  $\Phi\Gamma$  от k и  $\mathbf{k}$  опущена, но как раз она определяет дисперсионное уравнение. В правой части (2) не зависящий внутри объема однородных частиц множитель  $\kappa = \varepsilon/\tilde{\varepsilon} - 1$  выносим из-под знака интеграла. В силу  $\Phi\Gamma$  (1) это интегральное уравнение достаточно решить только в одной (нулевой) ячейке периодичности и только внутри частиц, где  $\varepsilon(\mathbf{r}) \neq \tilde{\varepsilon}$ . Поэтому множитель у поля в левой части есть  $1 + \kappa/3$ .  $\Phi\Gamma$  обеспечивает правильное взаимовлияние всего бесконечного ансамбля МА. В (2) можно использовать соотношение  $\hat{L}\tilde{G}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\hat{L}'\tilde{G}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ , где штрих означает дифференцирование по штрихованным координатам (точке истока). Поле Е будем аппроксимировать объемными кубическими кусочно-постоянными конечными элементами, нумеруя их одномерным индексом m. Пусть таких элементов M. Метод Галеркина для (2) приводит к однородной системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)  $(1+\kappa/3)$   $IE = \kappa GE$  размерности 3M, где I — единичная матрица размерности 3M, E — вектор-столбец размерности 3M, состоящий из вектор-столбцов  $E^x,E^y$  и  $E^z$  размерности M. Значения  $E^x_m,E^y_m$  и  $E^z_m$ соответствуют значениям соответствующих компонент электрического поля в элементе с номером m. Матрица  $\check{G}$  размерности 3M имеет блочную структуру  $\breve{G}_{mm'}^{\alpha\beta}$ , где  $\alpha$ ,  $\beta$  принимают значения x, y, z. Дисперсионное уравнение имеет вид равенства нулю определителя указанной СЛАУ. Находить корни такого уравнения весьма сложно. Удобнее использовать стационарный квадратичный функционал, получающийся умножением (2) скалярно на  $\mathbf{E}^*(\mathbf{r})$ и интегрированием по объему. Его удобно разрешить относительно  $k^2$ :

$$k^{2} = \frac{(1+k/3)\int_{V} |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^{2} d^{3}r - \kappa \cdot \text{p.v.} \int_{V} \int_{V} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \nabla \otimes \nabla \tilde{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^{3}r' d^{3}r}{\int_{V} \int_{V} \mathbf{E}^{*} \tilde{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^{3}r' d^{3}r}.$$
(3)

Правая часть (3) нелинейно зависит от k, поэтому уравнение (3) следует решать совместно с уравнением (2) итерационно. Удобно сначала найти приближенное решение дисперсионного уравнения, задать одну из амплитуд, например,  $E_1^x$ , что задает амплитуду волны, и решить СЛАУ прямыми методами. Это позволяет уточнить решение дисперсионного уравнения и далее использовать итерации. Если по каждой из координат разбить частицу на 10 конечных элементов, то всего получим  $10^3$  элементов, а размерность задачи будет  $3 \cdot 10^3$ . Для матрицы СЛАУ и функционала (3) можно написать квадратурные формулы. Диагональные элементы при вычислении интегралов в смысле главного значения можно приравнять нулю или использовать другие приближенные оценки.

В принципе дисперсионное уравнение позволяет при задании  ${\bf k}$  определить  $\omega$ . Без учета диссипации k можно задавать произвольно. Фиксируя  $k_0$ , можно построить поверхность изочастот в **k**-пространстве. Величина  $\mathbf{v}_{q} = \nabla \omega \left( \mathbf{k} \right)$  есть групповая скорость, показывающая направление движения энергии. В случае диссипации групповую скорость использовать нельзя, следует вычислять усредненный по ячейке вектор Пойнтинга  $\langle \mathbf{S} \rangle$ . Он может не совпадать по направлению с  $\mathbf{v}_{q}$ . При этом вектор  $\mathbf{k} = \mathbf{k}' - i\mathbf{k}''$  является комплексным. Подлежащих определению скалярных компонент становится больше (шесть) и одного комплексного дисперсионного уравнения уже недостаточно. k-пространство также становится шестимерным. Необходимо вычислять вектор Пойнтинга  $\mathbf{S} = \operatorname{Re}\left(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\right)/2$  и использовать условие  $\mathbf{S}/|\mathbf{S}| = \mathbf{k}''/|\mathbf{k}''|$ . Его смысл в том, что направление затухания волны  ${\bf k}''$  совпадает с направлением движения энергии.

Поскольку дисперсионное уравнение в виде равенства нулю определителя большого порядка очень сложное, более простой приближенный подход может быть основан на использовании уравнения в виде функционала, построенного на основе (2). Для этого умножим (2) на  $\mathbf{E}^*$  и проинтегрируем по объему или МА. Приближенное уравнение получается, если выбрать электрическое поле (или ток) из физических соображений. Для проволочных МА, когда глубина проникновения меньше их радиуса, вместо поля удобно использовать осевой ток, а граничные условия налагать на поверхности проволочек. Это приводит к простым дисперсионным уравнениям [26]. Для МА в виде однородного диэлектрического цилиндра или шара удобно использовать явные низкочастотные решения уравнения Гельмгольца внутри и определять неизвестные коэффициенты из условий экстремума функционала. Часто, например для тонких и длинных цилиндров, можно пренебречь какими-то компонентами поля (радиальной и/или азимутальной).

#### 5. ГОМОГЕНИЗАЦИЯ

Гомогенизация — процедура (в общем случае неоднозначная) получения эффективных параметров однородных (гомогенных) сред, эквивалентных электродинамически в некотором смысле исходным ИС, основанная на решении обратных задач. В общем случае для нее нужны некоторые процедуры усреднения. Зависимость методов усреднения одна из причин неоднозначности. Другая причина заключается в неоднозначности модели гомогенной среды. Третья причина заключается в разных методах гомогенизации. Один из первых методов, примененный в теории искусственных диэлектриков, использование параметров дифракции [17]. Для выполнения условий теоремы погашения ИС должна иметь много периодов по каждому измерению. Данный подход электродинамически сложный, особенно для 3D-задач. Второй метод основан на сравнениях расчетов дисперсии по электродинамическим моделям (например, по уравнениям типа (2), (3)) с дисперсией на основе уравнения Френеля. Он относительно простой, если получено микроскопическое дисперсионное уравнение. Третий способ, который будем использовать здесь, это гомогенизация на основе вычисления усредненных по ячейке периодичности поляризацией для волны, определяемой волновым числом  $k_0$  и волновым вектором **k**. Концептуально он соответствует определению параметров макроскопической электродинамики путем усреднения по физически бесконечно малому объему. Однако размер ячейки периодичности а не обязательно мал по сравнению с длиной волны. Во всяком случае, при строгом решении уравнений Максвелла, усреднения возможны при любых соотношениях, если только не накладывается условие  $a \ll \lambda$ . Это условие важно для введения локальных проницаемостей. Введем усредненные по ячейке поля, поляризации и индукции, например,

$$\langle E_x \rangle = \frac{1}{a^3} \int_V E_x (\mathbf{r}) d^3 r.$$

Электрическую поляризацию запишем как

$$\langle \mathbf{P}^e \rangle = \varepsilon_0 \left( \hat{\varepsilon}_e - \tilde{\varepsilon} \hat{I} \right) \langle \mathbf{E} \rangle + c^{-1} \hat{\xi} \langle \mathbf{H} \rangle.$$

Здесь мы рассмотрели бианизотропную модель. Аналогично для магнитной поляризации

$$\langle \mathbf{P}^m \rangle = \mu_0 \left( \hat{\mu}_e - \hat{I} \right) \langle \mathbf{H} \rangle + c^{-1} \hat{\zeta} \langle \mathbf{E} \rangle.$$

Введем намагниченность  $\mathbf{M} = (\hat{\mu}_e - \hat{I}) \, \mathbf{H}$ . Записывая другие усредненные компоненты, получаем СЛАУ для определения эффективных параметров. Подход годится для анизотропной и бианизотропной моделей сред с учетом соотношений симметрии для материальных параметров. При большом числе неизвестных можно написать переопределенную СЛАУ и решать ее методом регуляризации. В случае изотропной модели  $\hat{\xi} = \hat{\zeta} = 0$ . В случае биизотропной модели эти параметры — ненулевые псевдоскаляры. В случае диэлектрической анизотропной среды имеем три уравнения:

$$\langle P_x^e \rangle = \varepsilon_0 \left( (\varepsilon_{exx} - \tilde{\varepsilon}) \langle E_x \rangle + \varepsilon_{exy} \langle E_y \rangle + \varepsilon_{exz} \langle E_z \rangle \right)$$

и два аналогичных для других компонент. При пренебрежении диссипацией имеют место условия симметрии Онзагера – Казимира  $\varepsilon_{e\alpha\beta} = \varepsilon_{e\beta\alpha}$ , т. е. тензор является симметричным. При диссипации тензор эрмитовым не будет, но будет выполнено условие  $\varepsilon'_{e\alpha\beta} = \varepsilon'_{e\beta\alpha}$ . Из трех уравнений определяются три величины, если учесть условия симметрии. Уравнения упрощаются при приведении тензора ДП к главным осям. Итак, по трем поляризациям можно определить три компоненты тензора ДП. Если есть только два тензора  $\hat{\varepsilon}_e$  и  $\hat{\mu}_e$  и их можно одновременно привести к диагональному виду, то шесть в общем случае комплексных компонент можно определить из шести независимых комплексных скалярных уравнений Максвелла. Однако возможность такого приведения зависит от структуры ИС. Например, пусть у нас имеется ИС с магнитными и электрическими диполями в узлах двух одинаковых вложенных кубических решеток. Мы можем изготовить ИС, сдвинув решетки друг относительно друга на произвольное расстояние. Формально мы также можем повернуть одну решетку относительно другой на три произвольных угла относительно разных осей. Навряд ли следует реализовывать такой мысленный эксперимент, но это отличает ИС от природных сред, где симметрия существенна. В случае только диэлектрической модели ИС без диссипации условия Онзагера - Казимира выполняются и в общем случае тензор приводится к диагональному виду. Может оказаться, что более удобна система координат, в которой достаточно определить шесть его компонент из шести уравнений Максвелла, а не три. Для интересующей нас изотропной ИС достаточно записать соотношения только для одной компоненты. Имеем

$$\varepsilon_{e} = \tilde{\varepsilon} + \varepsilon_{0}^{-1} \langle P_{x}^{e} \rangle / \langle E_{x} \rangle,$$

$$\mu_{e} = 1 + \mu_{0}^{-1} \langle P_{x}^{m} \rangle / \langle H_{x} \rangle.$$
(4)

Получив решение задачи для  ${\bf E}$ , поле  ${\bf h}({\bf r})=$   $=\nabla\times{\bf A}({\bf r})$  находится как  $H=\check{A}E$ , где введенная матрица определяется интегродифференциальным оператором получения магнитного поля. Рассмотрим вычисление поляризаций:

$$\langle \mathbf{P}^e \rangle = \frac{1}{a^3} \int_{V} \rho(\mathbf{r}) \, \mathbf{r} \, d^3 r,$$

$$\langle \mathbf{M} \rangle = \frac{1}{a^3} \int_{V} \mathbf{r} \times \mathbf{J}_p(\mathbf{r}) \, d^3 r.$$
(5)

Здесь имеется плотность заряда  $\rho(\mathbf{r})=i\nabla\cdot\mathbf{J}_p/\omega==-\varepsilon_0\nabla\cdot[(\varepsilon-\tilde{\varepsilon})\,\mathbf{E}].$  Поскольку мы рассматриваем МА из однородного диэлектрика, внутри него  $\nabla\cdot\mathbf{E}$ . Поэтому следует вычислить поверхностную дивергенцию, связанную с наведенной поверхностной плотностью заряда  $\rho_S=\varepsilon_0E_\nu\,(1-\tilde{\varepsilon}/\varepsilon).$  Здесь  $E_\nu$ — внешняя нормальная координата. Поскольку  $\nabla\cdot(\varepsilon\mathbf{E})=0$ , имеем  $\tilde{\varepsilon}\nabla\cdot\mathbf{E}=-(\tilde{\varepsilon}/\varepsilon)\,\mathbf{E}\cdot\nabla\varepsilon,$   $\nabla\varepsilon=(\tilde{\varepsilon}-\varepsilon)$ , и плотность заряда пропорциональна дельта-функции от нормальной координаты. Поэтому первый интеграл в (5) становится поверхностным:

$$\langle \mathbf{P}^e \rangle = \frac{1}{a^3} \oint_{S} \rho_S(\mathbf{r}) \mathbf{r} d^2 r.$$

Обозначим  $\chi = \varepsilon/\tilde{\varepsilon} - 1$ . Уравнение (2) можно записать в следующей форме:  $\mathbf{E} = \hat{G}\left(\chi\mathbf{E}\right),\ \hat{G} = \hat{L}\hat{\tilde{G}}\left(\ \right),$  где  $\hat{\tilde{G}}$  — интегральный оператор с ядром  $\tilde{G},\ \hat{L} = \nabla \otimes \nabla + k^2$  — дифференциальный оператор. Поскольку  $\nabla \cdot \nabla \otimes \nabla = \nabla \cdot \nabla^2$  и  $\left(\nabla^2 + k^2\right) \tilde{G} = -\delta\left(\mathbf{r}\right)$ , нетрудно видеть, что действие оператора дивергенции слева на интегральное уравнение дает тождество. Решая это уравнение, следует определять нормальную компоненту электрического поля и поверхностную плотность заряда.

Рассмотрим ряд простых случаев. Пусть имеем фотонный кристалл из проволочных колец, ориентированных вдоль оси z. Для него  $\varepsilon_e=1,\ \mu_{ezz}=\mu,\ \mu_{exx}=\mu_{eyy}=1.$  Имеем одну компоненту электрического тока  $J_{\varphi}=\sigma\left(\omega\right)E_{\varphi}$ . Пусть для простоты радиус проволочки меньше толщины скин-слоя, а ток распределен равномерно. Соленоидальный ток создает две компоненты вектор-потенциала [25]:

$$A_{\rho} = \int_{V} J_{\varphi} \sin(\varphi - \varphi') \,\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \,d^{3}r',$$

$$A_{\varphi} = \int_{V} J_{\varphi} \cos(\varphi - \varphi') \,\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \,d^{3}r'.$$

Интегрирование проводится по объему кольца, а ток можно вынести из-под интеграла, поскольку он постоянен. Считаем проволочки тонкими, а поле полностью приникающим в них. Нам удобнее использовать обычную ФГ

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |4\pi (\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^{-1} \exp(-ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|),$$

а затем ее следует периодически продолжить. Имеем

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \rho^{-1} \partial_{\rho} (\rho A_{\rho}) + \rho^{-1} \partial_{\varphi} A_{\varphi},$$

а для ФГ запишем выражения

$$G_{xlm} = \exp(-ilk_x a - imk_z a) G_{lm},$$
  

$$G_{ylm} = \exp(-ilk_y a - imk_z a) G_{lm}.$$

 $\Phi\Gamma$   $G_{xlm}$  соответствует источник, расположенный в точке  $x = la, y = 0, z = ma, a \ \Phi\Gamma \ G_{ylm}$  — источник, расположенный в точке x = 0, y = la, z = ma. Однако поля от всех источников рассматриваются в нулевой ячейке. Поэтому с помощью суммирования

$$\tilde{G} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp\left(-ia\left[mk_z + l\left(k_x + k_y\right)\right]\right) G_{lm}$$

получаем периодическую ФГ, действующую в нулевой ячейке, связанной с началом координат. Обозначим  $\psi_{lm}(k_x, k_y, k_z) = a | mk_z + l (k_x + k_y) |$ . Для  $\Phi\Gamma$ имеем [25]

$$G_{lm} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-in\left(\phi - \phi'\right)\right) \int_{0}^{\infty} \frac{\exp\left(-\sqrt{\kappa^2 - k_0^2} \left|z - z' - ma\right|\right) J_n\left(\kappa\rho\right) J_n\left(\kappa\left(\rho' + la\right)\right)}{4\pi\sqrt{\kappa^2 - k_0^2}} \kappa \, d\kappa. \tag{6}$$

Очевидно, что  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{00}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . Вычисляя интегральное уравнение в нулевой ячейке, получаем решение задачи. Чтобы не переходить в тороидальную систему координат, мы, оставаясь в цилиндрической, заменим круглое сечение проволоки радиуса  $r_0$  на прямоугольное площади  $4r_0^2$ , почти не изменяя результат. Считая поле постоянным, имеем

$$\frac{1}{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin(\varphi - \varphi') \exp(-in(\varphi - \varphi')) d\varphi' = i(\delta_{n,-1} - \delta_{n,1}),$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{0}^{2\pi} \cos(\varphi - \varphi') \exp(-in(\varphi - \varphi')) d\varphi' = \delta_{n,-1} + \delta_{n,1}.$$

Обозначая интеграл в (6) как  $g_{nim}(\rho, z \mid \rho', z')$ , получаем

$$A_{\rho} = i \int \left( g_{-1lm} \left( \rho, z \mid \rho', z' \right) - \right.$$
$$\left. - g_{1lm} \left( \rho, z \mid \rho', z' \right) \right) \rho' \, d\rho' dz' = 0,$$

$$A_{\varphi} = 2 \int g_{1lm} \left( \rho, z \mid \rho', z' \right) \rho' \, d\rho' dz'.$$

Мы воспользовались равенством  $J_{-1}(x) = -J_1(x)$ для функций Бесселя. Вектор-потенциал имеет одну компоненту, не зависящую от  $\varphi$ . Электрическое поле имеет три компоненты  $E_{\rho} = \partial_{\rho} A_{\varphi} / (i\omega \varepsilon_0), E_{\varphi} =$  $=k_0^2A_{\varphi}/(i\omega\varepsilon_0), E_z=\partial_zA_{\varphi}/(i\omega\varepsilon_0).$  Магнитное поле имеет две компоненты  $H_{
ho} = -\partial_z A_{arphi}$  и  $H_z =$  $= \rho^{-1}\partial_{\rho}(\rho A_{\varphi})$ . В декартовой системе имеются все шесть компонент. Компонентами  $E_{\rho}$  и  $E_{z}$  внутри проволочки можно пренебречь по сравнению с постоянной азимутальной компонентой поля. Внутри проволочки электрическое поле  $E_{\varphi}$  равно сумме всех продуцированных периодической ФГ откликов:

$$E_{\varphi} = \frac{\left(\rho, z \mid \rho', z'\right) - \left(-g_{1lm}\left(\rho, z \mid \rho', z'\right)\right) \rho' d\rho' dz'}{\left(-g_{1lm}\left(\rho, z \mid \rho', z'\right)\right) \rho' d\rho' dz'} = 0,$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp\left(-ia\left[mk_z + l\left(k_x + k_y\right)\right]\right) E_{\varphi lm}, \quad (7)$$

$$E_{\varphi lm} = \frac{\pi k_0^2 \sigma(\omega)}{i\omega \varepsilon_0} \int \rho' d\rho' dz' \int_0^\infty \frac{\exp\left(-\sqrt{\kappa^2 - k_0^2} |z - z' - ma|\right) J_1(\kappa \rho) J_1(\kappa(\rho' + la))}{\sqrt{\kappa^2 - k_0^2}} \kappa d\kappa.$$
 (8)

В (7) мы проинтегрировали по углу, поэтому интегрирование в (8) теперь выполняется по сечению провода. Считая поле постоянным, умножим (7) на  $\rho$ , проинтегрируем еще раз по сечению и сократим на поле. Слева в (7) останется  $4Rr_0^2$ . Правую часть (8) рассмотрим отдельно для нулевого и ненулевого значений индекса m, обозначив  $\alpha = \sqrt{\kappa^2 - k_0^2}$ . В первом случае область интегрирования по штрихованной координате разбиваем на две. Результат имеет вид

$$f_0(\kappa, k_0, r_0) = \int_{-r_0}^{r_0} \int_{-r_0}^{r_0} \exp\left(-\sqrt{\kappa^2 - k_0^2} |z - z'|\right) dz dz' = \frac{4r_0}{\alpha} \left(1 - \frac{1 - \exp(-2\alpha r_0)}{2\alpha r_0}\right).$$

Если величина  $\alpha$  мала, то  $\kappa^2 \approx k_0^2$  и  $f=4r_0^2$ . Во втором случае интегралы с положительными и равными по модулю отрицательными индексами равны

$$\begin{split} f_m\left(\kappa, k_0, r_0\right) &= f_{-|m|}\left(\kappa, k_0, r_0\right) = \\ &= -4 \exp\left(-\alpha \left|m\right| a\right) \left(\frac{\sinh\left(\alpha r_0\right)}{\alpha}\right)^2. \end{split}$$

Переходя к суммированию по положительным индексам, получаем  $2f_m(\kappa,k_0,r_0)$ . Вычисляя интегралы по  $\rho'$ , будем интегрировать по областям  $la-R-r_0<\rho'< la-R+r_0, la+R-r_0<\rho'< la+R+r_0$ . Получаем

$$\begin{split} I_{l}\left(\kappa,r_{0},R\right) &= \int\limits_{la-R-r_{0}}^{la-R+r_{0}} J_{1}\left(\kappa\rho\right)\rho\,d\rho + \\ &+ \int\limits_{la+R-r_{0}}^{la+R+r_{0}} J_{1}\left(\kappa\rho\right)\rho\,d\rho \approx 2r_{0}\left[\left(la-R\right)J_{1}\left(\kappa\left(la-R\right)\right) + \\ &+ \left(la+R\right)J_{1}\left(\kappa\left(la+r\right)\right)\right]. \end{split}$$

Здесь R — радиус кольца. Мы воспользовались малостью радиуса проволочки и теоремой о среднем значении интеграла. Имеем  $I_{-l}=I_l$ , поэтому суммируем по положительным индексам, удваивая  $I_l$ . Получим аналогичный результат для комплексно-сопряженного дисперсионного уравнения. Учитывая, что  $\sigma\left(\omega\right)=i\omega\varepsilon_0\left(\varepsilon_L-\omega_P^2/\left(\omega^2-i\omega\omega_c\right)\right)$  и перемножая оба результата, получаем уравнение

$$1 = \left(\frac{\pi k_0^2 |\sigma(\omega)|}{\omega \varepsilon_0}\right)^2 \times \left| \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp\left(-i\psi_{ml}\left(k_x, k_y, k_z\right)\right) \times \left(2 - \delta_{m0}\right) \left(2 - \delta_{l0}\right) \times \left(2 - \delta_{m0}\right) \left(2 - \delta_{l0}\right) \times \left(\frac{f_m\left(\kappa, k_0, r_0\right) I_l\left(\kappa, k_0, r_0\right) J_1\left(\kappa R\right)}{r_0 \sqrt{\kappa^2 - k_0^2}} \kappa \, d\kappa \right|^2.$$
(9)

Оно связывает частоту и волновой вектор. Этот результат показывает, что в некоординатных задачах решения принимают сложный вид даже при сильных упрощениях. В низкочастотном пределе  $\alpha=\kappa$ , и из (9) можно явно выразить  $k_0^2$ . Магнитный момент для задачи принимает вид  $\langle M_z \rangle = J_\varphi \left( \pi r_0 R \right)^2 / a^3$ . Для решения вопроса о знаке МП необходимо вычислить усредненную компоненту поля:

$$\langle H_z \rangle = \frac{1}{a^3} \int_{-a/2}^{a/2} dx \int_{-a/2}^{a/2} dy \int_{-a/2}^{a/2} dz H_z (\mathbf{r}, \mathbf{k}, k_0).$$

Такие вычисления удобнее проводить в декартовой системе координат. Знак МП определяет формула  $\mu=1+\langle M_z\rangle/\langle H_z\rangle$ . Если диссипации нет, намагниченность должна быть в противофазе к полю, т. е. отрицательной, и по модулю превышать единицу.

Покажем, как эта задача решается в декартовой системе. Далее вместо (9) выведем новое дисперсионное уравнение, считая, рамку прямоугольной. Кольцо радиуса R заменим прямоугольной рамкой с плечом  $b=R\sqrt{\pi}$  и сечением  $4\delta^2=\pi r_0^2$ . Вынесем из-под интеграла плотность J, направленную по часовой стенке вдоль осей x и y. Получаем компоненты вектор-потенциала и поля:

$$A_{x}(\mathbf{r}) = \frac{-16iJ}{a^{3}} \times \times \sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-i\left[\tilde{k}_{xk}x + \tilde{k}_{yl}y + \tilde{k}_{zm}z\right]\right)}{\tilde{k}_{xk}^{2} + \tilde{k}_{yl}^{2} + \tilde{k}_{zm}^{2} - k_{0}^{2}} \times \times \frac{\sin\left(\tilde{k}_{zm}\delta\right)}{\tilde{k}_{zm}} \frac{\sin\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right)}{\tilde{k}_{xk}} \frac{\sin\left(\tilde{k}_{yl}\delta\right)}{\tilde{k}_{yl}} \times \times \sin\left(\tilde{k}_{yl}b/2\right), \quad (10)$$

$$A_{y}(\mathbf{r}) = \frac{16iJ}{a^{3}} \times \times \sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-i\left[\tilde{k}_{xk}x + \tilde{k}_{yl}y + \tilde{k}_{zm}z\right]\right)}{\tilde{k}_{xk}^{2} + \tilde{k}_{yl}^{2} + \tilde{k}_{zm}^{2} - k_{0}^{2}} \times \times \frac{\sin\left(\tilde{k}_{zm}\delta\right)}{\tilde{k}_{zm}} \frac{\sin\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right)}{\tilde{k}_{xk}} \frac{\sin\left(\tilde{k}_{yl}\delta\right)}{\tilde{k}_{yl}} \times \times \sin\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right), \quad (11)$$

$$H_{z} = \partial_{x} A_{y} \left(\mathbf{r}\right) - \partial_{y} A_{x} \left(\mathbf{r}\right) = -\frac{4Jb^{2}\delta^{2}}{a^{3}} \times \left(\sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-i\left[\tilde{k}_{xk}x + \tilde{k}_{yl}y + \tilde{k}_{zm}z\right]\right)}{\tilde{k}_{xk}^{2} + \tilde{k}_{xk}^{2} + \tilde{k}_{xk}^{2} - k_{0}^{2}} \times F_{mlk} \left(\mathbf{k}\right), \quad (12)$$

$$F_{mlk}(\mathbf{k}) = \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}\delta\right) \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right) \times \times \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}b/2\right) \left[\left(\tilde{k}_{yl}\right)^{2} \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}\delta\right) + \left(\tilde{k}_{xk}\right)^{2} \times \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}\delta\right)\right]. \quad (13)$$

Теперь надо усреднить поле (12). Усредняем следующим образом:

$$f\left(\tilde{k}_{xk}\right) = \frac{1}{a^3} \int_{-a/2}^{a/2} \exp\left(-i\tilde{k}_{xk}x\right) dx =$$

$$= \frac{2\sin\left(\tilde{k}_{xk}a/2\right)}{\tilde{k}_{xk}a} = \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}a/2\right).$$

Поэтому

$$\langle H_z \rangle = -\frac{4Jb^2\delta^2}{a^3} \times \\ \times \sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}a/2\right) \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}a/2\right) \operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}a/2\right)}{\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 - k_0^2} \times \\ \times F_{mlk}\left(\mathbf{k}\right). \quad (14)$$

Функции sinc  $= \sin(x)/x$  четные и быстро убывают. В (14) существенный вклад вносит нулевой член суммы, но строгий результат требует учета большого числа членов. Теперь запишем

$$\chi_{ezz} = \mu - 1 = -\frac{1}{\sum_{k,l,m=-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}a/2\right)\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}a/2\right)\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}a/2\right)}{\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 - k_0^2}} F_{mlk}\left(\mathbf{k}\right)}$$
(15)

В (15) следует подставлять решение микроскопического дисперсионного уравнения. Если же подставить квадрат волнового числа из макроскопического уравнения Френеля  $k_0^2 = \left(k_x^2 + k_y^2\right)/\mu_{ezz} + k_z^2$ , то, задавая  ${\bf k}$ , получаем неявное уравнение. Его решение симметрично по волновому вектору,  $\mu({\bf k}) = \mu(-{\bf k})$ . Упрощение может быть достигнуто выбором направления распространения волны. Так, выбирая  $k_x = k_y$ ,  $k_z = 0$ , из уравнения (9) найдем частоту и подставим в (15). Имеем  $F_{000}({\bf k}_\perp) = 2 \mathrm{sinc} \left(k_x \delta\right) \left[k_x \mathrm{sinc} \left(k_x b/2\right)\right]^2$  и следующее нулевое приближение:

$$\mu_{(0)} = 1 - \frac{2k_x^2 - k_0^2}{2\left[k_x \mathrm{sinc}\left(k_x a/2\right) \mathrm{sinc}\left(k_x b/2\right)\right]^2}.$$

Оно весьма грубое, что определяется медленной сходимостью ряда (15). Для медленной волны знак восприимчивости  $\chi_{ezz}^{(0)}$  отрицательный. Из уравнения Френеля следует  $2k_x^2 = \mu k_0^2$ , поэтому в низкочастотном пределе имеет место решение  $\mu_{(0)} = 1$ . Если  $\mu < 0$ , то волновые числа мнимые. Это возможно

при брэгговском резонансе в запрещенной зоне. Для медленной волны максимальное замедление имеет место при  $k_x = k_y = \pi/a$ , откуда получаем максимальное значение  $\mu = 2\pi^2/\left(k_0a\right)^2 > 1$ . Частоту максимального замедления можно найти из дисперсионного уравнения. Выше частоты резонанса в запрещенной зоне  $\mu < 0$ . Однако это так в предположении, что уравнение Френеля еще справедливо. Такой подход для кристалла из металлических рамок использован в работе [26]. Здесь имеет место аналогия с кристаллооптикой, для которой сильная ПД и брэгговские резонансы наступают в рентгеновском диапазоне. Используя же приближенную формулу с учетом только одного члена ряда, получаем

$$\mu_{(0)} = 1 - \frac{2\pi^2 - k_0 a}{8 \operatorname{sinc}^2 (\pi b / (2a))} \approx 1 - \frac{2\pi^2 - k_0 a}{8}.$$

Мы учли, что  $b \ll a$ . В общем случае обозначим сумму в знаменателе (15) как

$$S = S_0(\mathbf{k}) + \tilde{S}(\mathbf{k}) + \tilde{S}(-\mathbf{k}),$$

$$\tilde{S} = S_{00m} (\mathbf{k}) + S_{k00} (\mathbf{k}) + S_{0l0} (\mathbf{k}) + S_{0lm} (\mathbf{k}) + S_{k0m} (\mathbf{k}) + S_{kl0} (\mathbf{k}) + S_{klm} (\mathbf{k}),$$

где

$$S_0(\mathbf{k}, k_0) = \frac{\operatorname{sinc}(k_x a/2) \operatorname{sinc}(k_y a/2) \operatorname{sinc}(k_z a/2)}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_0^2} \times$$

 $\times F_{000}$  (**k**),

$$S_{00m}(\mathbf{k}, k_0) =$$

$$=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\mathrm{sinc}\left(\tilde{k}_{xk}a/2\right)\mathrm{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}a/2\right)\mathrm{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}a/2\right)}{k_{x}^{2}+k_{y}^{2}+\tilde{k}_{zm}^{2}-k_{0}^{2}}\times F_{00m}\left(\mathbf{k}\right),$$

$$S_{0lm}({\bf k}, k_0) =$$

$$=\sum_{l,m=1}^{\infty}\frac{\mathrm{sinc}\left(k_{x}a/2\right)\mathrm{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}a/2\right)\mathrm{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}a/2\right)}{k_{x}^{2}+\tilde{k}_{yl}^{2}+\tilde{k}_{zm}^{2}-k_{0}^{2}}\times$$

$$\times F_{0lm}\left(\mathbf{k}\right)$$
,

$$S_{klm}\left(\mathbf{k},k_{0}\right)=$$

$$= \sum_{k,l,m=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}(k_{x}a/2)\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{yl}a/2\right)\operatorname{sinc}\left(\tilde{k}_{zm}a/2\right)}{k_{x}^{2} + \tilde{k}_{yl}^{2} + \tilde{k}_{zm}^{2} - k_{0}^{2}} \times F_{klm}\left(\mathbf{k}\right).$$

Все остальные суммы вычисляются аналогично: тройные, двойные и однократные, взятые по положительным индексам. Тогда

$$\mu(\mathbf{k}, k_0) = 1 - \frac{1}{S_0(\mathbf{k}) + \tilde{S}(\mathbf{k}) + \tilde{S}(-\mathbf{k})}.$$

Имеем  $\tilde{S}(\mathbf{k}) = \tilde{S}(-\mathbf{k})$ , поэтому  $\mu(-\mathbf{k}, k_0) = \mu(\mathbf{k}, k_0)$ . При  $\mathbf{k} = 0$  решением дисперсионного уравнения является  $k_0 = 0$ , поэтому  $\mu(0,0) = 1$ . При малых размерах  $\delta$  и b имеем  $\mu(\mathbf{k}, k_0) \approx 1$ . Сильная ПД означает, что нельзя получить зависимость  $\mu(\omega)$ : результат существенно зависит от  $\mathbf{k}$ . Полученное материальное уравнение нелокально: оно относится ко всей области ячейки, а локальность наступает при  $\lambda \gg a$ , т.е. при  $\mathbf{k}^2 \approx k_0$ , когда и  $\mu(\mathbf{k}, k_0) \approx 1$ . Путем увеличения размеров рамки можно получить значения МП, отличные от единицы и даже отрицательные, но не факт, что реально достигается отрицательная МП в обычном понимании: в этом случае модель становится весьма приближенной, а результат зависит от  $\mathbf{k}$ .

Заменим металлическое кольцо тонким диэлектрическим. Пренебрежем поперечными полями по сравнению с тороидальным. По кольцу идет ток поляризации, который возбуждает такое же поле, как и ток проводимости. Для металлического кольца нет разницы: высокочастотный ток в той или иной степени тоже есть ток поляризации. Для диэлектрического кольца отсутствует ток на нулевой частоте. В приведенных выше формулах для проводимости достаточно положить  $\omega_P^2 = 0$ . Весьма заманчиво получить магнитные свойства ИС на структурах типа диэлектрические кольца, диэлектрические спирали и вообще на МА с соленоидальными токами поляризации. Однако токи должны быть строго соленоидальными. Для диэлектрического кольца радиуса R должно выполняться условие  $k_0\sqrt{\varepsilon}R\ll 1$ , что для больших ДП приводит к весьма малым радиусам и малым эффективным проницаемостям. ДП диэлектрического кольца, расположенного в диэлектрической основе, должна сильно отличаться от ее ДП. Диэлектрическое кольцо должно быть очень тонким, чтобы можно было пренебречь поперечными полями и резонансами. Это приводит к малым эффективным параметрам. В отличие от металла, на низких частотах ток поляризации мал, а на высоких частотах приближение работает плохо. Тем не менее, чисто формально можно использовать полученные результаты для диэлектрических колец. В вакууме такое кольцо является резонатором с  $H_{01\delta}$ -топом колебания (см. [29]). В фотонном кристалле такой резонатор является источником волны и в то же время возбуждается ей. Поляризация и ток кольца должны быть в противофазе компоненте  $H_z$ . При отрицательной компоненте МП фотонный кристалл становится гиперболическим метаматериалом. Рассматривая квадратную диэлектрическую рамку, можно использовать компоненты (10), (11) для получения дисперсионного уравнения. Электрическое поле определяется через вектор-потенциал как  $\mathbf{E}=\left(k_{0}^{2}+\nabla\nabla\cdot\right)\hat{\hat{G}}\left(\left(\varepsilon-1\right)\mathbf{E}\right),$ где  $\mathbf{A}=i\omega \varepsilon_0 \hat{\tilde{G}}\left(\left(\varepsilon-1\right)\mathbf{E}\right),\,\mathbf{a}\,\,\hat{\tilde{G}}$  — интегральный оператор с ядром (1). Использовать алгоритм с ядром  $\nabla \otimes \nabla \hat{G}$  проблематично в силу неинтегрируемой особенности. Считая поле соленоидальным внутри кольца и перенося оператор  $\nabla \cdot$  на  $(\varepsilon - 1) \mathbf{E}$ , получим поверхностные интегралы от поверхностной плотности заряда. Поскольку мы пренебрегли на границе кольца нормальными компонентами поля, пренебрегли и поверхностными зарядами, и хорошим приближением является интегральное уравнение  $\mathbf{E} = k_0^2 \hat{G}((\varepsilon - 1)\mathbf{E}) = k_0^2 (\varepsilon - 1) \hat{G}(\mathbf{E})$ . Дисперсионное уравнение на его основе запишем в виде

$$\int_{V} |\mathbf{E}|^{2} d^{3}r = k_{0}^{2} (\varepsilon - 1) \times 
\times \int \mathbf{E}^{*} (\mathbf{r}) \tilde{G} (\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{E} (\mathbf{r}') d^{3}r d^{3}r'.$$
(16)

В декартовой системе удобнее рассмотреть прямоугольную рамку. Считая теперь поле постоянным и имеющим одну постоянную компоненту  $E_x$  или  $E_y$ в каждом плече,  $E_x\left(x,-b/2,z\right)=-E_x\left(x,b/2,z\right)=$  $=E_y\left(b/2,y,z\right)=-E_y\left(-b/2,y,z\right)=E$ , получаем уравнение

$$1 = \frac{4k_0^2 \delta^2 b \left(\varepsilon - 1\right)}{a^3} \sum_{k,l,m = -\infty}^{\infty} \frac{\left| G_{klm} \left( \mathbf{k} \right) \right|^2}{\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 - k_0^2},$$

где

$$\begin{aligned} &|G_{klm}\left(\mathbf{k}\right)|^{2} = \operatorname{sinc}^{2}\left(\tilde{k}_{zm}\delta\right)\operatorname{sinc}^{2}\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right) \times \\ &\times \operatorname{sinc}^{2}\left(\tilde{k}_{yl}b/2\right)\left[\operatorname{sin}^{2}\left(\tilde{k}_{xk}b/2\right) + \operatorname{sin}^{2}\left(\tilde{k}_{yl}b/2\right)\right]. \end{aligned}$$

Задавая вектор  $\mathbf{k}$ , из этого уравнения можно определить волновое число:

$$k_0^2 = \frac{1}{4\delta^2 b (\varepsilon - 1)} \sum_{k,l,m = -\infty}^{\infty} \frac{|G_{klm}(\mathbf{k})|^2}{\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 - k_0^2}.$$
 (17)

Уравнение (17) можно решать итерационно. Оно также подходит для металлической рамки, если в качестве  $\varepsilon$  взять ДП металла. В случае наличия основы ДП  $\tilde{\varepsilon}$  необходимо сделать замены  $k_0^2 \to k_0^2 \tilde{\varepsilon}$ ,  $\varepsilon \to \varepsilon/\tilde{\varepsilon}$ . Считая  $\mathbf{k} = \mathbf{x}_0 k_x$ ,  $k_x \approx k_0 \ll \pi/a$ , учитывая только большой нулевой член суммы, получим  $k_0^2 \approx k_x^2/|1+4\delta^2 b(\varepsilon-1)/a^3|$ . Приближение справедливо, если  $4\delta^2 b (\varepsilon - 1)/a^3 \ll 1$ . В этом случае  $k_x \approx k_0$ . Конечно, уравнение (17) весьма приближенное. Задавая поле в виде циклического тока поляризации, мы наложили условия симметрии:  $E_x(x,y,z)$  — четная функция по x, z и нечетная по y, а  $E_y(x,y,z)$  — четная функция по y,z и нечетная по х. В силу симметрии такое решение может существовать, но могут быть решения с другими соотношениями четности-нечетности. Решая задачу в общем виде, например, методом конечных элементов, мы можем найти волны всех возможных симметрий и соответствующие им дисперсии. Уравнение (17) при полностью четном поле будет четным. При дифракции волн на метаматериале конечных размеров указанная симметрия полей, вообще говоря, не выполняется. Она означает наличие двух электрических стенок, перпендикулярных плоскости рамки, и может быть реализована при сдвиге фаз  $\pi$  на ячейку по обеим координатам, что может выполняться в запрещенной зоне, которой соответствует полоса заграждения фильтра из конечного образца. При дифракции на метаматериале в низкочастотном пределе реализуется сдвиг фаз, близкий к нулю. Использование постоянных по значениям компонент электрического поля внутри рамки — наиболее жесткое ограничение модели. Но именно оно позволило получить простой явный результат.

### 6. ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ $arepsilon_e'$ И $\mu_e'$ В МОДЕЛИ ЛОРЕНЦА

Классическая модель Лоренца для разреженного газа осцилляторов (электрических диполей или осцилляторов) с частотами  $\omega_{0el}$  дает выражение для ДП [13]:

$$\varepsilon_L(\omega) = 1 + \sum_{l=1}^{N} \frac{\omega_{el}^2}{\omega_{0el}^2 - (\omega^2 - i\omega\omega_{el})}.$$
 (18)

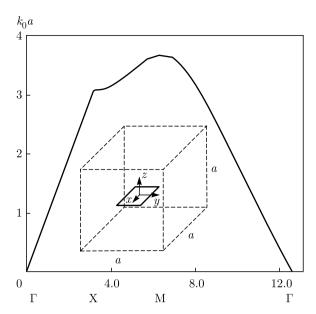
Здесь квадрат частоты  $\omega_{el}^2 = e^2 N_l/(\varepsilon_0 m_l)$  определяется концентрацией  $N_l$  и массой заряженных частиц сорта l, а частота  $\omega_{cl}$  релаксации импульса (частота столкновений) определяет уширение спектральной линии. Квантовое описание на основе полуклассического приближения дает такую же форму ДП [6,13,32]:

$$\varepsilon_L(\omega) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 m_e} \times \times \sum_{\nu} \sum_{k} N_k^{\nu} \sum_{l \neq k} \frac{f_{lk}^{\nu}}{(\omega_{0lk}^{\nu})^2 - (\omega^2 - i\omega\omega_{lk}^{\nu})}. \quad (19)$$

Здесь суммирование по индексам  $\nu$  идет по всем сортам атомов, по индексам k — по всем энергетическим уровням, по l — по всем разрешенным переходам с уровня k. Соответственно  $N_k^{\nu}$  — число атомов типа  $\nu$  в состоянии k,  $\omega_{0\nu} = \omega_{lk}^{\nu} = (E_k - E_l) \hbar$ , связанная со временем жизни. Если в возбужденных состояниях атомов больше, чем в основном, то  $\varepsilon'' < 0$  и среда является активной. Сила осциллятора  $f_{lk}^{\nu} = 2m_e \left| \omega_{0lk}^{\nu} \right| \left| d_{lk}^{\nu} \right|^2 / (3e_2\hbar g_l)$  дипольного перехода для атома с дипольным моментом  $\mathbf{d}^{\nu}$  определяется квадратом модуля матричного элемента  $d_{lk}^{\nu} = -e \left\langle \psi_l | \mathbf{r} \right| \psi_k \right\rangle$  [6, 32]. В общем случае при вычислении (19) следует суммировать по всем элект

рическим мультипольным переходам, удовлетворяющим правилам отбора. Нетрудно видеть, что может выполняться условие  $\varepsilon_L'(\omega) < 0$ . Однако (19) не дает правильное значение ДП, поскольку получено при воздействии поля плоской волны в вакууме на отдельный атом и путем суммирования вкладов атомов в поляризацию. Необходим учет среднего поля [6]. Часто в работах формулу типа (18) пишут для  $\mu_e$ , пытаясь получить  $\mu'_e < 0$ из решений задач дифракции, используя пакеты компьютерного моделирования. Но формула типа (18) не имеет отношения к  $\mu_e$ . В квантовом рассмотрении, как известно, можно представить возмущенный гамильтониан в виде  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ , где  $\hat{H}' = -(e/m)\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}^e + (e\mathbf{A}^e)^2/(2m) + \hat{H}_s - \text{CBS-}$ занное с полем  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  возмущение [32, 33]. Здесь  $\hat{H}_s = \mu_B g_s \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{s}}/\mu_0, \; \mathbf{A}^e = \mu_0 \mathbf{A}, \; \mathbf{A}$  — ранее введенный вектор-потенциал,  $g_s \approx 2$  и для простоты рассмотрен один электрон в атоме со спином  $\hat{\mathbf{s}}$ . Пренебрегая вторым членом и учитывая свойства коммутации, можно записать [33]  $\hat{H}' =$  $\hat{\mathbf{L}} = \mu_B \left(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}\right)/\mu_0$ , где  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $\hat{\mathbf{S}}$  и  $\hat{\mathbf{L}}$  полные операторы спинового и орбитального моментов атома (включая ядро). Магнитная восприимчивость зависит от полного магнитного момента атома, и если он ненулевой, слагается из поляризационного парамагнетизма, прецессионного диамагнетизма и ориентационного парамагнетизма [34]. В слабых полях для определения вклада атома в магнитную поляризацию следует вычислять матричные элементы  $\mathbf{m}_{lk}=-\mu_{B}\left\langle \psi_{l}\left|2\hat{\mathbf{S}}+\hat{\mathbf{L}}\right|\psi_{k}\right\rangle$ . Ротационные спектры полярных молекул в газе и жидкости также могут формировать магнитный момент. Однако это обычно микроволновый диапазон с сильным уширением линий, и какого-либо вклада в МП не возникает. В оптическом диапазоне природные вещества не демонстрируют существенное отличие МП от единицы [9, 34]. ИС из металлических наночастиц, представляющих собой квантовые точки или трехмерные квантовые ящики, целесообразно моделировать квантовыми методами. Определяя для них уровни энергии и волновые функции или используя теорию функционала плотности, можно вычислить плотность тока, возникающего под действием поля  ${\bf B}(\omega)$ . Это поле также действует и на классическую рамку с током, поэтому в слабых полях  ${\bf P}^m(\omega)$ пропорционально  $\mathbf{B}(\omega)$ , а не  $\mathbf{H}(\omega)$ .

Рассматривая классические контуры с токами, возбуждаемыми магнитной индукцией  $\mathbf{B}(\omega)=$  =  $\mu_0\mu_e\mathbf{H}(\omega)$ , следует учесть, что ток в контуре в отсутствие поля затухает и не имеет резонанс-



**Рис. 5.** Дисперсия в метаматериале из прямоугольных диэлектрических рамок

ных частот. При комнатной температуре длина свободного пробега электронов в металле порядка десятков нанометров. Кроме того, в отличие от спина в атоме магнитный момент контура не может менять направление ориентации в зависимости от изменения угла магнитного поля. Такой наведенный магнетизм на низких частотах является диамагнетизмом [26]. Можно получить формулу типа (18) без резонансов для  $\mu_e^{-1}$ , поскольку на движущиеся заряды действует поле  $\mathbf{B}(\omega)$ . Вклад в поляризацию от MA пропорционален  $\mathbf{B}(\omega)$ , а не  $\mathbf{H}(\omega)$ . Классический подход легко можно применить к интегральному уравнению из проволочных микроколечек (рис. 46). Удобно расположить их на ребрах кубического кристалла. Часто пытаются рассматривать резонансные структуры типа разомкнутых микроколечек с емкостным зазором. У такого *RCL*-контура есть резонансная частота  $(LC)^{-1/2}$  вынужденного резонанса, но она очень высокая, поскольку краевая емкость мала. Для снижения  $\omega_0$  следует повышать емкость. Кольцо с емкостью является магнитным и электрическим диполями, ориентированными нормально и касательно плоскости кольца. Электрический диполь нормален зазору, что делает кольцо несимметричным излучателем в его плоскости. Поэтому кристалл (рис. 4в) с разомкнутыми кольцами не изотропный. Не спасает и двойное разомкнутое кольцо. Необходимы четверные разомкнутые кольца с поворотом зазоров на 45%, размещенные на ребрах кубического фотонного кристалла. В силу правила Ленца такая ИС на низких частотах обладает диамагнетизмом. Важно синхронизировать углы поворота всех колец. Реально такой 3D-фотонный кристалл возможен в радиодиапазоне, где можно использовать и сосредоточенные емкости. Создание такой ИС в микроволновом диапазоне уже проблематично. Вблизи резонансной частоты  $\mu_e^{-1}(\omega) = 1 + \omega_m^2/\left\lfloor \omega_0^2 - \left(\omega^2 - i\omega\omega_c \right) \right\rfloor$ . Рассмотрим  $\mu_e'$ . Имеем

$$\mu'_e = 1 - \frac{\omega_m^2 \left(\omega_0^2 - \omega^2 + \omega_m^2\right)}{\left(\omega_0^2 - \omega^2 + \omega_m^2\right)^2 + \left(\omega\omega_c\right)^2}.$$

Условие  $\mu_e'<0$  имеет вид  $\left(\omega_m^2-\omega_c^2\right)^2>4\left(\omega_m\omega_c\right)^2$ . Обозначим  $\Delta=\left(\omega_m^2-\omega_c^2\right)^2>4\left(\omega_0\omega_c\right)^2$ . При слабой диссипации  $\omega_m^2-\omega_c^2>2\omega_0\omega_c$  или  $\omega_m>\sqrt{2\omega_0\omega_c}$ . В этом случае имеется область отрицательных  $\mu_e'<0$ , расположенная при

$$\omega_0^2 + \frac{\omega_m^2 - \omega_c^2}{2} - \Delta < \omega^2 < \omega_0^2 + \frac{\omega_m^2 - \omega_c^2}{2} + \Delta.$$

Обозначая  $\Omega=\omega^2-\omega_0^2$ , имеем уравнение  $\Omega^2-\Omega\left(\omega_m^2-\omega_c^2\right)+(\omega_0\omega_c)^2=0$  для определения граничных частот, на которых  $\mu_e'=0$ . С учетом диссипации таких частот может не быть. На резонансной частоте  $\mu_e'=1-1/\left\lfloor 1+\left(\omega_0\omega_c/\omega_m^2\right)^2\right\rfloor>0$ . В этом случае при  $\omega_0\omega_c=\omega_m^2$  получаем  $\mu_e'=1/2$ . С ростом диссипации  $\mu_e'$  при резонансе растет и стремится к 1, а при стремлении диссипации к нулю также стремится к нулю. При низких частотах имеем  $0<\mu_e'<1$ , т. е. диамагнетизм, и  $\mu_e'\to1$  при  $\omega\to0$ . На очень больших частотах ( $\omega^2\gg\omega_0^2+\omega_m^2$ ) имеем  $\mu_e'=1+\left(\omega_m^2+2\omega_c^2\right)/\omega^2\to1$ , т. е. реализуется парамагнетизм. Отметим, что мы ввели резонансную частоту искусственно на основе теории цепей и воспользовались формулой, которую еще надо получить, используя электродинамику. То есть надо строго решать задачу для разомкнутых колец.

Таким образом, отрицательная МП может быть реализована в резонансных ИС, но только в резонансной области, где существенна ПД, и описание двумя скалярными величинами  $\varepsilon_e$  и  $\mu_e$  не является полностью корректным. В низкочастотной области, где можно ввести эти параметры, ИС ведет себя как диамагнетик:  $0 < \mu_e < 1$ . Поскольку размер частицы существенно меньше a, указанные резонансы лежат обычно выше первого брэгговского резонанса, где уже изотропное приближение неприменимо. Наведенный магнетизм, однако, вполне имеет место в широком диапазоне частот.

#### 7. УРАВНЕНИЕ ФРЕНЕЛЯ И ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Периодические фотонные кристаллы описываются уравнением Френеля. Это дисперсионное уравнение, построенное по результатам гомогенизации. В классическом случае имеют место два подхода к описанию эффективных параметров ИС: симметричный в рамках полей  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  и индукций  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{B}$ , а также несимметричный с использованием трех векторов  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{B}$  [8,9]. В этом разделе будем придерживаться первого подхода. В нем в общем случае бианизотропной ИС вводятся четыре тензорных параметра: тензоры ДП  $\hat{\varepsilon}(\omega,\mathbf{k})$  и МП  $\hat{\mu}(\omega,\mathbf{k})$  и тензоры кросс-поляризаций  $\hat{\xi}(\omega,\mathbf{k})$ ,  $\hat{\zeta}(\omega,\mathbf{k})$ . При распространении плоских волн  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp{(i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$  (или при комбинации поля из таких волн) и при симметричном рассмотрении имеют место связи

$$\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_0 \hat{\varepsilon}(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) + c^{-1} \hat{\xi}(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{H}(\omega, \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) = \mu_0 \hat{\mu}(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{H}(\omega, \mathbf{k}) + c^{-1} \hat{\zeta}(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}),$$

а также уравнения Френеля вида [1,9]

$$\det \left[ \left( k_0^{-1} \hat{k} + \hat{\xi} \right) \hat{\mu}^{-1} \left( k_0^{-1} \hat{k} - \zeta \right) + \hat{\varepsilon} \right] = 0,$$

$$\det \left[ \left( k_0^{-1} \hat{k} - \zeta \right) \hat{\varepsilon}^{-1} \left( k_0^{-1} \hat{k} + \hat{\xi} \right) + \hat{\mu} \right].$$
(20)

Здесь  $\nabla \times \mathbf{E} = -i\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \hat{k}\mathbf{E}$ , а матрица  $\hat{k}$  определяет оператор ротор:

$$\hat{k} = -i \begin{bmatrix} 0 & -k_z & k_y \\ k_z & 0 & -k_x \\ -k_y & k_x & 0 \end{bmatrix}.$$

Если рассматривать изотропные метаматериалы в смысле работы [4], т.е. считать все эффективные материальные параметры скалярами, то ИС становится в общем случае биизотропной со скалярными параметрами  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\xi$ ,  $\zeta$  и уравнением Френеля  $\det \left[ \hat{k}^2 + \hat{k} \left( \xi - \zeta \right) + \hat{I} k_0^2 \varepsilon \mu \right] = 0$ . Если же кроссполяризацией можно пренебречь, а анизотропией нельзя, то уравнение Френеля приобретает вид

$$\det \left[ \hat{\varepsilon}^{-1} \hat{k} \hat{\mu}^{-1} \hat{k} - \hat{I} k_0^2 \right] = 0,$$

$$\det \left[ \hat{\mu}^{-1} \hat{k} \hat{\varepsilon}^{-1} - \hat{I} k_0^2 \right] = 0.$$
(21)

В полностью изотропном случае  $(\hat{\varepsilon} = \varepsilon_{ef}\hat{I}, \hat{\mu} = \mu_{ef}\hat{I})$  уравнение Френеля  $\det \left[\hat{k}^2 - \hat{I}k_0^2\varepsilon\mu\right] = 0$  эквивалентно простейшему дисперсионному уравнению для обыкновенной волны  $\mathbf{k}^2 = k_0^2\varepsilon\mu$ .

Для ИС из шариков двух типов рис. 4г оценим резонансные частоты, что, конечно, не означает достижимость однородного метаматериала, описываемого ДП и МП. Для обоснования этого следует задать в шариках меньшего размера только поле  $E_{\varphi} = \mathrm{const}$  и расположить эти шарики на ребрах. Уже отмечалось, что такого возбуждения при дифракции волны на конечном образце может не быть. Поскольку ориентация осей различная, шарики дают вклад в магнитный момент по трем направлениям. Такие шарики подобны рассмотренным кольцам и создают магнитный момент. Конечно, это приближение: поле в шариках следует разлагать по всем сферическим гармоникам [18, 25]. Пусть шарики большего размера расположены в углах. Эти шарики создают электрический момент. ДП шариков считаем одинаковой. Для разложения поля можно взять несколько сферических гармоник относительно трех осей. В такую ИС мы искусственно привнесли симметрию. Далее следует рассчитать возбуждаемое шариками поле с учетом периодической  $\Phi\Gamma$  (1) и решить интегральное уравнение. Такое решение учитывает взаимовлияние всех шариков. Затем следует вычислить электрический и магнитный моменты и усредненные поля. В природных средах размер атомов  $r \approx 0.05$  нм, и при длине световой волны  $\lambda \approx 500$  нм и ДП основы  $\tilde{\varepsilon} \approx 10$  и менее приходим к отношению размера к длине волны в среде  $r/\Lambda \approx 3 \cdot 10^{-4}$ . Для кристаллов это отношение имеет такой же порядок. На атомы действует локальное поле, а прецессия спинов дает магнитный момент, в линейном приближении пропорциональный компоненте локального магнитного поля. Для возбуждения рамки с током или шарика важен их размер, сравнимый с длиной волны. Магнитный момент не пропорционален локальному полю, а намагниченность зависит от k. Для фотонного кристалла с  $a \approx 50$  нм уже  $a/\Lambda \approx 0.1$ , при этом для разреженности необходимо, по крайней мере, использовать частицы с r < 5 нм. В области 100 ГГц при длине волны 3 мм,  $\tilde{\varepsilon} = 10$  и  $\varepsilon = 400$  оценим минимальную Л. Поскольку изотропность предполагает работу вдали от брэгговских резонансов, хорошим и точным подходом для этого являются методы для хаотических метаматериалов типа смесей: формулы смешения для моделей эффективной среды, метод компактных групп, методы теории перколяции (протекания) и т. п. [7, 35]. Из формулы Гарнетта  $(\tilde{\varepsilon}_e - \tilde{\varepsilon}) / (\tilde{\varepsilon}_e + 2\tilde{\varepsilon}) = C(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}) / (\varepsilon + 2\tilde{\varepsilon})$  имеем оценку для концентрации С диэлектрических шариков при условии  $\tilde{\varepsilon}_e = \tilde{\varepsilon} + 1 = 11$ : C = 1/30. Близкий результат дает и формула эффективного по-

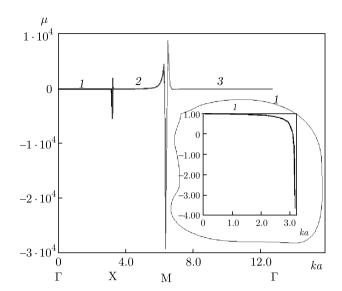


Рис. 6. Эффективная МП метаматериала из прямоугольных диэлектрических рамок по формуле (15), соответствующая дисперсии рис. 5

ля Бруггемана. Поскольку  $C = (4\pi/3) (r_1^3 + r_2^3)/a^3$ , при  $r_2 = 2r_1$  имеем  $r_1 \sim a \cdot 10^{-4}$ . При  $\tilde{\varepsilon}_e = 11$  должно быть  $\Lambda < 1$  мм, т. е. по крайней мере a < 0.1 мм, что дает оценку  $r_1 \sim 10^{-5}$  мм. Минимальное расстояние между рассеивателями  $a\sqrt{3}/2$ , поэтому взять  $r_1$ больше 0.01 мм без существенного нарушения разреженности нельзя. Однако такое увеличение нарушает условие  $\tilde{\varepsilon}_e \approx \tilde{\varepsilon}$  и уменьшает  $\Lambda$ . Нетрудно видеть на основе точных формул [36], что резонансные частоты таких изолированных наношариков не лежат в заявленном авторами идеи диапазоне. В свободном пространстве основной (низкочастотной) является магнитная мода  $H_{01\delta}$ , при этом индексы (кроме азимутального) нельзя считать целыми (в силу радиационных потерь их даже нужно считать комплексными). В фотонном кристалле нет радиационных потерь, но есть диполь-дипольное взаимодействие рассеивателей, которое необходимо строго учитывать.

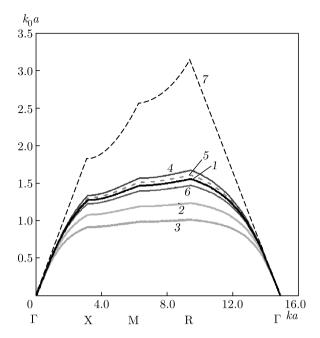
Низкочастотная дисперсионная ветвь, соответствующая уравнению (17), приведена на рис. 5. На рис. 6 (кривая 1) даны результаты вычисления МП по формуле (15). В суммах формул (15) и (17) имеют место полюсы, которые определяются условием  $\tilde{k}_{xk}^2 + \tilde{k}_{yl}^2 + \tilde{k}_{zm}^2 = k_0^2$ . Они приводят к нулям в правых частях (15) и (17). Кроме того, имеют место нули у функций  $F_{mlk}(\mathbf{k})$  и  $|G_{mlk}(\mathbf{k})|^2$ . Они реализуются при достаточно больших  $|\mathbf{k}|$  и приводят к полюсам. Такие резонансы в МП нефизические и происходят при достижении запрещенной зоны, т. е. там, где модель неприменима. Избежать полюсов можно, учтя

потери или построив более строгую модель. В низкочастотной области  $|\mathbf{k}| \approx k_0$  нуль компенсирует полюс и МП практически равна единице, а модель демонстрирует бесконечно малый диамагнетизм. Отрицательные значения не достигаются. Расчеты в этой области выполнены при введении бесконечно малого тангенса диэлектрических потерь  $10^{-10}$ . При больших  $|\mathbf{k}|$  для вычисления МП использовались связи  $k_x = k_x(k_0)$  и  $k = k_x + k_y = k(k_0)$ , определяемые из уравнения (17), и брался тангенс потерь  $10^{-2}$ . Заметим, что можно построить дисперсию МП по результатам гомогенизации на основе уравнения Френеля  $\mu = (k_x/k_0)^2$ . Такая модель при  $|\mathbf{k}| \approx k_0$  дает слабый парамагнетизм. В точке X имеем  $\mu = 1.061$ . При переходе на обратную ветвь  $k_x \to \pi/a - k_x$  замедление и МП сильно растут. В запрещенной зоне компонента  $k_x$  является мнимой, а МП — отрицательной. При переходе через запрещенную зону на высокочастотную (оптическую) дисперсионную ветвь при изменении только  $k_x$  эта МП становится сначала отрицательной, затем положительной, но имеет значение меньше единицы. Как для рис. 6 в резонансных областях, так и здесь отличные от единицы резонансные значения МП не имеют физического смысла, хотя эти значения и описывают дисперсию моделью Френеля. При дифракции на образце фотонного кристалла для использования такой модели важно, в какой точке дисперсионной поверхности при данной частоте находится вектор  $\mathbf{k}$  с учетом всех волн, включая и отраженные, что само по себе сложно.

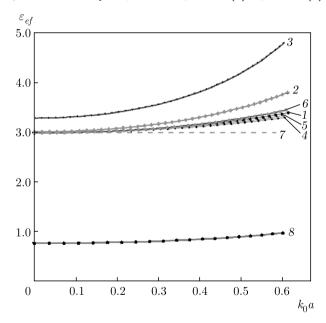
На низких частотах можно построить другие зависимости замедления на основе эффективной диэлектрической среды в виде смеси. Для нее имеем коэффициент заполнения  $C=16b\delta^2/a^3$  и коэффициенты деполяризации (см. [7,37])  $L_x=L_y=1/2-\delta/b$ ,  $L_z=2\delta/b$ . Используя формулу Гарнетта, для тонкой диэлектрической рамки получим [1]

$$\begin{split} \varepsilon_{exx} &= \varepsilon_{eyy} = 1 + \frac{C\left(\varepsilon - 1\right)}{1 + L_x\left(\varepsilon - 1 - C\right)} \approx \\ &\approx 1 + \frac{16b\delta^2\left(\varepsilon - 1\right)/a^3}{1 + \left(\varepsilon - 1 - 16b\delta^2/a^3\right)/2}, \\ \varepsilon_{ezz} &= 1 + \frac{16b\delta^2\left(\varepsilon - 1\right)/a^3}{1 + 2\delta\left(\varepsilon - 1 - 16b\delta^2/a^3\right)/b} \approx \\ &\approx 1 + 16b\delta^2\left(\varepsilon - 1\right)/a^3. \end{split}$$

Таким образом, на низких частотах ИС описывается диэлектрическими свойствами, а волна с  $k_z=0$  идет почти со скоростью света. Теперь уравнение Френеля при  $k_y=k_z=0$  имеет вид  $k_x=k_0\sqrt{\varepsilon_{ezz}}$ .



**Рис. 7.** Дисперсия (низшие частотные ветви) в кубическом фотонном кристалле с кубическими МА  $a_0 \times a_0 \times a_0$  в диэлектрической основе  $\tilde{\varepsilon}=3.0$ . ДП включений  $\varepsilon=6.0$  для кривых  $1\!-\!4$ ,  $\varepsilon=0.5$  (5),  $\varepsilon=-1.0$  (6),  $\varepsilon=3.1$  (7). Кривым  $a_0=0.2$ 0 (2),  $a_0=0.5$ 1 (3)



**Рис. 8.** Гомогенизированные значения эффективной ДП  $\varepsilon_{ef}$  для конфигураций (1–7), соответствующих рис. 7. Кривая 8 соответствует  $\varepsilon=-1.0,\ a_0=0.3a,\ \tilde{\varepsilon}=1.0$ 

Результаты вычисления низкочастотных дисперсионных ветвей для (17) с эффективной ДП для кубического кристалла с кубическими диэлектрическими МА даны на рис. 7 и 8. Использовалась приближенная модель в виде аппроксимации ком-

понент  $E_x$ ,  $E_y$ ,  $E_z$  кусочно-постоянными элементами с симметричным распределением поля, поэтому уравнение решалось в первом октанте куба. Использовалось по две и три аппроксимации на компоненту, поэтому размерность задачи равнялась либо 8, либо 27. Гомогенизация выполнялось по формуле, аналогичной (15). Заметим, что простой алгоритм можно получить, взяв аппроксимации полей типа  $E_x(x,y,z) = E_{0x}\cos{(\alpha_x x)}\cos{(\beta_x y)}\cos{(\gamma_x z)}$ . Тогда дисперсионное уравнение получается в виде функционала, зависящего кроме  $k_0$  и  $\mathbf k$  еще от 12 параметров. Их можно сократить до 8, наложив условие соленоидальности и условия удовлетворения каждой из компонент волновому уравнению. Однако такая задача является нелинейной.

#### 8. ВЫВОДЫ

Рассмотрены структуры периодических метаматериалов, которым могут соответствовать изотропные эффективные материальные параметры, в том числе и с двумя проницаемостями  $\varepsilon_e$  и  $\mu_e$ . Поскольку все МА (исключая ферромагнитные частицы во внешнем магнитном поле) можно описать ДП, симметричный кубический кристалл также моделируется только диагональным тензором с одинаковыми компонентами  $\varepsilon_e(k_0, \mathbf{k})$  [1,6]. Поэтому введение  $\mu_e$  искусственный прием. Исключение могут составить магнитные МА из ферритов и магнитных металлов, магнетизм которых обусловлен прецессией некомпенсированных магнитных моментов атомов или доменов во внешнем магнитном поле. Такие ИС могут демонстрировать резонансные свойства и изменение знака компонент МП, но они анизотропны и обычно проявляют такие свойства в микроволновом диапазоне и ниже. Там имеет место гиротропия.

Так называемый наведенный магнетизм демонстрирует зависимость намагниченности от k даже в низкочастотном пределе. При этом  $\mu_e(0,0) = 1$ . Показано, что для кольцевых ИС в низкочастотном пределе  $|\mathbf{k}| \approx k_0(0,0) \ll \pi/a$  имеет место слабый диамагнетизм (см. [26]). Рассмотрим это качественно на примере одиночной проволочной рамки с площадью S. Имеем  $\mathbf{A} = \hat{G}(\mathbf{J}), \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A} =$  $=-j\mathbf{k}\times\hat{G}(\mathbf{J}),\ d\mathbf{M}=\mathbf{r}\times\mathbf{J}dl.$  Для плоской круглой рамки с током  $I = |\mathbf{J}| \delta^2$  получаем  $\mathbf{M} = \mathbf{n}_0 SI$ . Диамагнетизм обеспечивает правило Ленца. Усредненное магнитное поле не является локальным, поэтому нельзя ввести локальные материальные параметры. Большие значения МП связаны с тем, что  $\langle H_z(k_0,\mathbf{k})\rangle \approx 0$  для некоторых точек дисперсионной поверхности. Нелокальное магнитное поле означает, что большая МП не имеет обычного физического смысла. В низкочастотном пределе при малом фазовом сдвиге на ячейку МП принимает локальный смысл.

Для поддерживающего волну тока поляризации  ${\bf J}_p$  (даже замкнутого) намагниченность можно не вводить, а ввести только электрическую поляризацию  $\langle \mathbf{P}^e \rangle = \varepsilon_0 \left( \varepsilon - 1 \right) \langle \mathbf{E} \rangle_V$ . Усреднение здесь выполнено по МА. Такой дипольный момент отличается от (5) и является более приближенным. В низкочастотном пределе поле постоянно и  $\langle \mathbf{E} \rangle_V = V \langle \mathbf{E} \rangle / a^3$ . Формально можно вводить разные модели ИС, используя тензорные или скалярные материальные параметры, а затем определять их из условий гомогенизации. В качестве таковых могут фигурировать свойства волн в метаматериале, параметры рассеяния, поляризуемости. Неоднозначность обратной задачи гомогенизации требует решения переопределенной системы уравнений. В частных случаях число уравнений и неизвестных может совпадать. Определение МП такими способами не гарантирует, что имеет место локальная связь магнитной индукции и магнитного поля. Формально введение магнитных свойств основано на том, что в низкочастотном пределе рассеяние плоской волны на малой частице можно описать как возникновение в ней электрического и магнитного диполей [7, 17, 37]. Однако для выполнения граничных условий магнитный диполь можно не вводить, а ввести еще один ортогональный электрический диполь. Мы не рассмотрели ряд важных вопросов: влияние квадрупольных и высших мультипольных моментов на поляризацию, плотно упакованные (не разреженные) фотонные кристаллы, сильно нелокальные ИС и ряд других.

Итак, однородные периодические ИС, описываемые ДП, возможны в низкочастотном пределе при пренебрежении ПД. При описании их ДП и МП последняя близка к единице, особенно в оптическом диапазоне. Однородные метаматериалы с отрицательной ДП также возможны. Это металлы при сверхнизких температурах на частотах вплоть до плазменных. Смеси металлических и диэлектрических МА в низкочастотном пределе также могут демонстрировать отрицательную ДП. Наведенный магнетизм возможен, но соответствующие ему метаматериалы не являются изотропными и могут быть описаны другими материальными параметрами. В оптике МП метаматериалов практически равна единице, что согласуется с аналогичным выводом для природных веществ [7, 30]. Для периодических ИС на поставленный в заглавии вопрос следует ответить отрицательно.

Финансирование. Работа осуществлена при поддержке Министерства образования и науки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0004).

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. М. В. Давидович, УНФ 189, 1250 (2019).
- **2**. А. П. Виноградов, А. В. Дорофеенко, С. Зухди, УНФ **178**, 511 (2008).
- **3**. М. Я. Сушко, С. К. Криськив, ЖТФ **79**(3), 97 (2009).
- **4**. К. Р. Симовский, Опт. и спектр. **107**, 766 (2009).
- **5**. М. А. Ремнев, В. В. Климов, УНФ **188**, 169 (2018).
- В. М. Агранович, Ю. Н Гартштейн, УНФ 176, 1051 (2006).
- 7. А. П. Виноградов, Электродинамика композитных материалов, Эдиториал УРСС, Москва (2001).
- 8. А. П. Виноградов, УФН 172, 363 (2002).
- 9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред, Наука, Москва (1982).
- 10. R. Merlin, Proc. Nat. Acad. Sci. 106, 1693 (2009).
- A. H. Aly, M. Ismaeel, and E. Abdel-Rahman, Opt. Photon. J. 2, 105 (2012).
- **12**. М. В. Давидович, И. А. Корнев, Компьютерная оптика **43**, 765 (2019).
- **13**. А. И. Ахиезер, И. А. Ахиезер, Электромагнетизм и электромагнитные волны, Высшая школа, Москва (1985).
- R. D. Graglia, P. L. E. Uslenghi, and R. E. Zich, IEEE Trans. AP-39(1), 83 (1991).
- 15. E. O. Kamenetskii, Phys. Rev. E 57, 3563 (1998).
- E. O. Kamenetskii, Microw. Opt. Technol. Lett. 19, 412 (1998).
- 17. L. Lewin, Proc. Inst. Elec. Eng. 94(27), 65 (1947).
- Л. Левин, Современная теория волноводов, Изд-во иностр. лит., Москва (1954).

- 19. С. М. Рытов, ЖЭТФ 29, 605 (1955).
- **20.** T. Gric, Waves in Random and Complex Media **33**(4) (2019), https://doi.org/10.1080/17455030.2019. 1656846.
- **21**. М. В. Давидович, Известия Сарат. унив. Серия Физика **11**(1), 42 (2011).
- 22. М. В. Давидович, КЭ 47, 567 (2017).
- **23**. А. В. Вашковский, Э. Г. Локк, УФН **176**, 557 (2006).
- **24**. В. П. Макаров, А. А. Рухадзе, УФН **189**, 519 (2019).
- **25**. Г. Т. Марков, А. Ф. Чаплин, *Возбуждение электромагнитных волн*, Радио и связь, Москва (1983).
- **26**. М. В. Давидович, Письма в ЖЭТФ **108**, 299 (2018).
- **27**. И. Б. Вендик, О. Г. Вендик, М. С. Гашинова, Письма в ЖТФ **32**(10), 30 (2006).
- O. Vendik, I. Vendik, I. Kolmakov, and M. Odit, Opto-Electron. Rev. 14(3), 179 (2006).
- L. Jylha, I. Kolmakov, S. Maslovski, and S. Tretyakov, J. Appl. Phys. 99, 043102 (2006).
- A. Ahmadi and H. Mosallaei, Phys. Rev. A 77, 045104 (2008).
- **31**. A. Krasnok, S. Makarov, M. Petrov, R. Savelev, P. Belov, and Yu. Kivshar, Proc. SPIE **9502**, 950203 (2015).
- **32**. М. О. Скалли, М. С. Зубайри, *Квантовая опти- ка*, под ред. В. В. Самарцева, Физматлит, Москва (2003).
- **33**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (*нерелятивистская теория*), Физматлит, Москва (1963).
- **34**. Я. Г. Дорфман, *Магнитные свойства и строение* вещества, Гостехиздат, Москва (1955).
- **35**. А. А. Снарский, УФН **177**, 1341 (2007).
- **36**. P. Guillon and Y. Garault, IEEE Trans. MTT-**25**(11), 916 (1977).
- **37**. R. E. Collin, *Field Theory of Guided Waves*, IEEE Press, New York (1991).

# ИССЛЕДОВАНИЯ ФРАГМЕНТАЦИИ СФЕРИЧЕСКИХ АЛЮМИНИЕВЫХ УДАРНИКОВ НА ТЯЖЕЛОЙ СЕТКЕ ПРИ СКОРОСТЯХ ДО 7 км/с

 $H.\ H.\ Mягков^{\ a^*},\ \Pi.\ H.\ Kалмыков^{\ b},\ H.\ B.\ Лапичев^{\ b},\ A.\ И.\ Леонтьев^{\ b},$   $B.\ H.\ Hомаконова^{\ b},\ A.\ B.\ Пономарев^{\ a},\ A.\ B.\ Сальников^{\ b},$   $O.\ A.\ Cоколов^{\ b},\ T.\ A.\ Шумихин^{\ a^{**}}$ 

<sup>а</sup> Институт прикладной механики Российской академии наук 125040, Москва, Россия

<sup>b</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики Российский федеральный ядерный центр 607188, Саров, Нижеегородская обл., Россия

> Поступила в редакцию 26 марта 2020 г., после переработки 21 июля 2020 г. Принята к публикации 28 августа 2020 г.

Приведены результаты экспериментальных исследований и численного моделирования фрагментации ударников из алюминиевого сплава на вольфрамовом сеточном экране при скоростях соударения до 7 км/с. Разгон ударников производился с использованием двухступенчатой легкогазовой пушки. Для регистрации состояния ударника перед соударением с сеточным экраном и процесса его фрагментации использована рентгеновская съемка. Параметры облака фрагментов ударника регистрировались также с помощью толстой пластины-свидетеля из сплава АМгб, размещаемой за сеточным экраном. Численное моделирование было выполнено методом гладких частиц. Отмечены особенности морфологии облака фрагментов и дана оценка скоростей фрагментов в различных частях облака. Дана оценка возникающего кумулятивного эффекта. Результаты экспериментов сравниваются с численным моделированием.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020024

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Явление фрагментации твердого тела, вызванное его взаимодействием с относительно тонкой преградой при высоких скоростях соударения, является предметом исследования уже достаточно длительное время. Эти исследования ведутся главным образом в рамках работ, направленных на совершенствование экранной защиты космических аппаратов (КА) от ударного воздействия частиц космического мусора и метеороидов [1,2]. Важное место в этих исследованиях занимает сеточный экран как элемент конструкции составного экрана, позволяющий снизить общий вес защиты КА [3,4] при неизменной ее эффективности.

Эффективность применения сетки в составных экранах вызвала интерес к изучению фрагментации ударника на одиночных сеточных экранах. Такие исследования проводились начиная с 90-х годов (например, [5–11]). Наиболее детальные исследования были выполнены в работах [5, 6], в которых было проведено сравнительное изучение особенностей высокоскоростного разрушения ударника на сеточном и сплошном экранах, а также исследованы дисперсионные и фрагментационные свойства сеток при их взаимодействии с ударником. В работе [6] было описано наиболее яркое различие в характере распределения фрагментов ударника при пробивании сеточного экрана, а именно, присутствие групп кратеров, линейнообразно распределенных по поверхности пластины-свидетеля, которое использовалось в экспериментах для регистрации облака фрагментов. Эти группы кратеров являются следствием главной особенности разрушения ударника на сеточном

 $<sup>^{\</sup>ast}$ E-mail: nn\_myagkov@mail.ru

<sup>\*\*</sup> E-mail: tshumikhin@gmail.com

<b>№</b> эксп.	Диаметр, мм/ материал ударника	$l_a  imes d_w$ , мм $ imes$ мм/материал экрана/его удельная плотность $ ho_b$ , кг/м $^2$	Скорость ударника, км/с	Скорость лидирующего фрагмента, км/с	Коэфф. усиления $k_{amp}$
1.1	$6.35/{ m c}$ плав АД-1	$2.0 \times 0.6/\mathrm{ст}$ аль $3/1.71$	5.84	> 7.38	> 1.26
1.2	$6.35/{ m c}$ плав АД-1	$2.0 \times 1.0/$ сталь $3/3.83$	6.80	9.2	1.35
1.3	6.35/сплав АД-1	$2.0 \times 0.6$ /сталь $3/1.71$	7.04	9.7	1.38

**Таблица 1.** Эксперименты [7,8] по взаимодействию ударника с сеточным экраном ( $d_w$  — диаметр проволоки,  $l_a$  — апертура — видимое на просвет расстояние между проволоками)

экране — формирования струй фрагментов, движущихся как в направлении движения ударника, так и поперечных направлениях. При этом скорость головной части струи может существенно превышать скорость ударника до начала его взаимодействия с сеткой. На основе численных расчетов была получена следующая оценка: при прицеливании ударника в центр ячейки сетки скорость головной части струи, движущейся в направлении движения ударника, может превышать скорость ударника до 1.5 раз [6]. В наших работах [7,8] было дано прямое экспериментальное доказательство существования этого кумулятивного эффекта. Результативные эксперименты из работ [7,8] представлены в табл. 1. Определение скорости фрагментов проводилось с помощью рентгеновской съемки. Видно, что в экспериментах было получено увеличение скорости до 1.38 раз. Наибольшая скорость, полученная в экспериментах, составила 9.7 км/с.

Все эксперименты, показанные в табл. 1, были выполнены со стальными сетками. В настоящей работе приведены результаты экспериментальных исследований и численного моделирования фрагментации ударников из алюминиевого сплава В95 диаметром 9 мм на вольфрамовых сетках с апертурой  $l_a=3.2$  мм и диаметром проволоки  $d_w=0.5$  мм при скоростях соударения до 7 км/с. Отмечены особенности морфологии облака фрагментов посредством изучения повреждений поверхности пластины-свидетеля. Результаты экспериментов сравниваются с численным моделированием, которое было выполнено методом гладких частиц (smoothed particle hydrodynamics, SPH) с помощью пакета LS-DYNA [12].

Метод SPH является бессеточным численным методом, чрезвычайно удобным для моделирования высокоскоростных ударных явлений. Отсутствие сетки позволяет с помощью метода SPH есте-

ственно моделировать процессы, очень трудно поддающиеся описанию другими методами: 1) большие деформации и смешивание материалов; 2) интенсивную фрагментацию и движение облака осколков. Довольно полный обзор, включая историю метода SPH, можно найти работе [13]. Нельзя не упомянуть одну из недавних работ по развитию этого метода, где был разработан высокоадаптивный алгоритм балансировки нагрузки для параллельного моделирования с использованием метода SPH [14], позволяющий проводить расчеты с десятками миллионов SPH-частиц.

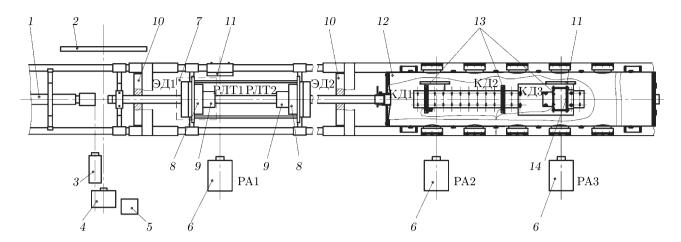
В заключение отметим, что существуют другие, отличные от SPH методы, позволяющие эффективно выполнять численное моделирование процессов при высоких плотностях энергии [15].

## 2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Схема проведения эксперимента приведена на рис. 1, фотографии испытательного оборудования— на рис. 2 и 3.

Разгон ударника в стволе легкогазовой пушки осуществляется в неразрезном поддоне, отделение ударника от поддона происходит путем разрушения поддона на выходе из ствола. Отсекание осколков поддона проводится на входе в вакуумную камеру с использованием устройства взрывной отсечки [16].

После отделения от поддона ударник входит через вакуумный тракт в вакуумную камеру. Скорость ударника измеряется при движении его по вакуумному тракту с использованием электромагнитных датчиков (ЭД1, ЭД2) и радиолокационных станций (РЛС1, РЛС2), в вакуумной камере перед встречей с макетом сеточного экрана — с помощью электроконтактных датчиков (КД1, КД2), выполненных из металлизированной лавсановой пленки толщиной



**Рис. 1.** Схема проведения эксперимента: 1 — легкогазовая пушка; 2 — экран; 3 — фотоприемное устройство; 4 — фотокамера «ЭПОС»; 5 — импульсный источник света; 6 — рентгеновский аппарат «НОРА» (РА1—РА3); 7 — бесконтактное формирующее сечение; 8 — электромагнитный датчик (ЭД1, ЭД2); 9 — радиолокационная станция (РЛС1, РЛС2); 10 — отсекатель; 11 — кассета с рентгеновской пленкой; 12 — вакуумная камера; 13 — электроконтактный датчик (КД1–КД3); 14 — макет сеточной экранной защиты

6 мкм, не оказывающей разрушающего воздействия на ударник.

Была предусмотрена рентгеновская регистрация состояния ударника и разрушенного поддона в вакуумном тракте (рентгеновский аппарат PA1), а также состояния ударника до (рентгеновский аппарат PA2) и после (рентгеновский аппарат PA3) взаимодействия с сеточным экраном. Запуск рентгеновского аппарата PA1 осуществляется от бесконтактного формирующего сечения БФС1, а запуск рентгеновских аппаратов PA2 и PA3 — от электроконтактных датчиков соответственно КД1 и КД3.

Можно считать, что в ходе экспериментов с высокой степенью надежности регистрировались скорость ударника и его состояние перед взаимодействием с мишенью, вакуумирование исключило влияние воздушной среды на результаты эксперимента, а система отсечения поддона обеспечила чистоту проведения эксперимента в части реализации воздействия на мишень только ударника.

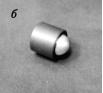
Эксперименты были выполнены с ударниками сферической формы из сплава алюминия В95 диаметрами  $D_{prj}=9.0\,$  мм и сеточными экранами (рис. 3a) с диаметром проволоки  $d_w=0.5\,$  мм и апертурой  $l_a=3.2\,$  мм, изготовленными из вольфрамовой проволоки. Для разгона в стволе метательной установки ударник помещался в поддон из полимерного материала фенилон (рис. 36).

Для регистрации облака фрагментов за сеточным экраном на расстоянии 165 мм размещалась однослойная (толщиной 16.5 мм) или двухслойная



Рис. 2. Панорама проведения эксперимента с легкогазовой пушкой (ЛГП)





**Рис. 3.** a) Макет сеточного экрана с пластиной-свидетелем перед установкой в вакуумной (испытательной) камере. b0 Ударник в поддоне

(толщиной 33 мм) пластина-свидетель из алюминиевого сплава АМг6 размером  $300 \text{ мм} \times 300 \text{ мм}$  (рис. 3a). Испытуемый экран и пластина-свидетель размещались в вакуумной (испытательной) камере.

<b>№</b> эксп.	Диаметр, мм/ материал ударника	$l_a  imes d_w,  { m MM}  imes { m MM}/$ материал экрана/ его удельная плотность, кг/ ${ m M}^2$	Материал свидетеля/дистанция от свидетеля до преграды, мм	Скорость ударника, км/с
2.1	9.0/ сплав В-95	$3.2 \times 0.5/$ вольфрам $/2.04$	$\mathrm{AMr6}/165$	4.53
2.2	9.0/ сплав В-95	$3.2 \times 0.5/$ вольфрам $/2.04$	$\mathrm{AMr6}/165$	7.15
2.3	9.0/ сплав В-95	$3.2 \times 0.5/$ вольфрам $/2.04$	$\mathrm{AMr}6/165$	6.79

Таблица 2. Эксперименты по взаимодействию ударника с сеточным экраном

Сеточный экран (рис. 3a) был выполнен в виде пересекающихся под углом  $90^{\circ}$  и расположенных с периодом 3.7 мм вольфрамовых проволок (99.95% W, остальные 0.05% — примеси Мо, K, Ca, Al, Fe) диаметром 0.5 мм, закрепленных на стальной рамке путем местного расплавления материала на рамке под проволокой.

Данные для выполненных экспериментов  $(N^{\bullet}N^{\bullet} 1-3)$  представлены в табл. 2.

### 3. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ И МОДЕЛИ МАТЕРИАЛОВ

Численное моделирование в трехмерной геометрии было выполнено на основе полной системы уравнений механики деформируемого твердого тела методом SPH с помощью лицензионного пакета LS-DYNA [12] версии 971. Он дает возможность решения трехмерных динамических нелинейных задач механики деформируемого твердого тела.

Вычисления были выполнены с ударниками сферической формы диаметрами  $D_{prj}=9.0\,$  мм и сеточными экранами, имеющими диаметр проволоки  $d_w=0.5\,$  мм и апертуру ячейки сетки  $l_a=3.2\,$  мм. В расчетах линия движения ударника была перпендикулярна плоскости экрана.

Число SPH-частиц в ударнике и общее число (ударник + экран) SPH-частиц, которые использовались в расчетах, были соответственно 84823 и 103093 или 393719 и 465749.

В качестве определяющих уравнений брали уравнение состояния Ми-Грюнайзена [17] и модель Джонсона-Кука [18] для предела текучести материала. В качестве модели разрушения использовалась деформационная модель Джонсона-Кука

[12]. Основные данные для вольфрама и сплава алюминия, использованные нами в расчетах, показаны в табл. 3. Данные для алюминиевого сплава в табл. 3 — это данные для сплава Al7075-T651, близкого по своим параметрам российскому сплаву B95.

Модель Джонсона – Кука [18] имеет достаточно простой вид и в то же время учитывает основные эффекты, наблюдаемые в экспериментах при высокоскоростном деформировании металлов: упрочнение за счет накопления пластических деформаций и увеличения скорости деформирования, а также разупрочнение за счет нагрева материала. Предел текучести в модели Джонсона – Кука имеет вид

$$Y = (A + B\bar{\varepsilon}_p^n) (1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*) (1 - T^{*m}), \qquad (1)$$

где  $\bar{\varepsilon}_p$  — эффективная пластическая деформация,  $\dot{\varepsilon}^*=\dot{\bar{\varepsilon}}_p/\dot{\bar{\varepsilon}}_0$  — скорость эффективной пластической деформации,  $\dot{\varepsilon}_0=1$  с $^{-1}$ ;  $T^*=(T-T_0)/(T_m-T_0)$ , где  $T_0$  — начальная температура и  $T_m$  — температура плавления. Параметры  $A,\ B,\ C,\ n,\ m$  и  $T_m$  являются параметрами материала (табл. 3). Деформация при разрушении в модели Джонсона – Кука имеет вид

$$\varepsilon_f = [D_1 + D_2 \exp(D_3 \sigma^*)] (1 + D_4 \ln \dot{\varepsilon}^*) \times \times (1 + D_5 T^*), \quad (2)$$

где  $\sigma^*$  — отношение давления к эффективному напряжению,  $D_1,\dots,D_5$  — константы в модели разрушения (табл. 3). Разрушение в данной SPH-частице происходит, если параметр поврежденности  $D=\sum \Delta \bar{\varepsilon}_p/\varepsilon_f$  становится равным единице (суммирование ведется по всем шагам по времени до момента разрушения).

**Таблица 3.** Константы моделей пластичности и разрушения Джонсона – Кука и константы уравнения Ми – Грюнайзена

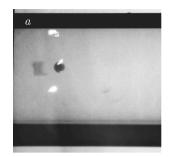
	Модель		
Параметры	Экран: вольфрам [19–21]	Ударник: сплав алюминия [22,23]	
Уравнение с	остояния		
$ ho_0$ , кг/м $^3$	18200	2810	
$c_b$ , M/C	4030	5240	
k	1.237	1.40	
$\gamma_0$	1.67	1.97	
a	0.38	0	
$T_0$ , K	293	293	
Удельная теплоемкость, Дж/кг·К	129	960	
Модель пластичност	и Джонсон	$a-Ky\kappa a$	
A, ГПа	2.2	0.527	
B, ГПа	2.92	0.575	
n	0.19	0.72	
C	0.025	0.017	
m	1.09	1.61	
$G$ , $\Gamma\Pi$ a	160	27	
$T_m$ , K	3695	793	
Модель разрушения			
D1	0.0	0.110	
D2	0.33	0.572	
D3	-1.5	-3.446	
D4	0.0	0.016	
D5	0.0	1.099	

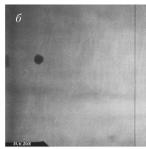
Примечание. G — модуль сдвига,  $c_b$  и k — параметры на ударной адиабате  $S=c_b+kU$ , где S и U — соответственно скорость ударной волны и массовая скорость,  $K_s=\rho_0c_b^2$  — адиабатический модуль объемного сжатия,  $\gamma=\gamma_0+a(\rho/\rho_0-1)$  — коэффициент Грюнайзена, a — константа.

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### 4.1. Эксперимент № 2.1

Эксперимент № 2.1 (см. табл. 2) заметно отличается по величине скорости ударника от остальных



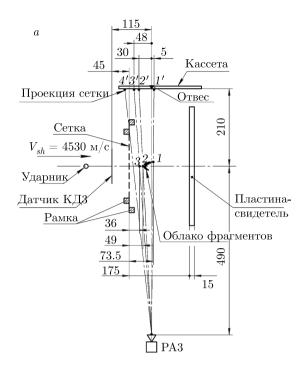


**Рис. 4.** Рентгеновские снимки, характеризующие состояние ударника a) в вакуумном тракте (PA1),  $\delta$ ) в вакуумной камере перед встречей с экраном (PA2)

экспериментов, поэтому мы его рассмотрим отдельно. Кроме того, в этом эксперименте рентгеновская съемка позволила получить снимки хорошего качества, которые дают возможность оценить скорости фрагментов в различных частях облака фрагментов.

На рис. 4 приведены снимки, полученные рентгеновскими аппаратами PA1 и PA2, регистрирующими состояние ударника и поддона до встречи с сеточным экраном. На снимке, полученном в вакуумном тракте рентгеновским аппаратом PA1 на расстоянии 3460 мм от экрана, наблюдаются ударник и летящий следом за ним на удалении 9 мм поддон (рис. 4a). На снимке, полученном в вакуумной камере на расстоянии 1150 мм от экрана, летит только ударник, что свидетельствует о срабатывании отсечного устройства (рис.  $4\delta$ ).

На рис. 5 приведены схема рентгеновской регистрации облака фрагментов ударника, разрушенного на сетке, и рентгеновский снимок, полученный через 13.1 мкс после взаимодействия ударника с сеткой. Для контроля ориентации использовался отвес, вывешенный непосредственно перед кассетой с рентгеновской пленкой (рис. 5а). Проекция отвеса на рентгеновском снимке (рис. 56) видна как темная вертикальная линия. Проекция ближнего к кассете края сетки (обозначена как точка 4 на рис. 5a) экспонируется через зазор рамки крепления и видна как светлая вертикальная полоса с точкой 4' на рис. 56. Вертикальное положение проекции сетки подтверждает соосное расположение рентгеновского аппарата РАЗ и отвеса. На рис. 5а также схематично изображено облако фрагменов, образованное при разрушении ударника и восстановленное по изображению на рентгеновском снимке (рис. 56). Видимая на рентгеновском снимке проекция облака частиц отражает упомянутую выше особенность разрушения ударника на сеточном экране — формирование



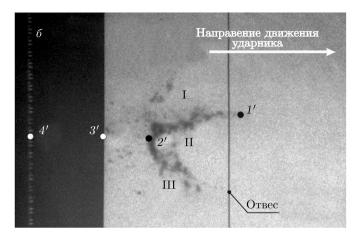


Рис. 5. Схема рентгеновской регистрации облака фрагментов ударника в эксперименте № 2.1 (a) и снимок, полученный рентгеновским аппаратом (PA3)  $(\delta)$ 

струй фрагментов, движущихся как в направлении начального движения ударника, так и в поперечных направлениях. Струи формируются в результате перемещения материала фронтальной части ударника сквозь ячейки сетки. На рис. 5б три видимых на проекции струи отмечены римскими цифрами: две боковые струи I и III и центральная струя II. Проекция наиболее удаленной от мишени на момент регистрации точки облака фрагментов — головная часть струи II — обозначена на рис. 56 точкой 1'. На схематичном изображении облака фрагментов на рис. 5a ей соответствует точка 1. Проекция тыльной части облака на рентгеновском снимке (рис. 56) обозначена точкой 2'. На схеме рис. 5aей соответствует точка 2. По всей видимости, эта область сформирована фрагментами тыльной части ударника. На рис. 5а также изображены линии этих проекций. Кроме того, следует отметить указанную на схеме точку 3, соответствующую границе визуализируемой области, которой соответствует точка 3' на рентгеновском снимке, обозначающая границу видимой области слева и затемнение справа.

Известное расстояние от проекции сетки на рентгеновскую пленку до отвеса и известная задержка времени срабатывания рентгеновского аппарата относительно момента взаимодействия ударника с сет-

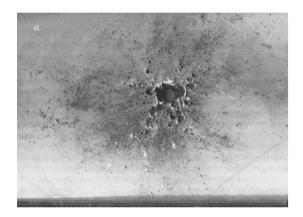
кой, с учетом геометрии схемы рентгеновской регистрации, позволяют определить скорости фрагментов. Результат показан в табл. 4. Скорость лидирующего фрагмента имеет величину 5726 м/с, что в 1.26 раз превышает начальную скорость ударника. Данный эксперимент подтверждает результаты ранее проведенных нами экспериментов по фрагментации алюминиевого ударника на стальных сетках (см. табл. 1), в которых скорость лидирующего фрагмента существенно превышала исходную скорость ударника.

В табл. 4 для сравнения показаны результаты измерения скорости фрагментов в эксперименте  $\mathbb{N}^2$  1.1 со стальной сеткой (см. табл. 1). Коэффициент ослабления  $k_{att}$ , см. в таблице, определяется отношением скорости тыльной части облака фрагментов к начальной скорости ударника, а коэффициент усиления  $k_{amp}$  — отношением скорости фрагментов в головной части струи к начальной скорости ударника. Из табл. 4 видно, что  $k_{att}$  и  $k_{amp}$  хорошо согласуются для двух экспериментов.

На рис. 6 приведена фотография лицевой поверхности пластины-свидетеля с повреждениями. В геометрическом центре повреждений пластины-свидетеля толщиной 16.5 мм имеется сквозное отверстие с рваными краями. Область, примы-

**Таблица 4.** Результаты экспериментального измерения скоростей фрагментов ударника в экспериментах № 2.1 и 1.1

				Скорости		Скорости	
	Диаметр, мм/ $l_a  imes d_w$ , мм $ imes$ мм/ материал	Cronomy	фрагментов		фрагментов		
№ эксп.		Скорость	в тыльной	<i>l</i>	в головной	$k_{amp}$	
N- SKCII.	материал	сеточного	ударника,	части	$k_{att}$	части	$\kappa_{amp}$
	ударника	экрана	км/с	облака,		струи,	
				км/с		$\kappa_{ m M}/c$	
2.1	9.0/	3.2  imes 0.5 /	4.53	3.74	0.83	5.72	1.26
2.1	сплав В95	вольфрам	4.00	5.74	0.00	5.12	1.20
1.1	6.35/	2.0  imes 0.6 /	5.84	4.69	0.80	7.38	1.26
1.1	АД-1	сталь	0.04	4.09	0.80	1.30	1.20



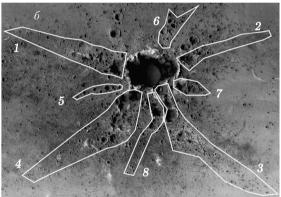


Рис. 6. a) Общий вид пластины-свидетеля (размер  $300 \text{ мм} \times 300 \text{ мм}$ ) эксперимента № 2.1 с повреждениями (вид лицевой стороны).  $\delta$ ) Увеличенное изображение центральной области с цепочками кратеров (1–8)

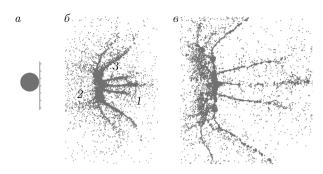
кающая к отверстию в центре повреждений на пластине-свидетеле (рис. 6), сформирована воздействием плотно летящих фрагментов центральной части облака и имеет повреждения в виде кратеров глубиной до 12 мм.

От геометрического центра повреждений (рис. 66) идут четыре явно выраженные цепочки кратеров, имеющие длины от 60 до 75 мм. Кратеры, формирующие цепочки, лежащие вблизи центрального отверстия, имеют диаметры до 6 мм и глубины до 7 мм, наиболее удаленные — диаметры до 0.5 мм и глубины до 0.2 мм. Практически вся поверхность пластины-свидетеля в области диаметром 250 мм покрыта мелкими кратерами диаметрами от 0.5 до 2.0 мм. Из них можно выделить также несколько менее длинных цепочек из более мелких кратеров (например, цепочки 5, 6, 7 и 8 на рис. 66), причем размеры кратеров уменьшаются по мере удаления

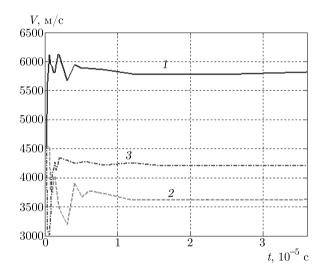
от геометрического центра повреждений. Цепочки кратеров имеют тенденцию располагаться вертикально и горизонтально под углами, близкими к 45°, что отражает вертикально-горизонтальное расположение проволок, из которых сплетена сетка. Механизм пространственного распределения струй фрагментов и, соответственно, цепочек кратеров обсуждался ранее [6].

Было проведено численное моделирование эксперимента № 2.1. Общее число SPH-частиц в моделировании составляло 465749, из них 393719 частицами моделировался ударник. Данные, использованные для моделирования, показаны в табл. 2 и 3. Результаты моделирования представлены на рис. 7, 8 и в табл. 5.

На рис. 7 показано облако фрагментов в различные моменты времени, полученное численным моделированием при прицеливании ударника в центр



**Рис. 7.** Фрагментация алюминиевого ударника на вольфрамовой сетке (вид сбоку): a) t=0 мкс;  $\delta$ ) t=13 мкс (цифрами отмечены точки, где определялась массовая скорость, см. рис. 8); e) t=36 мкс. Скорость удара 4.53 км/с. На рис.  $\delta$  и e отображены только частицы ударника



**Рис. 8.** Скорости головной 1 и хвостовой 3 частей центральной струи, а также скорость тыльной 2 части облака фрагментов в зависимости от времени

ячейки сетки. В этом случае образуется одна центральная и четыре основные боковые струи фрагментов, которые хорошо видны на рис. 76 и 76. Кроме того, образуются четыре боковые струи более мелких фрагментов, они отчетливо видны на рис. 76. Общая картина фрагментации, показанная на рис. 7, находится в качественном согласии с экспериментом (рис. 6): восемь боковых струй производят четыре цепочки «крупных» и четыре цепочки «мелких» кратеров, расходящиеся от центра повреждений на пластине-свидетеле (рис. 66). Центральная струя с фрагментами центральной части облака фрагментов (рис. 76,6) образует в эксперименте сквозное отверстие в пластине-свидетеле (рис. 6).

**Таблица 5.** Результаты расчета скорости фрагментов ударника в численном моделировании (рис. 8)

Положение фрагмента	Скорость ударника, км/с	Скорость фрагмента, км/с	Отношение скорости фрагмента к скорости ударника
В головной части центральной струи 1		5.82	1.28
В хвостовой части центральной струи 3	4.53	4.21	0.93
В тыльной части облака фрагментов 2		3.63	0.80

Момент времени t=13 мкс (рис. 76) соответствует регистрации фрагментов в эксперименте (рис. 5), где определялись скорости фрагментов в различных частях облака. Момент времени t = 36 мкс (рис. 7e) приблизительно соответствует времени встречи облака фрагментов с пластиной-свидетелем. На снимке (рис. 5) видны одна центральная и две боковые струи, так как направление съемки было соосно одному из направлений проволок в сеточном экране. Чтобы на рис. 76,6 были видны все боковые струи, картинка была повернута примерно на 45° относительно оси, совпадающей с направлением движения ударника, и отключен показ частиц сетки. В эксперименте (рис. 5) центральная струя несколько смещена относительно этой оси, по-видимому, из-за того, что точка пересечения траектории ударника с сеткой была смещена относительно центра ячейки сетки.

При расчетах в соответствующих частях облака фрагментов (рис. 76) были выбраны определенные SPH-частицы, что позволило оценить скорости движения этих частей. На рис. 8 показаны скорости головной 1 и хвостовой 3 частей центральной струи, а также скорость тыльной 2 части облака фрагментов в зависимости от времени. Обозначения на рис. 8 соответствуют обозначениям на рис. 76. Видно, что эти скорости через 10 мкс после удара практически не меняются со временем. Их значения

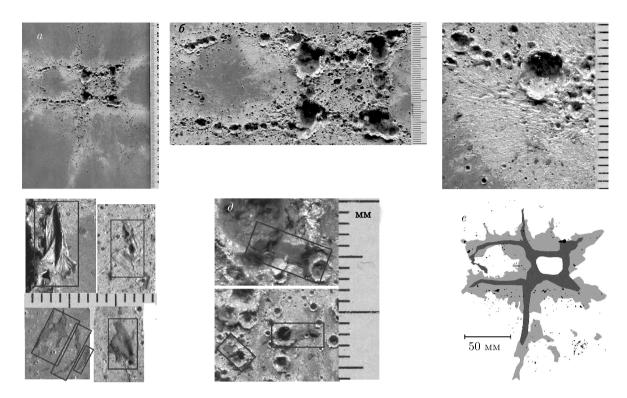


Рис. 9. Фотографии пластины-свидетеля с повреждениями в эксперименте № 2.2 (табл. 2): a — вид с лицевой стороны; b — геометрический центр повреждений; b — расплав алюминия на свидетеле; b — некоторые металлические чешуйки, упавшие на кратеры; b — зоны цепочек кратеров (темно-серый цвет), зоны, покрытые расплавом (светло-серый цвет), отдельные металлические чешуйки (черный цвет)

представлены в табл. 5, где также показано отношение скоростей к исходной скорости ударника. Видно, что вычисленная скорость головной части струи (5.82 км/с) и коэффициент усиления ( $k_{amp}=1.28$ ) хорошо согласуются с найденными экспериментально (табл. 4, эксп. № 2.1). Скорость хвостовой части струи существенно меньше, что приводит к растягиванию струи в пространстве (ср. рис. 76 и 76). Вычисленные значения скорости тыльной части облака фрагментов (3.63 км/с) и коэффициента ослабления ( $k_{att}=0.8$ ) также удовлетворительно согласуются со значениями 3.74 км/с и 0.83, найденными в эксперименте (табл. 4, эксп. № 2.1).

#### 4.2. Эксперименты №№ 2.2, 2.3

В экспериментах №№ 2.2, 2.3 скорости взаимодействия ударника с сеточным экраном были соответственно  $7.15~\rm km/c$  и  $6.79~\rm km/c$ . В данных экспериментах наибольший интерес представляет картина повреждений пластины-свидетеля.

На рис. 9 приведены фотографии лицевой поверхности пластины-свидетеля с повреждениями в эксперименте № 2.2. В этом эксперименте

в вакуумной камере была установлена двухслойная пластина-свидетель (две плиты толщиной по  $16.5\,$  мм). Однако по результатам эксперимента  $\mathbb{N}^2$  2.2 пробивание даже первого слоя отсутствовало. Геометрический центр повреждений (рис. 9) представляет собой квадрат со стороной 30 мм, в углах которого расположены четыре крупных кратера диаметрами от 8 до 10 мм и глубинами от 11 до  $13\,$  мм. Такое расположение кратеров обусловлено, как мы увидим из численного моделирования (см. ниже рис. 14a, $\theta$ ), попаданием линии движения ударника в ребро вблизи узла сетки, что приводит к формированию четырех относительно крупных фрагментов и несимметричной картине морфологии повреждений (рис. 9).

От кратеров, расположенных в вершинах квадрата, идут цепочки кратеров. Справа от квадрата цепочки расположены под углом примерно 45°. Лежащие слева от геометрического центра повреждений цепочки кратеров идут почти параллельно сторонам квадрата, затем загибаются, образуя незамкнутую область в виде прямоугольника со сторонами 40 мм и 65 мм. Кратеры, цепочки которых образуют длинные стороны прямоугольника, имеют прак-

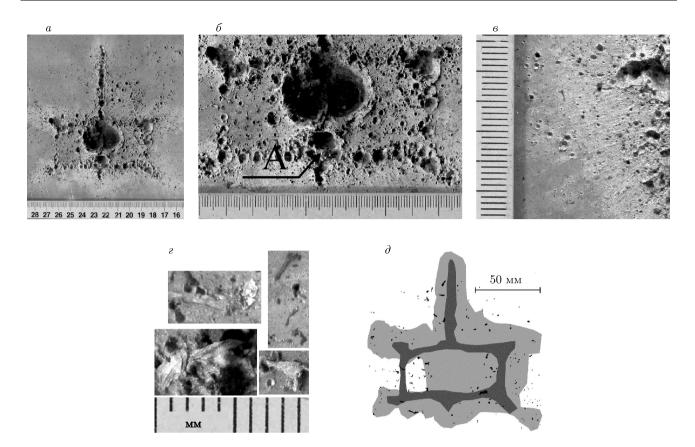


Рис. 10. Фотографии пластины-свидетеля с повреждениями в эксперименте № 2.2 (табл. 2): a — вид с лицевой стороны; b — геометрический центр повреждений; b — образец расплава алюминия на поверхности свидетеля; b — образцы некоторых металлических чешуек на свидетеле; b — зоны цепочек кратеров (темно-серый цвет), зоны, покрытые расплавом (светло-серый цвет), отдельные металлические чешуйки (черный цвет)

тически одинаковые размеры — диаметры 3 мм и глубины от 2 до 3 мм. Кроме того, вдоль цепочек кратеров наблюдаются ярко выраженные зоны эрозии.

Также на поверхности свидетеля наблюдается налет расплава алюминия. Расплав на свидетеле выглядит как тонкая пленка серебристого цвета с характерным рельефом поверхности (рис. 96). Зона, покрытая расплавом, обрамляет зону цепочек кратеров. Толщина пленки расплава уменьшается с удалением от цепочек.

Кроме того, на поверхности свидетеля наблюдается большое количество частиц алюминия в виде чешуек серебристого или темного цвета. Образцы некоторых чешуек представлены на рис. 9г. Размеры чешуек лежат в диапазоне от субмиллиметровых до нескольких миллиметров. Можно предположить, что чешуйки имеют достаточно низкую скорость при контакте с поверхностью свидетеля, поскольку не образуют на поверхности заметных следов ударного воздействия. Кроме того, можно предпо-

ложить, что они достигают поверхности свидетеля позже, чем фрагменты ударника. На рис.  $9\partial$  изображена пара образцов чешуек, упавших на уже сформировавшиеся кратеры, образованные фрагментами ударника. При падении на кратер часть чешуек припечатывается к дну кратера, повторяя его рельеф. Распределение чешуек по поверхности свидетеля коррелирует с распределением основных повреждений, что дает повод считать, что их происхождение также связано с процессами внедрения элементов сеточного экрана в ударник и с разрушением ударника.

На рис. 9e представлена схема распределения по свидетелю зон, покрытых расплавом, зон с цепочками кратеров и отдельных чешуек (черный цвет). Площадь зон расплава  $92 \text{ см}^2$ , площадь зон с повреждениями в виде цепочек кратеров  $26 \text{ см}^2$ , суммарная площадь всех чешуек  $173 \text{ мм}^2$ .

На рис. 10 приведены фотографии лицевой поверхности пластины-свидетеля с повреждениями в эксперименте  $\mathbb{N}^2$  2.3. В этом эксперименте также ис-

пользовали двухслойный свидетель (две плиты толщиной по 16.5 мм) и пробивание первого слоя также отсутствовало. Картина повреждений пластинысвидетеля по своему виду весьма близка к картине, полученной в эксперименте № 2.2, и напоминает два соприкасающихся квадрата со сторонами 35 мм. В углах квадратов нет явно выраженных крупных кратеров в отличие от эксперименте № 2.2. Они имеют диаметры и глубины примерно 6 мм. Исключение составляет кратер А (рис. 106), имеющий глубину 12 мм. Кратеры, цепочки которых образуют стороны квадратов, имеют практически одинаковые размеры — диаметры от 2 до 4 мм и глубины от 2 до 3 мм. Вдоль цепочек кратеров наблюдаются зоны эрозии. Из вершин квадратов тянутся короткие цепочки кратеров длиной от 10 до 20 мм. Посередине расположена длинная вытянутая перпендикулярно к квадрату цепочка длиной 62 мм.

Как и в эксперименте № 2.2, в рассматриваемом эксперименте № 2.3 на поверхности свидетеля наблюдается пленка алюминиевого расплава, окаймляющая цепочки кратеров. Все сказанное о расплаве в эксперименте № 2.2 относится также и эксперименту № 2.3 Однако, в отличие от эксперимента № 2.2, расплав распределен менее однородно относительно цепочек. Одна из зон свидетеля эксперимента № 2.3, покрытая расплавом, представлена на рис. 10e.

Так же как и в эксперименте № 2.2, на поверхности свидетеля наблюдается большое количество частиц алюминия в виде чешуек серебристого или темного цвета. Образцы некоторых чешуек показаны на рис. 10z.

На рис.  $10\partial$  представлена схема распределения по свидетелю зон, покрытых расплавом, зон с цепочками кратеров и отдельных чешуек. Площадь зон расплава  $91~{\rm cm}^2$ , площадь зон с повреждениями в виде цепочек кратеров  $22~{\rm cm}^2$ , суммарная площадь всех чешуек  $157~{\rm mm}^2$ .

Повреждения на поверхности свидетеля образованы летящими фрагментами ударника (рис. 11). В геометрическом центре повреждений имеется большой кратер диаметром около 25 мм, образованный ударом неотсеченных осколков поддона. Это подтверждает видимый на рентгеновском снимке (рис. 11a) летящий между цепочками частиц низкоплотный большой осколок, образовавший крупный кратер (рис. 11a).

Как отмечалось выше, в экспериментах №№ 2.2, 2.3 на поверхности свидетеля наблюдается пленка алюминиевого расплава, окаймляющая цепочки кратеров. Численное моделирование, выполненное нами, показывает, что частичное плавление удар-

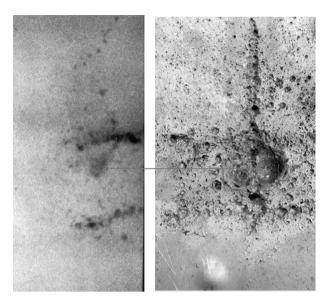


Рис. 11. Совмещенные рентгеновский снимок (a) и фотография  $(\delta)$  повреждений на лицевой поверхности пластины-свидетеля в эксперименте N2.3

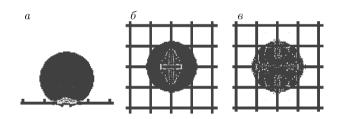


Рис. 12. (В цвете онлайн) Области давления при попадании ударника в узел сетки со скоростью 7.15 км/с (расчет). Область давления до 100 ГПа показана синим цветом, а выше 100 ГПа — желтым цветом. a) Сечение по плоскости симметрии — вид сбоку в момент времени 0.2 мкс после контакта ударника с сеткой;  $\delta$  и  $\epsilon$ ) вид снизу (со стороны сетки) в моменты соответственно 0.2 и 0.4 мкс

ника с образованием жидкой фазы происходит уже в области контакта ударника с сеткой (рис. 12). В качестве критерия для оценки плавления алюминиевого ударника было выбрано давление за фронтом ударной волны, которое при плавлении, как было показано в работе [24], должно превышать 100 ГПа. Как видно на рис. 12, в первые моменты времени после внедрении ударника в сетку образуются расходящиеся ударные волны с амплитудами, достаточными для плавления алюминия, которые «заметают» площадь в четырех ячейках сетки, накрываемых ударником. Однако в последующие моменты относительная скорость ударника и сетки уменьшается, а давление в области их контакта быстро па-

<b>№</b> эксп.	Ооъем всех кратеров, мм <sup>3</sup>	Объем замкнутых цепочек, мм <sup>3</sup>	Объем расходящихся цепочек, мм <sup>3</sup>	Объем остальных кратеров, мм <sup>3</sup>	Объем самого крупного кратера, мм <sup>3</sup>	Количество кратеров
2.2	2917	1813	951	153	524	17726
2.3	2569	1618	559	393	299	11777

**Таблица 6.** Оценки объемы кратеров на свидетелях в экспериментах  $N \ge 2.2$ , 2.3

дает. Поэтому, как показывают расчеты, происходит только частичное плавление ударника в его фронтальной части.

Для экспериментов №№ 2.2, 2.3 была проведена оценка объемов кратеров. Объем кратера является мерой кинетической энергии образовавшего его фрагмента [25]. Объем кратеров оценивался как половина объема эллипсоида с малой и большой полуосями эллипса, вписанного в контур кратера, видимый на отсканированном изображении поверхности пластины-свидетеля. При этом не учитывался объем кратера, образованного ударом остатка поддона и обозначенного на рис. 11. Разрешение цифрового изображения позволило получить данные для кратеров с видимыми размерами от 0.03 мм и выше. Как отмечалось выше, фрагментация ударника на сеточной преграде сопровождается формированием струй из фронтальной части. Струи образуют на свидетеле расходящиеся цепочки кратеров. Замкнутые цепочки кратеров образуются из тыльной части ударника. В табл. 6 представлены результаты оценки объемов кратеров.

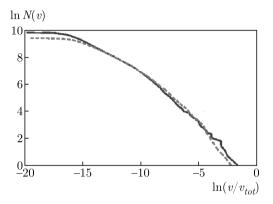
Кумулятивное распределение кратеров по объемам определяется как

$$N(v) = \int_{v}^{\infty} n(v) \, dv, \tag{3}$$

где n(v) — функция распределения объемов кратеров. Кумулятивное распределение объемов всех кратеров в экспериментах №№ 2.2, 2.3 изображено на рис. 13. Как видно на рисунке, распределения хорошо согласуются за исключением области малых объемов (менее  $8.8 \cdot 10^{-4}$  мм<sup>3</sup>).

Было проведено численное моделирование экспериментов  $\mathbb{N}\mathbb{N}$  2.2, 2.3. Общее число SPH-частиц в моделировании составляло 103093 (в ударнике было 84823 SPH-частиц). Данные, использованные для моделирования, показаны в табл. 3.

Чтобы выяснить происхождение картин повреждений на свидетелях, показанных на рис. 9 и 10,

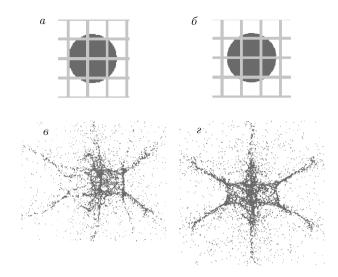


**Рис. 13.** Кумулятивное распределение объемов кратеров на свидетелях в экспериментах  $N^2$  2.2 (сплошная линия) и  $N^2$  2.3 (штриховая линия). По оси абсцисс отложен логарифм объема кратера, нормированного на  $v_{tot}$  — суммарный объем всех кратеров на свидетеле для данного эксперимента

моделирование было проведено для различных точек пересечения линии движения ударника с сеткой при скоростях столкновения соответственно 7.15 и 6.79 км/с. В экспериментах пластина-свидетель располагалась на расстоянии 165 мм от сеточного экрана. Отсюда легко оценить время, за которое облако фрагментов достигает поверхности свидетеля после столкновения ударника с сеткой. Оно составляет приблизительно 26 и 27 мкс для экспериментов соответственно № 2.2 и № 2.3.

Результаты моделирования представлены на рис. 14 в виде двух картин фрагментации ударника, которые, на наш взгляд, наиболее близки к картинам повреждений свидетелей, показанных на рис. 9 и 10. В первом случае точка пересечения линии движения ударника с сеткой находится на ребре, на расстоянии  $(1/4)(l_a+d_w)$  от узла, во втором — на середине ребра ячейки сетки, на расстоянии  $(1/2)(l_a+d_w)$  от любого из узлов, примыкающего к этому ребру (узел — место пересечения проволок).

На рис. 14*a,в* в облаке фрагментов можно различить «квадрат», сторона которого равна 28 мм,



**Рис. 14.** Картины фрагментации ударника в зависимости от точки пересечения линии движения ударника с сеткой: точка пересечения находится на ребре, на расстоянии  $(1/4)(l_a+d_w)$  от узла сетки (a,s), и на середине ребра ячейки сетки  $(\delta,s)$ . Показаны два варианта взаимного положения ударника и сетки перед их столкновением  $(a,\delta)$  и картины фрагментации через 26 и 27 мкс после столкновения со скоростями соответственно 7.15 и 6.79 км/с

что приблизительно совпадает со стороной квадрата, видимого на фоне повреждений пластины-свидетеля в эксперименте № 2.2 (рис. 9). От правой стороны «квадрата» на рис. 14a,6 отходят под разными углами две пары цепочек фрагментов, различающиеся по массе. Две пары цепочек кратеров правее квадрата повреждений можно также различить на рис. 9. Левее «квадрата» на рис. 14a,6 различимы три пары цепочек фрагментов, в то время как на рис. 9 отчетливо видны только две пары цепочек кратеров.

На рис. 14*б,г* в облаке фрагментов можно различить два соприкасающихся «квадрата» со сторонами 32 мм, что приблизительно совпадает со стороной квадратов, видимых на фоне повреждений пластины-свидетеля в эксперименте № 2.3 (рис. 10). Из вершин квадратов тянутся цепочки фрагментов; всего на рис. 14*б,г* шесть таких цепочек. Четыре цепочки слева и справа от соприкасающихся квадратов имеют длину около 60 мм, что значительно превышает длину цепочек кратеров (от 10 до 20 мм) на рис. 10. Две цепочки фрагментов, расположенные по центру симметрии рис. 14*б,г*, имеют длину, превышающую 60 мм. На рис. 10 мы видим только одну цепочку кратеров, направленную вверх снимка и имеющую длину 62 мм. Такое различие между мо-

делированием и экспериментом может быть связано с тем, что в эксперименте точка пересечения линии движения ударника с сеткой находилась выше середины ребра ячейки сетки.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты экспериментальных исследований и численного моделирования фрагментации ударников диаметром 9.0 мм из алюминиевого сплава В95 на вольфрамовых сетках с апертурой 3.2 мм и диаметром проволоки 0.5 мм в условиях вакуумирования испытательной камеры при скоростях соударения до 7 км/с (эксперименты № 2.1-2.3 в табл. 2), моделирующих воздействие частиц космического «мусора» на сеточную экранную защиту космического аппарата. Разгон ударников проводился с использованием двухступенчатой легкогазовой пушки. Для регистрации состояния ударника перед соударением с сеточным экраном и процесса его фрагментации использовалась рентгеновская съемка. Параметры облака фрагментов ударника регистрировались также с помощью толстой пластины-свидетеля из сплава АМг6, размещаемой за сеточным экраном.

Численное моделирование в трехмерной геометрии было выполнено на основе полной системы уравнений механики деформируемого твердого тела методом гладких частиц с помощью пакета LS-DYNA [12] версии 971. В качестве определяющих уравнений брали уравнение состояния Ми – Грюнайзена и модель пластичности Джонсона – Кука [18]. В качестве модели разрушения использовалась деформационная модель Джонсона – Кука. Во всех расчетах линия движения ударника была перпендикулярна плоскости экрана.

По результатам рентгеновской съемки, анализа повреждений поверхности свидетелей и численного моделирования выявлены морфологические особенности образующихся облаков фрагментов и распределение скоростей фрагментов в облаке при пробитии сеточных экранов, изготовленных из вольфрамовой проволоки.

В эксперименте № 2.1 с помощью рентгеновской съемки найдены скорости различных частей облака фрагментов. Показано, что скорость лидирующего фрагмента центральной струи в 1.26 раз превышает начальную скорость ударника, в то время как тыльная часть облака фрагментов движется со скоростью, составляющей всего 0.83 начальной скорос-

ти ударника. Эти результаты хорошо согласуются с аналогичным экспериментом со стальной сеткой из работы [7] (см. табл. 4). Численное моделирование также дало хорошее согласие с экспериментом (см. табл. 5). Таким образом, эксперимент № 2.1, наряду с работами [7,8], дает еще одно прямое экспериментальное доказательство кумулятивного эффекта при фрагментации ударника на сетке, который был предсказан нами в работе [6].

Изучение следов воздействия облака фрагментов на пластину-свидетель показало, что вещество ударника в облаке фрагментов находится как в твердом фазовом состоянии в виде фрагментов, образующих на свидетеле характерные кратеры ударного типа, так и в виде расплава, который при выпадении на поверхность свидетеля покрывает его пленкой серебристого цвета с характерным рельефом. Также вероятно, что часть материала ударника образует мелкие частицы в виде чешуек, имеющие низкую скорость, которые не образуют на свидетеле видимых следов ударного воздействия.

Отличительной особенностью экспериментов №№2.2, 2.3 является необычный вид картины повреждений на поверхности пластины-свидетеля, которую кратко можно охарактеризовать как квадрат или прямоугольник с отходящими от него цепочками кратеров. Такая картина повреждений не свойственна экспериментам со скоростями 3-4 км/с [6] и отличается от экспериментов со стальными сетками со скоростями удара до 7 км/с [26]. Было проведено численное моделирование экспериментов №№ 2.2, 2.3. Чтобы выяснить происхождение картин повреждений на свидетелях, показанных на рис. 9 и 10, моделирование было проведено для различных точек пересечения линии движения ударника с сеткой при скоростях столкновения 7.15 и 6.79 км/с, соответствующих скоростям ударника в этих экспериментах. Результаты моделирования представлены на рис. 14 в виде двух картин фрагментации ударника, которые, на наш взгляд, наиболее близки к картинам повреждений свидетелей, показанных на рис. 9 и 10.

#### ЛИТЕРАТУРА

The Inter-Agency Space Debris Coordination Committee, Protection Manual, IADC-04-03, Version 7.1, Prepared by the IADC WG3 members, 2018, Retrieved from https://www.iadc-home.org/documents/public/view/page/5/id/81#u.

- **2**. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., ЖЭТФ **156**, 806 (2019).
- E. L. Christiansen and J. H. Kerr, Int. J. Impact Eng. 14, 169 (1993).
- 4. Л. Н. Безруков, И. М. Гадасин, А. И. Киселев и др., Космонавтика и ракетостроение **18** (2000).
- F. Horz, M. J. Cintala, R. P. Bernhard et al., Int. J. Impact Eng. 17, 431 (1995).
- N. N. Myagkov, T. A. Shumikhin, and L. N. Bezrukov, Int. J. Impact Eng. 37, 980 (2010).
- 7. П. Н. Калмыков, С. В. Колчев, Н. В. Лапичев и др., Мех. комп. матер. и констр. **21**(1), 3 (2015).
- 8. П. Н. Калмыков, Н. В. Лапичев, И. А. Михайлов и др., Мех. комп. матер. и констр. **24**(1), 46 (2018).
- 9. A. V. Gerasimov, D. B. Dobritsa, S. V. Pashkov et al., Cosmic Res. 54, 118 (2016).
- A. Cherniaev and I. Telichev, Adv. Mater. Sci. and Eng. 2017, ID 7218482 (2017).
- N. Myagkov and T. Shumikhin, AIMS Mater. Sci. 6, 685 (2019).
- **12**. J. O. Hallquist. *LS-DYNA Theory Manual*, Livermore Software Technology Corporation (2006).
- 13. J. J. Monaghan, Rep. Progr. Phys. 68, 1703 (2005).
- M. S. Egorova, S. A. Dyachkov, A. N. Parshikov, and V. Zhakhovsky, Computer Phys. Comm. 234, 112 (2019).
- V. E. Fortov, V. V. Kim, I. V. Lomonosov et al., Int. J. Impact Eng. 33, 244 (2006).
- П. Н. Калмыков, Н. В. Лапичев, Г. П. Шляпников, Патент РФ № 2238503 (2003).
- 17. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Физматлит, Москва (2008).
- 18. G. R. Johnson and W. H. Cook, A Constitutive Model and Data for Metals Subjected to Large Strains, High Strain Rates and High Temperatures, Proc. 7th Intern. Symp. Ballistics (1983).
- I. Rohr, H. Nahme, K. Thoma, and C. E. Anderson, Jr., Int. J. Impact Eng. 35, 811 (2008).
- **20**. T. J. Holmquist, D. W. Templeton, and K. D. Bishnoi, Int. J. Impact Eng. **25**, 211 (2001).

- . R. Vignjevic, J. C. Campbell, N. K. Bourne, and N. Djordjevic, J. Appl. Phys. **104**, 044904 (2008).
- 22. http://www.matweb.com: Online Materials Information Resource.
- . N. S. Brar, V. S. Joshi, and B. W. Harris, AIP Conf. Proc. **1195**(1), 945 (2009).
- . M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. Lett. **109**, 125505 (2012).
- . J. A. Zukas, T. Nicholas, H. F. Swift et al., *Impact Dynamics*, John Wiley and Sons, New York (1982).
- . П. Н. Калмыков, Н. В. Лапичев, И. А. Михайлов и др., Мех. комп. матер. и констр. **25**(1), 37 (2019).

# ЭФФЕКТ ВСТРЕЧНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ АНСАМБЛЯ ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ ПРИ ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКЕ: ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИ УЧЕТЕ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ

 $K.\ A.\ Баранцев\ ^{a^*},\ A.\ H.\ Литвинов\ ^a,\ A.\ C.\ Пазгалёв\ ^b,\ A.\ K.\ Вершовский\ ^b$ 

<sup>а</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого 195251, Санкт-Петербург, Россия

 $^b$  Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук 194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2020 г., после переработки 27 июля 2020 г. Принята к публикации 27 июля 2020 г.

Построена теория оптической накачки щелочных атомов при учете зеемановской и сверхтонкой структур, а также их движения в модели мгновенного перемешивания между зеемановскими и сверхтонкими подуровнями в возбужденном состоянии. Исследован эффект возникновения у атомов  $^{87}{\rm Rb}$  и  $^{133}{\rm Cs}$  углового момента, противонаправленного по отношению к моменту фотонов, которыми эти атомы накачиваются. Установлено, что данный эффект наиболее ярко выражен в  $D_2$ -линии. Проанализировано влияние давления буферного газа и интенсивности оптической накачки на особенности этого эффекта. Обсуждается влияние эффекта встречной поляризации на параметры высокочувствительных квантовых магнитометров.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020036

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время одной из приоритетных задач когнитивной науки является задача исследования, интерпретации и моделирования принципов работы головного мозга [1]. Наиболее эффективными и информативными из неинвазивных методов таких исследований являются методы магнитнорезонансной томографии (МРТ) и энцефалографии, причем магнитоэнцефалография (МЭГ) [2–5] обнаруживает значительные преимущества перед электроэнцефалографией, поскольку в принципе позволяет построить картину трехмерного распределения токов в коре головного мозга человека. Ключевую роль в системах МЭГ играют сверхчувствительные датчики магнитного поля. В настоящее время системы МЭГ строятся на основе СКВИД-магнитометров, обладающих необходимой чувствительностью; однако функционирование таких датчиков невозможно без систем охлаждения и термостатирования, что накладывает серьезные ограничения на возможность их приближения к исследуемому объекту и, как следствие, на их пространственное разрешение. Кроме того, их обслуживание крайне дорого, а соответствующие системы имеют большие размеры, что существенным образом усложняет создание мобильных передвижных диагностических систем. Поэтому разработка квантового сенсора, способного стать альтернативой датчикам СКВИД в системах МЭГ позволила бы решить ключевую проблему, ограничивающую развитие перспективного направления нейровизуализации. В действительности спектр применения таких датчиков гораздо шире, в частности они могут найти широкое применение в задачах МРТ сверхслабого поля (МРТ ССП), предполагающих ориентацию протонов в исследуемом объекте с помощью импульсов относительно сильного поля и последующую регистрацию их прецессии в слабом поле, в котором неэффективны традиционные индукционные датчики — см., например, [6]. Квантовые сенсоры также не имеют себе равных в задачах дистанционного отслеживания движущихся магнитных микро- и наночастиц [7], а также в задачах гироскопии и навигации [8–10].

<sup>\*</sup> E-mail: kostmann@yandex.ru

Принцип работы оптических квантовых магнитометрических сенсоров (квантовых магнитометров) основывается на явлениях магнитного резонанса, оптической накачки и оптического детектирования магнитного резонанса [11,12]. Использование лазерной оптической накачки [13] позволяет при облучении атомов резонансным светом с круговой поляризацией получить чрезвычайно высокую степень ориентации суммарного магнитного момента. Сущность этого метода состоит в селективном оптическом возбуждении магнитных уровней структуры основного или метастабильного состояния атомов, приводящем к нарушению больцмановского распределения в этой структуре. Метод оптического детектирования сигнала магнитного резонанса позволяет добиться предельно высокой чувствительности в измерениях магнитного поля. Существенным преимуществом этих методов является возможность создать на их основе датчик, занимающий объем в несколько кубических сантиметров [14-18]. В настоящее время наибольший прогресс в разработке квантового оптического сенсора для задач МЭГ и МРТ ССП достигнут с использованием режима подавления спин-обменного уширения магнитного резонанса в нулевых магнитных полях — SERF (Spin Exchange Relaxation Free) [19]. Однако датчикам SERF также присущи ограничения, наиболее серьезное из которых — ограниченный диапазон измеряемого поля и его изменений, особенно существенный для систем МРТ ССП.

Одним из главных параметров, определяющих чувствительность квантового магнитометра, является степень поляризации атомов, достижимая при использовании оптической накачки. Повышению эффективности накачки при использовании лазерных источников резонансного излучения посвящен ряд работ; в частности, в [20–22] наблюдался неожиданно сильный сигнал магнитного резонанса, детектируемый на уровне с полным моментом F = 4, при оптической накачке атомов <sup>133</sup>Cs со сверхтонкого уровня с полным моментом F = 3. Объяснение этого эффекта было сделано в рамках модели, предполагающей наличие большого столкновительного уширения, вызванного высокой концентрацией атомов буферного газа (азота). В этом случае циркулярно поляризованное оптическое излучение с круговой поляризацией взаимодействует с обоими сверхтонкими уровнями возбужденного  $P_{1/2}$ -состояния, что приводит к увеличению амплитуды магнитного резонанса. Этот вопрос для  $D_2$ -линии в атомах цезия изучался в [23]. Авторы этой работы при внерезонансной оптической накачке экспериментально

наблюдали высокую степень спиновой ориентации, которая, по их мнению, была значительно усилена за счет спин-обменных столкновений. В работе [24] было экспериментально и теоретически исследовано сужение магнитного резонанса, вызванное накачкой атомов Сs на крайний подуровень нижнего уровня F=3 сверхтонкой структуры. Авторы пришли к выводу, что перенос поляризации с уровня F=4 на уровень F=3 происходит за счет спин-обменных столкновений.

В работе [25] был проведен эксперимент в условиях концентрации атомов буферного газа, достаточно низкой для того, чтобы предложенный в [20-22] механизм зеемановской накачки уровня F == 4 за счет столкновительного уширения оптической линии поглощения заведомо не давал вклада в сигнал магнитного резонанса, и дано альтернативное объяснение результатов работ [20–22]. Авторы этой работы связали высокий сигнал магнитного резонанса при оптической накачке атомов <sup>133</sup>Cs с нижнего сверхтонкого уровня основного состояния с неполным выравниванием (перемешиванием) населенностей зеемановских подуровней в возбужденном состоянии щелочного атома при столкновениях с молекулами буферного газа (азота). В работе [25] было экспериментально подтверждено высказанное в [13, 26] предположение о том, что в акте столкновения молекулы буферного газа с щелочным атомом в возбужденном состоянии разрушению подвергается только состояние электронной оболочки атомов, а проекция момента ядра при этом сохраняется. Это приводит к частичному переносу поляризации из возбужденного состояния в основное за счет того, что ядерный и электронный спины связаны сверхтонким взаимодействием, и, как следствие, к тому, что возврат населенности из возбужденного состояния происходит неравномерно.

Несомненно, и состав буферного газа может влиять на процессы перемешивания между населенностями в возбужденном состоянии. Это определяет характер заселения зеемановских подуровней при переходе атома в основное состояние. Как было отмечено выше, при использовании молекулярного азота в качестве буферного газа может иметь место сохранение ядерной компоненты спина [27, 28]. При достаточно высоких давлениях столкновения возбужденных щелочных атомов с молекулами буферного газа приводят к полному перераспределению как электронных, так и ядерных моментов. Это приводит к случайному распределению населенностей всех подуровней возбужденного состояния. В этом случае спонтанные переходы из возбужденного состояния будут происходить с равной вероятностью на любой из подуровней основного состояния [29]. Эта простая модель широко применяется для больших давлений буферного газа. Очевидно, в реальном датчике, использующем механизм накачки, предложенный в [20–22] (см., например, [4]), в той или иной степени имеют место все перечисленные выше механизмы накачки — как за счет уширения оптических линий буферным газом, так и за счет неполного разрушения ядерного спина в возбужденном состоянии.

Таким образом, задача корректного описания оптической накачки щелочных атомов в ячейке с буферным газом достаточно высокой концентрации (сотни Торр) представляет существенный как прикладной, так и фундаментальный интерес. В [30] теоретически изучен световой сдвиг при оптической накачке щелочных атомов с учетом релаксационных процессов в предположении полного перемешивания между зеемановскими подуровнями возбужденного состояния. При этом в работе столкновения щелочных атомов с атомами буферного газа учитываются путем введения феноменологических констант. а движением атомов пренебрегается. Рассмотрение такой простой модели не позволяет описать целый ряд эффектов, имеющих место в реальных многоуровневых атомах [31–33].

В настоящей работе мы развиваем теорию оптической накачки щелочных атомов с учетом их движения, приводящего к доплеровскому и ударному уширению линии поглощения, а также с учетом всей зеемановской и сверхтонкой структуры как основного, так и возбужденного состояний. Корректное описание процессов оптической накачки возможно только при одновременном учете этих двух факторов ввиду того, что уширение линий переходов может быть сравнимо со сверхтонким расщеплением. Это ведет к взаимному перекрытию уровней и возбуждению одночастотным лазерным полем сразу большой группы переходов. В эту группу могут входить переходы из различных сверхтонких подуровней основного состояния, что ведет к возникновению Л-подобных схем возбуждения и низкочастотных атомных когерентностей, модифицирующих процесс поглощения. Учет столкновений щелочных атомов с атомами буферного газа проводится в модели полного перемешивания между зеемановскими и сверхтонкими подуровнями в возбужденном состоянии. Исследованы условия, при которых возникает поляризация атомов, направленная в противоположную сторону к спину накачивающих фотонов, — эффект, описанный Хаппером в

[13]; этот эффект анализируется для широкого диапазона параметров для  $D_1$ - и  $D_2$ -линий щелочных атомов  $^{87}$ Rb и  $^{133}$ Cs. Определена область интенсивностей и давлений буферного газа, при которых наблюдается наиболее яркое проявление этого эффекта.

#### 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим атом щелочного металла в поле плоской монохроматической волны, распространяющейся вдоль оси z. Вектор напряженности электрического поля волны записывается как

$$\mathbf{E}(z,t) = \mathbf{e}_p E_0 e^{-i(\omega t - kz)} + \text{c.c.}, \tag{1}$$

где  $E_0$  — комплексная амплитуда,  $\mathbf{e}_p$  — орт поляризации,  $\omega$ , k — частота и волновое число. Квантовое кинетическое уравнение для матрицы плотности в представлении Вигнера имеет вид [34]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_a} \nabla\right) \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}, \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) \right] + \\
+ \hat{R} \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) + \hat{S} \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (2)$$

Здесь  $\hat{\rho}(\mathbf{p},\mathbf{r},t)$  — атомная матрица плотности,  $\hat{R}$  — супероператор, описывающий спонтанный распад возбужденного состояния ввиду взаимодействия с вакуумным полем,  $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$  — гамильтониан, являющийся суммой атомного гамильтониана

$$\hat{H}_0 = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n|, \tag{3}$$

где  $\epsilon_n$  — энергии атомных уровней, и оператора взаимодействия в дипольном приближении и приближении вращающейся волны:

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{E} = -E_0 \sum_{e,g} (\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{e}_p) \times \\ \times e^{-i(\omega t - kz)} |e\rangle \langle g| + \text{H.c.} \quad (4)$$

Здесь индекс «e» пробегает все уровни возбужденного состояния ( $P_{1/2}$  для  $D_1$ -линии и  $P_{3/2}$  для  $D_2$ -линии), а «g» — все уровни основного состояния;  $\mathbf{d}_{eg}$  — матричные элементы оператора дипольного момента.

Движение атомов учитывается посредством члена с оператором «набла» в левой части (2), описывающего баллистический пролет атомов с импульсом  $\mathbf{p}$ , и интегрального столкновительного супероператора  $\hat{S}$  в правой части, описывающего изменение импульса и внутренние переходы при столкновениях атомов.

В приближении плоского фронта волны задачу можно свести к одномерной, поскольку ввиду эффекта Доплера матрица плотности будет зависеть только от продольной компоненты скорости:  $\hat{\rho}(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = \hat{\rho}(v,z,t)$ , где  $v = p_z/m_a$  — компонента скорости вдоль оси г. Трехмерная диффузия импульса атома в результате спонтанных переходов из оптически возбужденного состояния не учитывается в силу того, что при комнатной температуре импульс фотона много меньше импульса атома. Выделим в недиагональных элементах матрицы плотности быстро осциллирующий множитель на частоте внешнего поля:  $\rho_{ge}(v,z,t) = \tilde{\rho}_{ge}(v,z,t)e^{i(\omega t - kz)}$ . Рассматривая оптически тонкую среду и пренебрегая стеночными эффектами, положим производную по координате в левой части уравнения (2) равной нулю. Тогда система квантовых кинетических уравнений (2) в момент времени t (для краткости этот аргумент опущен) примет вид

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge}(v) = -i \sum_{g'} E_0^* D_{g'e} \rho_{gg'}(v) + i E_0^* D_{ge} \rho_{ee}(v) + 
+ (i(kv - \delta_{eg}) - \gamma/2 - \nu_{opt}) \tilde{\rho}_{ge}(v), \quad (5)$$

$$\dot{\rho}_{gg'}(v) = i \sum_{e} \{ E_0^* D_{ge} \tilde{\rho}_{eg'}(v) - E_0 D_{eg'} \tilde{\rho}_{ge}(v) \} + i \omega_{g'g} \rho_{gg'}(v) - \nu \rho_{gg'}(v) + \nu_{coh} M(v) \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{gg'}(v') \, dv', \quad (6)$$

$$\dot{\rho}_{gg}(v) = i \sum_{e} \{ E_{0}^{*} D_{ge} \tilde{\rho}_{eg}(v) - E_{0} D_{eg} \tilde{\rho}_{ge}(v) \} + 
+ \frac{\gamma}{N_{g}} \sum_{e} \rho_{ee}(v) - \nu \rho_{gg}(v) + M(v) \left\{ (\nu - \nu_{SE}) \times \right. 
\times \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{gg}(v') dv' + \frac{\nu_{Q}}{N_{g}} \sum_{e} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{ee}(v') dv' + 
+ \frac{\nu_{SE}}{N_{g} - 1} \sum_{g' \neq g} \int_{0}^{\infty} \rho_{g'g'}(v') dv' \right\}.$$
(7)

Уравнение для населенностей возбужденных уровней записывать нет необходимости, поскольку в дальнейшем выразим эти населенности через условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{e} \rho_{ee}(v) + \sum_{g} \rho_{gg}(v) \right\} dv = 1.$$
 (8)

Несмотря на то, что накачка осуществляется одночастотным полем, в атомах могут возникать низкочастотные когерентности  $\rho_{gg'}$ , например, при высоких давлениях буферного газа и высоких температурах, когда уширение линии поглощения сравнимо со сверхтонким расщеплением основного состояния. При этом одночастотное поле «захватывает» оба нижних сверхтонких подуровня, создавая  $\Lambda$ -подобные схемы возбуждения, поэтому необходимо удерживать низкочастотные когерентности в системе (5)–(7).

В системе уравнений (5)–(7) множитель  $\gamma$  описывает процесс спонтанного распада возбужденного состояния,  $\gamma \sim 3 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$ . Столкновительные члены, пропорциональные  $\nu_{\alpha}$ , ( $\alpha = coh, opt, Q, SE$ ) в правых частях (5)-(7) записаны в модели сильных столкновений, когда массы активного и буферного атомов сопоставимы [35]. Уходные члены пропорциональны полной частоте столкновений  $\nu = n_{buf} \sigma u$ активного (оптически возбужденного) атома, где  $n_{buf}$  — концентрация буферного газа, u — относительная скорость атома щелочного металла и молекулы буферного газа,  $\sigma$  — газокинетическое сечение  $\sim (3...5) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ . Ядро интегралов в приходных членах имеет вид  $\nu_{\alpha}M(v)$ , поскольку в модели сильных столкновений скорость атома v после столкновения не зависит от его скорости  $v^\prime$  до столкновения. Здесь  $M(v) = (\sqrt{\pi}v_T)^{-1} \exp(-v^2/v_T^2)$  распределение Максвелла по проекции скорости,  $v_T = \sqrt{2k_BT/m_a}$  — наиболее вероятная скорость,  $u_{coh}$  — частота столкновений, при которых сохраняется низкочастотная когерентность в основном состоянии,  $\nu_{opt} = n_{buf} \sigma_G u$  — частота столкновений, при которых разрушается оптическая когерентность (ударное уширение  $\sigma_G u$  оптической линии азотом имеет величину  $\sim 10^8 \ {
m c}^{-1}/{
m Topp}$ ). Последняя определяет столкновительную ширину линии поглощения паров щелочного металла [36]. Величина

$$\nu_{SE} = n_{Me} \sigma_{Me} u_{Me} + n_{buf} \sigma_{BG} u + \left( \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 + \left( \frac{2.405}{\Re} \right)^2 \right) \mathfrak{D} \quad (9)$$

— частота неупругих столкновений, при которых происходит переход между нижними уровнями. В нее вносят вклад три процесса: разрушение спина при столкновениях между активными атомами с сечением  $\sigma_{Me} \sim 10^{-14}~{\rm cm}^2$ , при столкновениях активных атомов с буферным газом с сечением  $\sigma_{BG} \sim (1\dots 5)\cdot 10^{-22}~{\rm cm}^2$  и разрушение спина на стенках ячейки в результате диффузии к ним. Здесь  $n_{Me}$  — концентрация пара щелочного метал-

ла,  $u_{Me}$  — относительная скорость двух сталкивающихся щелочных атомов,  $L, \mathfrak{R}$  — длина и радиус цилиндрической ячейки,  $\mathfrak{D}$  — коэффициент диффузии активных атомов в буферном газе. Частота  $\nu_Q = n_{buf} \sigma_Q u$  — частота неупругих столкновений, при которых происходит переход с верхних уровней на нижние [37],  $\sigma_Q \sim 10^{-14} \dots 10^{-15} \text{ cm}^2 - \text{сече-}$ ние тушения азотом. Такое тушение происходит за счет безызлучательных переходов с участием азота, у которого полоса колебательно-вращательных переходов практически совпадает с частотой резонансных линий щелочных металлов. При этом вероятность обратного процесса — столкновительного возбуждения — при рассматриваемых температурах исчезающе мала. В выражениях (5)-(7)  $N_q$  — полное число уровней основного состояния,  $\delta_{eg} = \omega - \omega_{eg}$  — отстройка излучения от конкретного перехода  $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ ,  $D_{eq} = (\mathbf{d}_{eq} \cdot \mathbf{e}_p)/\hbar$  — проекция матричного элемента оператора дипольного момента на орт поляризации.

Приходный член в основное состояние из возбужденного за счет спонтанного распада ( $\propto \gamma$ ) и столкновений ( $\propto \nu_Q$ ) в правой части уравнения (7) записан в предположении, что в возбужденном состоянии населенность мгновенно перемешивается по всем подуровням и вниз распадается равномерным образом (со статистическим весом  $1/N_g$ ). Такой процесс в возбужденном состоянии происходит за счет случайной переориентации моментов атомов при столкновениях и имеет место при достаточно высоких давлениях буферного газа (несколько Торр и выше) [29]. Заметим, что высокая концентрация буферного газа позволяет нам пренебрегать взаимодействием активных атомов друг с другом [38, 39].

Сечение взаимодействия момента электронной оболочки с моментом относительного движения сталкивающихся атомов велико по сравнению с сечением спин-обмена, поэтому распад оптических когерентностей при столкновениях происходит значительно чаще, чем распад низкочастотных. Тогда, в предположении распада оптических когерентностей при каждом столкновении, в уравнении (5) приходный член будет отсутствовать. С математической точки зрения отсутствие интеграла по скорости в правой части этого уравнения значительно облегчит дальнейшее решение данной интегродифференциальной системы.

Далее будем искать стационарное решение, приравняв производные по времени в левых частях (5)–(7) нулю:  $\dot{\hat{\rho}}_{\alpha\beta}(v)=0$ . Тогда система станет интегральной. Для температур газовых ячеек 30–80 °C и интенсивностей не более 10 мВт/см² скорость

распада возбужденного состояния ввиду процессов столкновительного тушения превосходит скорость его заселения под действием лазерного поля, поэтому можно положить  $\rho_{ee} \ll \rho_{gg}$ , а распределение по скоростям населенностей нижних уровней и низкочастотных когерентностей максвелловским:

$$\rho_{qq}(v) = M(v)\rho_{qq}, \quad \rho_{qq'}(v) = M(v)\rho_{qq'}.$$
(10)

Чтобы свести систему к алгебраической, проинтегрируем (5)–(7) по скорости и перейдем к системе для редуцированных элементов матрицы плотности  $\rho_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\alpha\beta}(v) \, dv$ . Для этого выразим из уравнения (5) редуцированные оптические когерентности:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}_{eg}(v) dv =$$

$$= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} E_0 \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g}, \quad (11)$$

где интеграл по скорости может быть взят аналитически:

$$W(\delta_{eg}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} =$$
$$= -\frac{\sqrt{\pi}}{kv_T} w \left(\frac{\delta_{eg} + i\Gamma_{opt}}{kv_T}\right), \quad (12)$$

 $w(x) = \exp(-x^2)(1-\exp(x))$  — комплексная функция ошибок,  $\Gamma_{opt} = \gamma/2 + \nu_{opt}$  — модифицированная за счет столкновений скорость распада оптических когерентностей. Мнимая часть выражения (12) описывает форму линии поглощения на конкретном переходе  $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ , которая представляет собой контур Фойгта, имеющий доплеровскую ( $\propto kv_T$ ) и ударную ( $\propto \Gamma_{opt}$ ) ширины.

Подставим выражение (11) в уравнения (6) и (7), проинтегрированные по скорости, воспользуемся условием нормировки (8) и получим окончательно систему для населенностей нижних уровней и низкочастотных когерентностей:

$$0 = (i\omega_{g'g} - \Gamma_{12})\rho_{gg'} + |E_0|^2 \sum_{e} \left\{ D_{ge}W(\delta_{eg'}) \times \sum_{g''} D_{eg''}\rho_{g''g'} + D_{eg'}W^*(\delta_{eg}) \sum_{g''} D_{g''e}\rho_{gg''} \right\}, \quad (13)$$

$$0 = |E_{0}|^{2} \sum_{e} \left\{ D_{ge}W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} + D_{eg}W^{*}(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{g'e} \rho_{gg'} \right\} + \frac{\gamma + \nu_{Q}}{N_{g}} \times \left\{ 1 - \sum_{g'} \rho_{g'g'} \right\} - \nu_{SE} \rho_{gg} + \frac{\nu_{SE}}{N_{g} - 1} \sum_{g' \neq g} \rho_{g'g'}. \quad (14)$$

Здесь  $\Gamma_{12} = \nu - \nu_{coh} = \nu_{SE}/2$  — скорость разрушения низкочастотных когерентностей.

Алгебраическая система уравнений (13), (14) позволяет найти стационарную матрицу плотности атомов щелочного металла в оптически тонкой ячейке с буферным газом при конечной температуре в поле произвольно поляризованного монохроматического излучения, частота Раби которого удовлетворяет условию  $\Omega \ll \nu$ , а также во внешнем постоянном магнитном поле. Скалярные произведения матричного элемента дипольного момента и орта поляризации  $D_{eg}$  могут быть найдены путем разложения этих векторов по циклическим ортам, при этом ось квантования целесообразно выбрать вдоль постоянного магнитного поля.

#### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим схемы возбуждения для атомов <sup>87</sup>Rb и <sup>133</sup>Cs на  $D_1$ - и  $D_2$ -линиях монохроматическим лазерным излучением  $\sigma^+$ -поляризации (рис. 1).

Для определенности будем отсчитывать отстройку  $\delta$  поля от перехода  $|F_g=I_n+J_g\rangle \leftrightarrow |F_e=I_n+J_e\rangle$ , где  $F_g$  — полный угловой момент основного состояния,  $I_n$  — момент ядра,  $J_{g,e}$  — моменты электронной оболочки в основном и возбужденном состояниях. На рис. 1 изображены основные факторы, определяющие распределение населенностей атома в окрестности нулевой отстройки: накачка полем  $\mathbf E$ , распад из возбужденного состояния в основное с результирующей скоростью  $\gamma'$  и перемешивание населенностей в основном состоянии со скоростью  $\nu_{SE}$ . Последние два фактора приводят к равномерному распределению по подуровням основного состояния, в то время как накачка полем  $\mathbf E$  приводит к возникновению ненулевой полной поляризации.

На основе вычисленной матрицы плотности из системы уравнений (13), (14) определим среднее значение проекции полного момента следующим образом:  $P = \sum_{m=0}^{\infty} m$  (15)

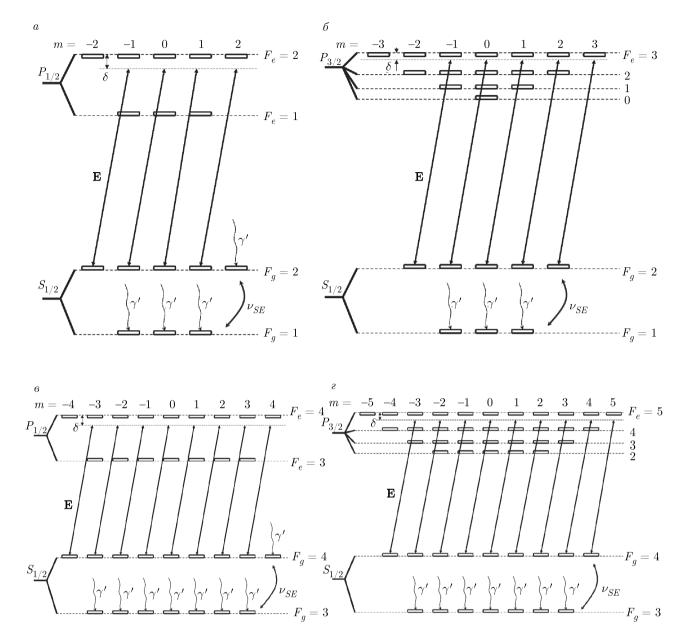
 $P = \sum_{g} m_g \rho_{gg}. \tag{15}$ 

Величина P пропорциональна поляризации полного момента атомов в газе, поэтому далее для краткости будем называть P поляризацией; отметим, что

эта величина не нормирована на единицу и лежит в границах  $\pm (I_n + J_e)$ . Здесь суммирование идет по подуровням основного состояния, так как вклад возбужденного мультиплета в предположении мгновенного перемешивания равен нулю.

На рис. 2 приведены зависимости поляризации среды от отстройки лазерного излучения. Для малых давлений буферного газа разрешима сверхтонкая структура как основного, так и возбужденного состояний. Накачка проводится излучением с  $\sigma^+$ -поляризацией, поэтому при поглощении излучения атомом его проекция полного момента возрастает на +1 (здесь и ниже численное значение моментов приведено в единицах постоянной Планка  $\hbar$ ). После возбуждения происходит релаксация, которая может идти двумя путями: через излучательную рекомбинацию атома со скоростью  $\gamma$  и через безызлучательный распад в основное состояние при неупругих столкновениях активных атомов с буферным газом со скоростью  $\nu_{Q}$ . При рассматриваемом давлении и температуре вероятность безызлучательного распада значительно превосходит вероятность спонтанной рекомбинации,  $\gamma \ll \nu_Q$  [29], поэтому при анализе исследуемых явлений последним процессом можно пренебречь. Более того, столкновительное уширение превалирует над доплеровским  $(\Gamma > k v_T)$ , поэтому ширина линии поглощения пропорциональна давлению буферного газа. В то время, пока атом пребывает в возбужденном состоянии между актами безызлучательного распада, он испытывает упругие столкновения с молекулами буферного газа, которые изменяют ориентацию механического момента активного атома и в модели полного перемешивания приводят к случайному распределению населенностей всех подуровней возбужденного состояния. Поэтому приобретенный от поглощенного фотона момент +1 при оптическом возбуждении может быть отдан буферному газу при безызлучательной рекомбинации, а атом может получить как положительную, так и отрицательную добавку к проекции полного момента. В отсутствие поля данный процесс рекомбинации привел бы к равномерному распределению по нижним подуровням. При наличии постоянной оптической накачки распределение населенностей на нижних уровнях и, как следствие, поляризация среды определяются накачкой.

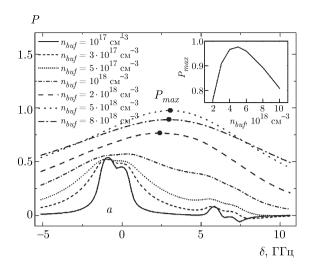
Для малых давлений буферного газа, когда поле резонансно переходам  $|F_g=2\rangle \leftrightarrow |F_e=1,2\rangle$  (рис. 2, сплошная кривая, левый сдвоенный пик), атомная поляризация имеет положительную величину, ввиду наличия уровней, с которых отсутствует выкачка полем — так называемых «карманов». Такая на-



**Рис. 1.** Схемы возбуждения атома <sup>87</sup>Rb  $(a,\delta)$  и <sup>133</sup>Cs  $(e,\epsilon)$  на  $D_1$ - и  $D_2$ -линиях соответственно лазерным излучением  $\sigma^+$ -поляризации,  $\delta$  — отстройка от перехода  $|F_g=I_n+J_g\rangle \leftrightarrow |F_e=I_n+J_e\rangle$ .  $\gamma'=(\gamma+\nu_Q)/N_g$  — результирующая скорость прихода из возбужденного состояния в основное

качка, приводящая к избыточному перенаселению не взаимодействующих со светом уровней основного состояния по механизму частичной передачи им момента через возбужденное состояние называется накачкой типа «repopulation». При настройке на переход  $|F_g=1\rangle\leftrightarrow|F_e=1\rangle$ , аналогично, имеется положительный максимум, ввиду наличия «кармана» меньшей амплитуды в связи с тем, что максимальная проекция момента у мультиплета  $F_g=1$  в два раза меньше, чем у  $F_g=2$ . Иная картина наблюдается при настройке на переход  $|F_g=1\rangle\leftrightarrow|F_e=2\rangle$ .

При этом «кармана» не возникает и поляризация становится отрицательной (рис. 2, сплошная кривая, правый отрицательный пик). Это происходит в связи с тем, что матричные элементы переходов с уровней  $|F_g=1,m=-1,0,+1\rangle\leftrightarrow|F_e=2\rangle$  возрастают в отношениях  $1/2\sqrt{3},\ 1/2$  и  $1/\sqrt{2}$  соответственно. Таким образом, максимальная скорость выкачки полем имеет место с уровня m=+1, а минимальная — с уровня m=-1. Такая накачка вызывает неравномерное заселение зеемановских подуровней, возрастающее к уровню m=-1, что в сумме дает



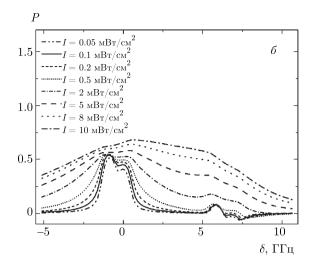


Рис. 2. Поляризация газа при накачке  $D_1$ -линии  $^{87}{
m Rb}$  монохроматическим лазерным излучением с  $\sigma^+$ -поляризацией в зависимости от отстройки при разных концентрациях буферного газа (давление варьируется от 3.1 до 250 Topp), интенсивность при этом I=0.1 мВт/см $^2$  (a) и разных интенсивностях при концентрации буферного газа  $n_{buf}=10^{17}$  см $^{-3}$  ( $\delta$ ). На вставке рис. a изображена зависимость максимального значения поляризации  $P_{max}$  (отмечено черными точками на основном рисунке) от давления буферного газа. Буферный газ — азот, температура  $T=30\,^{\circ}{\rm C}$ , длина ячейки 2 см, радиус ячейки 1 см

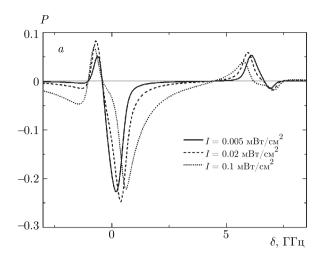
отрицательное значение поляризации. Для  $D_1$ -линии <sup>87</sup>Rb отрицательное значение составляет единицы процентов, однако для  $D_2$ -линии <sup>87</sup>Rb и <sup>133</sup>Cs можно достичь существенно больших значений отрицательной поляризации.

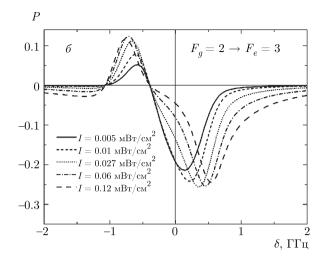
При увеличении давления буферного газа сверхтонкая структура перестает быть разрешена и зависимость поляризации от отстройки переходит в кривую с одним максимумом, который образован вкладом от всех сверхтонких компонент основного и возбужденного состояний (рис. 2a). При этом наблюдается оптимум максимального значения поляризации ( $P_{max}$ ) в зависимости от давления буферного газа (см. вставку на рис. 2a). Аналогично, при увеличении интенсивности поля начинают давать вклад все сверхтонкие подуровни  $D_1$ -линии и происходит переход в кривую с одним максимумом (рис. 2a).

Эффект возникновения отрицательной поляризации сильнее проявляется при возбуждении  $D_2$ -линии  $^{87}{\rm Rb}$ , поскольку при настройке на переход  $|F_g|=2\rangle \leftrightarrow |F_e|=3\rangle$  отсутствует «карман» и при этом максимальная проекция момента достигает значения -2. Ввиду отличия матричных элементов переходов для различных зеемановских подуровней основного состояния  $F_g=2$  скорость накачки возрастает от уровня с проекцией m=-2 к уровню с проекцией m=+2. Отрицательное значение поляризации при этом достигает -0.24 (рис. 3a), причем положение этого экстремума по

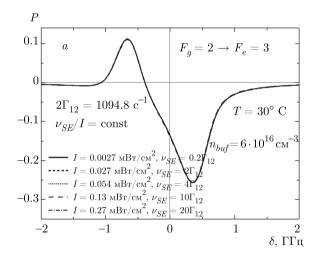
оси отстроек не совпадает с точным резонансом перехода  $|F_q=2\rangle \leftrightarrow |F_e=3\rangle$ , а смещено в высокочастотную область. Данная оптимальная отстройка определяется тем, что взаимодействие с уровнем  $F_e = 2$  уже ослаблено (поскольку при этом образуется «карман»), но с уровнем  $F_e = 3$  еще достаточно сильное. Существует также оптимальная интенсивность, при которой достигается максимальное значение отрицательной поляризации (рис. 36). Это объясняется тем, что при слишком малой интенсивности процесс перемешивания населенностей в основном состоянии превалирует и распределение населенностей стремится к равномерному, а при слишком большой интенсивности скорость выкачки с уровня  $F_q=2$  превосходит скорость перемешивания и населенность скапливается на уровне  $F_q$ = 1, распределяясь равномерно по зеемановским подуровням. Тип накачки, при котором происходит полное перемешивание в возбужденном состоянии, и, соответственно, не происходит передачи момента через возбужденное состояние в основное, называют «depopulation», или накачкой, уменьшающей населенность. Наиболее населенными оказываются те уровни, которые слабо взаимодействуют со светом. В случае  $D_2$ -линии это уровни, дающие вклад в отрицательную поляризацию при накачке светом  $\sigma^+$ -поляризации.

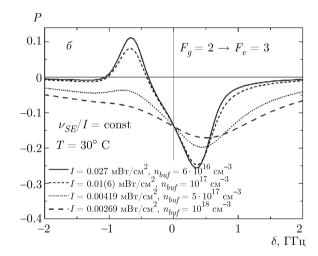
Из сказанного выше следует, что итоговое распределение населенностей определяют два противо-





**Рис. 3.** Поляризация газа при накачке  $D_2$ -линии  $^{87}{
m Rb}$  монохроматическим лазерным излучением с  $\sigma^+$ -поляризацией в зависимости от отстройки при разных интенсивностях: a) в диапазоне отстроек, захватывающем оба сверхтонких подуровня основного состояния,  $\delta$ ) в диапазоне отстроек вблизи перехода  $|F_g=2\rangle \leftrightarrow |F_e=3\rangle$ . Концентрации буферного газа  $n_{buf}=10^{17}$  см $^{-3}$ , остальные параметры те же, что на рис. 2





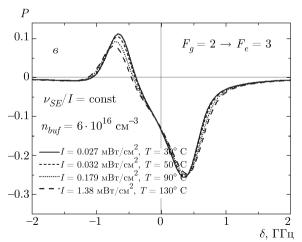


Рис. 4. Поляризация газа при накачке  $D_2$ -линии  $^{87}{
m Rb}$  монохроматическим лазерным излучением с  $\sigma^+$ -поляризацией в зависимости от отстройки при различных скоростях перемешивания населенностей в основном состоянии (a), концентрациях буферного газа (давление варьируется от 2 до 30 Topp)  $(\delta)$  и температурах  $(\epsilon)$ . При этом отношение скорости перемешивания населенностей в основном состоянии к интенсивности поддерживается постоянным путем подбора нужной интенсивности. Фиксируемые параметры указаны на рисунках. Остальные параметры те же, что на рис. 2

борствующих процесса — оптическая накачка и перемешивание населенностей в основном состоянии. При одновременном увеличении скорости перемешивания и интенсивности распределение населенностей и поляризация среды остаются неизменными, что иллюстрирует рис. 4a.

Здесь интенсивность и скорость перемешивания населенностей в основном состоянии изменяются, а их отношение сохраняется. Такое изменение скорости перемешивания населенностей в основном состоянии  $\nu_{SE}$  в эксперименте возможно посредством изменения других параметров, например, давления буферного газа, его типа или температуры, а связь  $u_{SE}$  со скоростью распада низкочастотной когерентности всегда имеет вид  $\nu_{SE} = 2\Gamma_{12}$ . Однако в математической модели мы позволили себе изменять  $\nu_{SE}$ независимо от других параметров, чтобы убедиться, что на величину поляризации влияет исключительно отношение  $\nu_{SE}/I$ . В эксперименте, зная это отношение, можно подобрать оптимальную интенсивность для изменяющейся скорости перемешивания населенностей в основном состоянии, например, при изменении температуры или давления буферного газа.

На рис. 46,6 показаны зависимости поляризации от отстройки при разных давлениях буферного газа и температурах. Для каждой кривой изменялась и интенсивность с тем, чтобы отношение интенсивности к скорости перемешивания населенностей в основном состоянии оставалось неизменным. При увеличении концентрации буферного газа кривая поляризации сглаживается и ее значения в экстремумах уменьшаются (рис. 46), поскольку ударное уширение линии поглощения увеличивается и эффективное взаимодействие с полем уменьшается (величина (12) уменьшается). Аналогичный эффект имеет место и при увеличении температуры (рис. 46), поскольку при этом растет доплеровское уширение, однако ввиду того, что при данных параметрах превалирует ударное уширение, изменение менее выражено. Заметим, что при точной настройке в резонанс  $(\delta=0)$  переходу  $|F_g=2\rangle \leftrightarrow |F_e=3\rangle$  поляризация остается неизменной при изменении концентрации буферного газа.

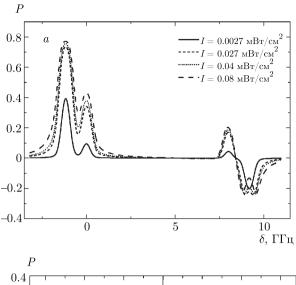
Для атомов  $^{133}\mathrm{Cs}$  в качестве активного газа стоит ожидать усиления описанных выше эффектов, так как у его атомов больше спин ядра (7/2 против 3/2 для рубидия) и, следовательно, выше максимальная проекция полного момента. В случае накачки  $D_1$ -линии отрицательная поляризация имеет место в окрестности резонанса переходу  $|F_g=3\rangle \leftrightarrow |F_e=4\rangle$ , причем при настройке точно

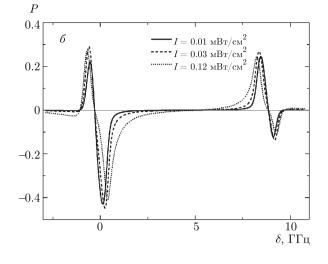
в резонанс имеет место уменьшение модуля поляризации. Таким образом, в окрестности данного перехода имеется два локальных экстремума отрицательной поляризации при достаточной интенсивности излучения (рис. 5а, отрицательный пик на штриховых и пунктирных кривых), между которыми находится провал модуля поляризации. Этот провал объясняется тем, что при настройке точно в резонанс к переходу  $|F_q=3\rangle \leftrightarrow |F_e=4\rangle$  происходит выкачка населенности на уровень  $F_q = 4$  и поляризация уменьшается по модулю. При небольшой отстройке от этого перехода скорость выкачки с уровня  $F_q = 3$ , на котором формируется накачка отрицательного момента, уменьшается и суммарная населенность увеличивается. Этот эффект также наблюдался на  $D_1$ -линии <sup>87</sup>Rb, но был менее ярко выражен (см. рис. 2).

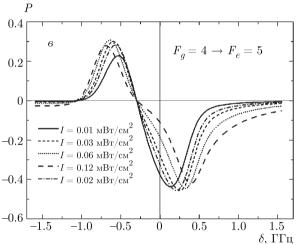
Накачка на  $D_2$ -линии  $^{133}\mathrm{Cs}$  позволяет достичь максимальной по модулю отрицательной поляризации в окрестности перехода  $|F_g=4\rangle \leftrightarrow |F_e=5\rangle$ , которая примерно в два раза больше, чем у  $^{87}\mathrm{Rb}$  (рис. 56, $\epsilon$ ). В остальном эти кривые полностью аналогичны кривым для  $\mathrm{Rb}$ .

Следует пояснить суть эффекта возникновения у атомов углового момента, направленного в противоположную сторону по отношению к моменту фотонов, которыми эти атомы накачиваются. Данный эффект не противоречит закону сохранения момента импульса, поскольку в нем участвует буферный газ. Именно за счет полного перемешивания населенностей в возбужденном состоянии при столкновениях с буферным газом атом отдает переданный фотоном положительный момент молекуле буферного газа, и населенность скапливается на тех уровнях, откуда она слабее выкачивается полем — уровнях с отрицательной проекцией полного момента (либо на уровнях с положительной проекцией момента при накачке фотонами с положительным моментом). Таким образом, исследуемый эффект вносит свой вклад в возможное максимальное значение атомной поляризации.

Как правило, в квантовых магнитометрах опрашиваются зеемановские подуровни, принадлежащие к одному сверхтонкому уровню; так, в обсуждавшемся выше варианте оптической откачки атомов со сверхтонкого уровня с полным моментом  $I_n-1/2$  схема детектирования должна быть построена так, чтобы с максимальной эффективностью регистрировать сигнал магнитного резонанса на уровне с полным моментом  $I_n+1/2$ . При этом сигнал магнитного резонанса на уровне  $I_n-1/2$  также будет давать вклад в полный сигнал: в спектре маг







**Рис. 5.** Поляризация газа при накачке  $D_1$ -линии (a) и  $D_2$ -линии  $(\delta, \epsilon)$   $^{133}$  Сs монохроматическим лазерным излучением с  $\sigma^+$ -поляризацией в зависимости от отстройки при разных интенсивностях:  $a, \delta$ ) в диапазоне отстроек, захватывающем оба сверхтонких подуровня основного состояния,  $\epsilon$ 0 в диапазоне отстроек вблизи перехода  $|F_g=4\rangle \leftrightarrow |F_e=5\rangle$ . Концентрации буферного газа  $n_{buf}=6\cdot 10^{16}$  см $^{-3}$ , остальные параметры те же, что на рис. 2

нитного резонанса, помимо основного контура  $L^+$ , возникает дополнительный контур  $L^-$ . Амплитуды контуров  $A_+$  и  $A_-$  пропорциональны зеемановским поляризациям соответствующих сверхтонких уровней. Вследствие неравенства модулей g-факторов сверхтонких уровней контур  $L^-$  оказывается сдвинут относительно контура  $L^+$  на величину  $\Delta \omega = (|\gamma_-| - |\gamma_+|)|\mathbf{B}|$ , пропорциональную модулю магнитного поля (здесь  $\gamma_-$  и  $\gamma_+$  — гиромагнитные отношения уровней  $I_n-1/2$  и  $I_n+1/2$ ,  $\mathbf{B}$  — индукция магнитного поля). В случае предельно слабых магнитных полей ( $\Delta \omega \ll \Gamma$ , где  $\Gamma$  — ширина линии магнитного резонанса) наблюдается сильное наложение контуров, что вызывает изменение как амплитуды, так и частоты основного контура  $L^+$ .

В земных магнитных полях обычно  $\Delta\omega \geq \Gamma$ , при этом изменением амплитуды контура  $L^+$  можно пренебречь и рассматривать только его частотный сдвиг, связанный с наличием соседней компоненты; нетрудно показать [11], что этот сдвиг пропорционален  $(A_-/A_+)(\Gamma/\Delta\omega)$ . Поскольку в условиях опти-

ческой накачки расстояние  $\Delta\omega$  между резонансами также зависит от величины световых сдвигов, оно варьируется при изменении условий накачки, что приводит к резкому снижению стабильности квантового магнитометра. Приведенные расчеты степени поляризации ансамбля на уровне  $I_n - 1/2$  с учетом эффекта встречной поляризации позволят подобрать условия, при которых амплитуда  $A_{-}$  равна нулю и, следовательно, влияние контура  $L^-$  на частоту основного контура  $L^+$  минимально. В дальнейшем вопрос о реализуемости такого режима накачки будет исследован с учетом неполного перемешивания полных моментов атомов в возбужденном состоянии [25], а также неэквидистантности зеемановских подуровней внутри одного сверхтонкого состояния [11], которая может приводить к дополнительному расщеплению контуров  $L^+$  и  $L^-$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе развита теория оптической накачки щелочных атомов с учетом сверхтонкой

и зеемановской структур и движения атомов при наличии буферного газа, т.е. в условиях, реализующихся в высокочувствительных квантовых магнитометрах с лазерной накачкой. Движение атомов приводит к доплеровскому и ударному уширению линии поглощения, которое при определенных температурах и давлениях буферного газа становится сравнимо со сверхтонким расщеплением как возбужденного, так и основного состояний. Это определяет группу переходов, возбуждаемых лазером, и, следовательно, распределение населенностей в атомах. Рассматривается ситуация, когда столкновительное перемешивание спиновых состояний зеемановских и сверхтонких подуровней в возбужденном состоянии происходит быстрее всех других процессов, что имеет место при достаточно высоких давлениях буферного газа. Теоретически исследована область с отрицательной поляризацией, направленной противоположно моменту, передаваемому фотонами атому. Подробно анализируется возбуждение  $D_1$ - и  $D_2$ -линий щелочных атомов <sup>87</sup>Rb и <sup>133</sup>Cs, показано, что эффект сильнее проявляется в  $D_2$ -линии. Проанализировано влияние давления буферного газа и интенсивности излучения и определена область значений этих параметров, при которых данный эффект наиболее ярко выражен. Отмечено влияние эффекта на сдвиг линии магнитного резонанса в магнитометрических датчиках.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-29-10004).

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. S. Supek and C. J. Aine, *Magnetoencephalography*, Springer (2016).
- M. Hämäläinen, R. Hari, R. J. Ilmoniemi et al., Rev. Mod. Phys. 65, 413 (1993).
- V. K. Shah and R. T. Wakai, Phys. Med. Biol. 58, 22, 8153 (2013).
- A. E. Ossadtchi, N. K. Kulachenkov, D. S. Chuchelov et al., IEEE Proc. 2018, Int. Conf. Laser Optics (ICLO), St. Petersburg, 543 (2018).
- H. C. Davis, P. Ramesh, A. Bhatnagar et al., Nat. Commun. 9, 131 (2018).
- L. Parkkonen, R. J. Ilmoniemi, F.-H. Lin, and M. Espy, Magnetoencephalography (2014), pp. 941–972.

- A. Soheilian, M. Ranjbaran, and M. M. Tehranchi, Sci. Rep. 10, 1294 (2020).
- T. G. Walker and M. S. Larsen, Adv. Atom. Mol. Opt. Phys., Acad. Press 65, 373 (2016).
- А. К. Вершовский, Ю. А. Литманович, А. С. Пазгалёв, В. Г Пешехонов, Гироскопия и навигация 26(1), 55 (2018).
- К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, КЭ 49, 169 (2019).
- Е. Б. Александров, А. К. Вершовский, УФН 179, 605 (2009).
- D. Budker, W. Gawlik, D. F. Kimball et al., Rev. Mod. Phys. 74, 1153 (2002).
- 13. W. Happer, Rev. Mod. Phys. 44, 169 (1972).
- 14. J. Kitching, Appl. Phys. Rev. 5, 031302 (2018).
- V. Gerginov, S. Krzyzewski, and S. Knappe, J. Opt. Soc. Amer. B: Opt. Phys. 34, 1429 (2017).
- G. Bevilacqua, V. Biancalana, P. Chessa, and Y. Dancheva, Appl. Phys. B: Las. Opt. 122, 4 (2016).
- 17. D. Hunter, R. Jiménez-Martínez, J. Herbsommer et al., Opt. Express 26, 30523 (2018).
- **18**. A. Weis, G. Bison, and Z. D. Grujić, in *High Sensitivity Magnetometers* (2017), p. 361.
- J. C. Allred, R. N. Lyman, T. W. Kornack, and M. V. Romalis, Phys. Rev. Lett. 89, 138014 (2002).
- **20**. T. Scholtes, V. Schultze, R. IJsselsteijn et al., Rhys. Rev. A **84**, 043416 (2011).
- **21**. V. Schultze, T. Scholtes, R. IJsselsteijn, and H. Meyer, J. Opt. Soc. Amer. B: Opt. Phys. **32**, 730 (2015).
- **22**. T. Scholtes, S. Pustelny, S. Fritzsche et al., Rhys. Rev. A **94**, 013403 (2016).
- **23**. W. Chalupczak, R. M. Godun, P. Anielski et al., Phys. Rev. A **85**, 4 (2012).
- **24**. G. Yang, H. Zhang, X. Geng et al., Opt. Express **26**, 30313 (2018).
- **25**. Е. Н. Попов, В. А. Бобрикова, С. П. Воскобойников и др., Письма в ЖЭТФ **108**, 543 (2018).
- **26**. C. Cohen-Tannoudji, Comments Atom. Mol. Phys. **2**, 24 (1970).
- 27. F. Franz and J. Franz, Phys. Rev. 148, 82 (1966).
- A. Sieradzan and F. A. Franz, Phys. Rev. A 25, 2985 (1982).

- 29. Н. М. Померанцев, В. М. Рыжков, Г. В. Скроцкий, Физические основы квантовой магнитометрии, Наука, Москва (1972).
- Y. Chang, Y.-H. Guo, and J. Qin, Phys. Rev. A 99, 063411 (2019).
- **31**. I. M. Sokolov, D. V. Kupriyanov, and M. D. Havey, Opt. Comm. **243**, 165 (2004).
- A. S. Sheremet, L. V. Gerasimov, I. M. Sokolov et al., Phys. Rev. A 82, 033838 (2010).
- D. V. Kupriyanov, I. M. Sokolov, N. V. Larionov et al., Phys. Rev. A 69, 033801 (2004).

- **34**. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
- **35**. С. Г. Раутиан, ЖЭТФ **51**, 1176 (1966).
- 36. G. A. Pitz, A. J. Sandoval, T. B. Tafoya et al., J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 140, 18 (2014).
- W. Happer, Y-Y. Jau, and T. G. Walker, Optically Pumped Atoms (2010).
- **38**. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, Phys. Rev. A **91**, 053822 (2015).
- **39**. И. М. Соколов, Письма в ЖЭТФ **106**, 317 (2017).

### ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ РАЗНОСТИ ФАЗ КВАНТОВЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

#### А. В. Козловский\*

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

> Поступила в редакцию 19 июня 2020 г., после переработки 23 июля 2020 г. Принята к публикации 26 июля 2020 г.

Предложены квантовомеханические тригонометрические операторы разности фаз двух электромагнитных полей и исследованы их свойства. Эрмитовы операторы разности фаз полей определяются с помощью операторов интерференции двух полей, возникающей при их смешении на светоделителе. Проведено сравнение результатов расчетов для измеряемых средних величин и дисперсий (флуктуаций) тригонометрических функций операторов разности фаз, следующих из теории Пегга – Барнетта, с соответствующими величинами для предлагаемых операторов. Расчеты и сравнение проведены для фоковских, когерентных и сжатых квантовых состояний электромагнитных полей. Исследования выполнены для квантовых микроскопических полей со средними значениями чисел фотонов  $\hat{n} \sim 1$ , применяемых в настоящее время в области квантовых технологий. Количественное согласие двух различных теорий показано для фоковских и сжатых состояний полей, существенное количественное различие в предсказаниях теорий отмечается в случае когерентных состояний полей.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020048

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

С начала 60-х годов прошлого века рядом авторов предложено несколько подходов к теоретическому определению эрмитовых квантовомеханических операторов фазы электромагнитного поля, а также тригонометрических операторов фазы поля и разности фаз двух полей. Хронологически первой попыткой определения эрмитовых тригонометрических операторов синуса и косинуса фазы электромагнитного поля является подход, предложенный Сасскиндом и Глоговером (SG) в работе [1]. Эрмитов оператор косинуса фазы в рамках теории SG в базисе фоковских состояний поля  $|n\rangle$  может быть записан в следующем виде [2,3]:

$$(\hat{\cos}\phi)_{SG} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n+1| + \text{H.c.}}{2},$$

а эрмитов оператор синуса:

$$\left(\hat{\sin \phi}\right)_{SG} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n+1| - \text{H.c.}}{2i}.$$

Теория SG обладает серьезным недостатком: операторы SG в общем случае не удовлетворяют основному соотношению тригонометрии для операторов синуса и косинуса, т. е.

$$(\hat{\cos}\phi)_{SG}^2 + (\hat{\sin}\phi)_{SG}^2 = \hat{1} - |0\rangle\langle 0|/2 \neq \hat{1}.$$

Вследствие этого, вычисления средних наблюдаемых величин (средних значений и флуктуаций операторов) для физических квантовых состояний поля являются некорректными в квантовой области микроскопических электромагнитных полей при  $\langle \hat{n} \rangle \sim 1.$ 

Другое определение квантовомеханических операторов косинуса и синуса фазы предложено в работах Лернера и Линча (LL) [4–6] с использованием операторов квадратур электромагнитного поля

$$\hat{X}_c \equiv \frac{\hat{a}^+ + \hat{a}}{2}, \quad \hat{X}_s \equiv \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{2i}.$$

Эрмитовы операторы косинуса и синуса фазы в теории LL рассматриваются в виде

$$(\hat{\cos}\phi)_{LL} = \frac{1}{2} \left[ (\hat{n}+1/2)^{-1/2} \hat{X}_c + \hat{X}_c (\hat{n}+1/2)^{-1/2} \right]$$

<sup>\*</sup> E-mail: kozlovskiyav@.lebedev.ru

$$\begin{split} \left( \hat{\sin} \phi \right)_{LL} &= \\ &= \frac{1}{2i} \left[ \left( \hat{n} + 1/2 \right)^{-1/2} \hat{X}_s - \hat{X}_s \left( \hat{n} + 1/2 \right)^{-1/2} \right], \end{split}$$

где  $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$  — оператор числа фотонов.

В теории LL операторы синуса и косинуса фазы, так же как и в теории SG, не удовлетворяют основному соотношению тригонометрии, что приводит к некорректному описанию фазовых свойств электромагнитного поля в квантовой области при  $\langle \hat{n} \rangle \sim 1$ .

Из отмеченного выше следует, что ввиду нарушения основного тригонометрического соотношения, использование тригонометрических операторов фазы и разностей фаз в теориях SG и LL приводит к значительной погрешности при расчетах средних значений и флуктуаций этих величин в квантовой области малых значений числа фотонов поля. Нарушение основного тригонометрического соотношения также приводит к невозможности использования стандартных тригонометрических формул для расчетов тригонометрических операторов сумм и разностей фаз (относительной фазы) двух полей  $\phi_1$ и  $\phi_2$ , представляющих собой основные измеряемые величины в оптических экспериментах с электромагнитными полями. Это означает, например, что в теориях SG и LL:

$$\hat{\cos} \phi_1 \hat{\cos} \phi_2 + \hat{\sin} \phi_1 \hat{\sin} \phi_2 \neq \hat{\cos} (\phi_1 - \phi_2)$$

И

$$\hat{\sin} \phi_1 \hat{\cos} \phi_2 - \hat{\cos} \phi_1 \hat{\sin} \phi_2 \neq \hat{\sin} (\phi_1 - \phi_2).$$

В работах [7,8] Пеггом и Барнеттом (РВ) предложен эрмитов оператор фазы электромагнитного поля  $\hat{\varphi}_{\theta}$  и найден полный ортонормированный базис собственных состояний оператора фазы. В рамках такой теории для определения оператора фазы и полного ортонормированного базиса собственных векторов оператора фазы использован конечномерный базис фоковских состояний  $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |S\rangle$ ,  $S\gg 1$ . Предельный переход  $S\to\infty$  проводится в теории после вычислений средних в (S+1)-мерном базисе фоковских состояний.

Теория РВ позволяет записать эрмитовы операторы косинуса и синуса фазы поля следующим образом [7–15]:

$$\cos \hat{\varphi}_{PB} = \frac{1}{2} \left[ \left( \sum_{n=0}^{S-1} |n\rangle \langle n+1| + |S\rangle \langle 0| \right) + \text{H.c.} \right]$$

И

$$\sin \hat{\varphi}_{PB} = \frac{1}{2i} \left[ \left( \sum_{n=0}^{S-1} |n\rangle \langle n+1| + |S\rangle \langle 0| \right) - \text{H.c.} \right].$$

Тригонометрические операторы, определяемые в таком виде, обладают всеми необходимыми свойствами наблюдаемых физических величин, в частности, для них выполняется

$$\cos^2 \hat{\varphi}_{PB} + \sin^2 \hat{\varphi}_{PB} = \hat{1}.$$

В представляемой работе рассмотрены тригонометрические операторы разности фаз двух полей, выражаемые через интерференционные операторы, содержащиеся в выражениях для чисел фотонов выходных электромагнитных полей светоделителя при смешении двух электромагнитных полей, поступающих на входы светоделителя. Показано, что тригонометрические операторы косинуса и синуса разности фаз (ТОРФ), определяемые таким образом, удовлетворяют основному соотношению тригонометрии и могут быть использованы для исследований квантово-статистических свойств фаз электромагнитных полей. Сравнение с теорией РВ показало, что предлагаемый подход к определению ТОРФ позволяет получить результаты для средних наблюдаемых величин и дисперсий (флуктуаций) ТОРФ, незначительно отличающиеся от результатов теории эрмитового оператора фазы РВ для фоковских и сжатых когерентных состояний полей и заметно отличающиеся для когерентных состояний полей.

#### 2. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ОПЕРАТОРЫ СВЕТОДЕЛИТЕЛЯ И ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ РАЗНОСТИ ФАЗ ДВУХ ПОЛЕЙ

Сигнал электромагнитного поля на выходе оптического интерферометра чувствителен к сдвигу фаз полей, поступающих на его входы. Простейшим примером оптического интерферометра является пассивный светоделитель. Рассмотрим квантовую теорию пассивного светоделителя. На два входа светоделителя поступают квантовые поля, характеризующиеся операторами рождения (уничтожения)  $\hat{a}_1^{\dagger}$  ( $\hat{a}_1$ ) и  $\hat{a}_2^{\dagger}$  ( $\hat{a}_2$ ), а также операторами числа фотонов  $\hat{n}_j = \hat{a}_j^{\dagger}\hat{a}_j, \ j=1,2$ . Операторы рождения (уничтожения) для полей, выходящих из светоделителя, при этом обозначим как  $\hat{b}_1^{\dagger}$  ( $\hat{b}_1$ ) и  $\hat{b}_2^{\dagger}$  ( $\hat{b}_2$ ), а операторы чисел фотонов:  $\hat{N}_j = \hat{b}_j^{\dagger}\hat{b}_j, \ j=1,2$ . Операторы входного и выходного полей удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\[\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}\] = \delta_{i,j}, \quad \left[\hat{b}_i, \hat{b}_j^{\dagger}\right] = \delta_{i,j}, \quad i, j = 1, 2, \qquad (1)$$

и для чисел фотонов (интенсивностей) полей входящих и выходящих полей светоделителя выполняется соотношение сохранения числа фотонов

$$\hat{N}_1 + \hat{N}_2 = \hat{n}_1 + \hat{n}_2. \tag{2}$$

Операторы чисел фотонов выходных полей при выполнении условий (1) и (2) могут быть выражены с помощью операторов входных полей с использованием коэффициента пропускания светоделителя  $\tau$  и сдвигов фаз прохождения и отражения ( $\phi_{\tau}$  и  $\phi_{\rho}$ ) в следующем виде [16–18]:

$$\hat{N}_1 = \tau \,\hat{n}_1 + (1 - \tau) \,\hat{n}_2 + \sqrt{\tau \,(1 - \tau)} \,\hat{\mathbf{I}},\tag{3}$$

$$\hat{N}_2 = (1 - \tau) \, \hat{n}_1 + \tau \, \hat{n}_2 - \sqrt{\tau \, (1 - \tau)} \, \hat{\mathbf{I}}, \tag{4}$$

где использовано обозначение

$$\hat{\mathbf{I}} \equiv \hat{a}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{2} e^{-i(\phi_{\tau} - \phi_{\rho})} + \hat{a}_{2}^{\dagger} \hat{a}_{1} e^{i(\phi_{\tau} - \phi_{\rho})} =$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \cos \left( \phi_{\tau} - \phi_{\rho} \right) \hat{I}_{C} + \sin \left( \phi_{\tau} - \phi_{\rho} \right) \hat{I}_{S} \right]. \quad (5)$$

Оператор Î представляет собой интерференционный оператор светоделителя и определяет процесс интерференции при смешении двух входных полей на выходе пассивного светоделителя. Для светоделетеля, обладающего величиной разности сдвигов фаз пропускания и отражения  $\phi_{\tau} - \phi_{\rho} = 0$ , на его выходе реализуется интерференционный член вида

$$\hat{I}_C \equiv \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 + \hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1, \tag{6}$$

а в случае  $\phi_{\tau} - \phi_{\rho} = \pi/2$  получаем

$$\hat{I}_S \equiv i \left( \hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1 - \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 \right). \tag{7}$$

В частном случае симметричного светоделителя,  $\tau=1/2$  и  $\phi_{\tau}-\phi_{\rho}{=}0$ , интерференционные биения выходного поля выражаются через операторы входных полей согласно

$$\hat{N}_2 - \hat{N}_1 = \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 + \hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1 = \hat{I}_C. \tag{8}$$

При добавлении в схему смешения полей с помощью симметричного светоделителя на одном из его входов  $\lambda/4$ -пластины интерференционный член приобретает вид

$$\hat{N}_2 - \hat{N}_1 = i \left( \hat{a}_2^{\dagger} \hat{a}_1 - \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 \right) = \hat{I}_S. \tag{9}$$

Формулы (8) и (9) получаются путем сложения соотношений (1) и (2) при  $\tau = 1/2$ .

Из равенств (8) и (9) следует, что средние от операторов  $\hat{I}_C$  и  $\hat{I}_S$  являются экспериментально измеримыми величинами и равны среднему от разности чисел фотонов на выходах светоделителя.

Среднее квантовомеханическое значение интерференционного оператора для полей в когерентных состояниях  $|\alpha_1=\sqrt{n_1}e^{i\varphi_1}\rangle$  и  $|\alpha_2=\sqrt{n_2}e^{i\varphi_2}\rangle$  есть

$$\left\langle \hat{I} \right\rangle_{\alpha_1, \alpha_2} \equiv \left\langle \alpha_1, \alpha_2 | \hat{I} | \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle =$$

$$= \sqrt{n_1 n_2} \cos \left( \varphi_1 - \varphi_2 + \phi_\tau - \phi_\rho \right), \quad (10)$$

и в зависимости от  $\phi_{\tau}-\phi_{\rho}$  величина (10) принимает значение пропорциональное косинусу (при  $\phi_{\tau}-\phi_{\rho}=0$ ) или синусу (при  $\phi_{\tau}-\phi_{\rho}=\pi/2$ ) разности фазовых углов когерентных состояний двух полей, подаваемых на входы светоделителя. Можно найти, также, среднее квантовомеханическое значение интерференционного оператора для полей в фоковских состояниях полей  $|n_1\rangle$  и  $|n_2\rangle$ . В этом случае находим

$$\left\langle \hat{I} \right\rangle_{n_1, n_2} \equiv \left\langle n_1, n_2 | \hat{I} | n_1, n_2 \right\rangle = 0,$$

что означает отсутствие интерференции на выходе светоделителя в случае фоковских состояний обоих полей, поступающих на входы светоделителя.

Запишем эрмитовы операторы косинуса и синуса разности фаз полей  $\hat{a}_1$  и  $\hat{a}_2$ , используя интерференционные операторы  $\hat{I}_C$  и  $\hat{I}_S$ , в следующем симметризованном виде:

$$\hat{C}_I \equiv \hat{\cos}(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[ \hat{K}_I \hat{I}_C + \hat{I}_C \hat{K}_I \right],$$
 (11a)

$$\hat{S}_I \equiv \hat{\sin}(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[ \hat{K}_I \hat{I}_S + \hat{I}_S \hat{K}_I \right],$$
 (11b)

где

$$\hat{K}_{I} \equiv \frac{1}{\sqrt{\hat{I}_{C}^{2} + \hat{I}_{S}^{2}}} = \frac{1}{\sqrt{2(\hat{n}_{1} + \hat{n}_{2} + 2\hat{n}_{1}\hat{n}_{2})}}, \quad (12)$$

поскольку

$$\hat{I}_C^2 + \hat{I}_S^2 = 2 \left( \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + 2 \, \hat{n}_1 \hat{n}_2 \right).$$

Можно показать, что операторы  $\hat{C}_I$  и  $\hat{S}_I$ , определяемые согласно (11a), (11b), (12), не коммутируют между собой:

$$\left[\hat{C}_I,\hat{S}_I\right] \neq 0.$$

Операторы квадрата косинуса и синуса разности фаз полей, выражаемые через операторы интерференции, запишем также в симметризованном виде согласно

$$\hat{C}_I^2 \equiv \hat{\cos}^2(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[ \hat{K}_I^2 \, \hat{I}_C^2 + \hat{I}_C^2 \, \hat{K}_I^2 \right],$$
 (13a)

$$\hat{S}_I^2 \equiv \hat{\sin}^2(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2} \left[ \hat{K}_I^2 \, \hat{I}_S^2 + \hat{I}_S^2 \, \hat{K}_I^2 \right]. \tag{13b}$$

Нетрудно убедиться, что определенные таким образом операторы квадратов тригонометрических функций точно удовлетворяют основному тригонометрическому соотношению, т. е.

$$\hat{C}_I^2 + \hat{S}_I^2 = \hat{1}.$$

Выполнение этого соотношение обеспечивается выбором вида нормировочного оператора  $\hat{K}_I$  согласно формуле (12).

Отметим, что операторы, определяемые формулами (11a) и (11b), возведенными в квадрат, не удовлетворяют основному тригонометрическому соотношению в квантовом режиме слабых полей.

#### 3. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ И ДИСПЕРСИИ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ДВУХ ПОЛЕЙ В ФОКОВСКИХ И КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЯХ

В классической теории светоделителя интерференционные члены, определяющие интенсивности полей, выходящих из светоделителя, пропорциональны тригонометрическим функциям разности фаз полей, поступающих на входы светоделителя. Как следует из формулы (10) квантовой теории, в частном случае входных полей в когерентных квантовых состояниях квантовомеханические средние значения интерференционных операторов также пропорциональны тригонометрическим функциям разности фазовых углов комплексных параметров когерентных полей. Учитывая сказанное выше, на основе принципа соответствия в предыдущем разделе нами определены эрмитовы операторы косинуса и синуса фаз, выражаемые с помощью интерференционных операторов, а также операторы квадратов косинуса и синуса разности фаз. В настоящем разделе нами найдены выражения для наблюдаемых средних таких ТОРФ, а также средних квадратов и дисперсий (флуктуаций) ТОРФ для полей в произвольных квантовых состояниях. Рассмотрены значения этих величин для фоковских и когерентных состояний полей в квантовом режиме.

Операторы косинуса и синуса (11a) и (11b) в базисе фоковских квантовых состояний входных полей могут быть записаны в виде

$$\hat{C}_{I} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{1}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 1\rangle\langle n_{1} + 1, n_{2}| + \text{H.c.}), \quad (14a)$$

$$\hat{S}_{I} = \frac{i}{2} \sum_{n=0}^{\infty} K_{1}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 1\rangle \langle n_{1} + 1, n_{2}| - \text{H.c.}), \quad (14b)$$

где обозначено

$$K_{1}(n_{1}, n_{2}) \equiv \sqrt{\frac{(n_{1}+1)(n_{2}+1)}{2}} \times \left[ \frac{1}{\sqrt{n_{1}+n_{2}+1+2 n_{1}(n_{2}+1)}} + \frac{1}{\sqrt{n_{1}+n_{2}+1+2 n_{2}(n_{1}+1)}} \right]. \quad (15)$$

Для операторов квадратов тригонометрических функций разности фаз, в свою очередь, с помощью (14a), (14b), (15) находим в базисе фоковских состояний следующие выражения:

$$\hat{C}_{I}^{2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} K_{2}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 2\rangle\langle n_{1} + 2, n_{2}| + \text{H.c.}), \quad (16a)$$

$$\hat{S}_{I}^{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} K_{2}(n_{1}, n_{2}) \times (|n_{1}, n_{2} + 2\rangle\langle n_{1} + 2, n_{2}| + \text{H.c.}), \quad (16b)$$

где обозначено

$$K_{2}(n_{1}, n_{2}) \equiv \sqrt{(n_{1}+1)(n_{1}+2)(n_{2}+1)(n_{2}+2)} \times \left[ \frac{1}{n_{1}+n_{2}+2+2 n_{1}(n_{2}+2)} + \frac{1}{n_{1}+n_{2}+2+2 n_{2}(n_{1}+2)} \right]. \quad (17)$$

Средние значения и средние тригонометрических операторов для полей в произвольных квантовых состояниях входных полей  $|x_1\rangle$  и  $|x_2\rangle$ , с помощью формул (14a), (14b), (15) могут быть найдены в виде

$$\left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \left\langle x_{1}, x_{2} | \hat{C}_{I} | x_{1}, x_{2} \right\rangle =$$

$$= \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{1} \left( n_{1}, n_{2} \right) \times$$

$$\times \operatorname{Re} \left( \left\langle x_{1} | n_{1} \right\rangle \left\langle n_{2} | x_{2} \right\rangle \left\langle x_{2} | n_{2}+1 \right\rangle \left\langle n_{1}+1 | x_{1} \right\rangle \right), \quad (18a)$$

$$\left\langle \hat{S}_{I} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \left\langle x_{1}, x_{2} | \hat{S}_{I} | x_{1}, x_{2} \right\rangle =$$

$$= \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{1} \left( n_{1}, n_{2} \right) \times$$

$$\times \operatorname{Im} \left( \left\langle x_{1} | n_{1} \right\rangle \left\langle n_{2} | x_{2} \right\rangle \left\langle x_{2} | n_{2}+1 \right\rangle \left\langle n_{1}+1 | x_{1} \right\rangle \right), \quad (18b)$$

а также, используя (16a), (16b), (17) для квадратов операторов, получаем

$$\left\langle \hat{C}_{I}^{2} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} \equiv \left\langle x_{1}, x_{2} \middle| \hat{C}_{I}^{2} \middle| x_{1}, x_{2} \right\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \times \times \sum_{n_{1},n_{2}=0}^{\infty} K_{2} \left( n_{1}, n_{2} \right) \times \times \operatorname{Re} \left( \left\langle x_{1} \middle| n_{1} \right\rangle \left\langle n_{2} \middle| x_{2} \right\rangle \left\langle x_{2} \middle| n_{2} + 2 \right\rangle \left\langle n_{1} + 2 \middle| x_{1} \right\rangle \right), \quad (19a)$$

$$\left\langle \hat{S}_{I}^{2}\right\rangle _{x_{1},x_{2}}\equiv\left\langle x_{1},x_{2}|\hat{S}_{I}^{2}|x_{1},x_{2}\right\rangle =\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\times\\ \times\sum_{n=0}^{\infty}K_{2}\left(n_{1},n_{2}\right)\times$$

$$\times \operatorname{Re}\left(\langle x_1 | n_1 \rangle \langle n_2 | x_2 \rangle \langle x_2 | n_2 + 2 \rangle \langle n_1 + 2 | x_1 \rangle\right).$$
 (19b)

Скалярные произведения векторов состояний полей, входящие в формулы (18a), (18b), (19a), (19b), для случая когерентных состояний полей  $|x_1\rangle=|\alpha_1\rangle$  и  $|x_2\rangle=|\alpha_2\rangle$  могут быть записаны в виде

$$\langle n_j | \alpha_j \rangle = e^{-n_{\alpha_j}/2} \frac{n_{\alpha_j}^{n_j/2}}{\sqrt{n_j!}} e^{i n_j \varphi_{\alpha_j}}, \quad \alpha_j = \sqrt{n_{\alpha_j}} e^{i \varphi_{\alpha_j}},$$

$$j = 1, 2.$$

Нетрудно убедиться, что в случае фоковских состояний полей  $|x_1\rangle=|n_1\rangle$  и  $|x_2\rangle=|n_2\rangle$  средние значения операторов

$$\langle n_1,n_2|\hat{C}_I|n_1,n_2\rangle = \langle n_1,n_2|\hat{S}_I|n_1,n_2\rangle = 0,$$

что соответствует равномерному распределению значений фаз полей от 0 до  $2\pi$ .

Для дисперсий операторов косинуса и синуса в этом случае находим

$$\begin{split} \langle n_1, n_2 | \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 | n_1, n_2 \rangle &\equiv \langle n_1, n_2 | \hat{C}_I^2 | n_1, n_2 \rangle - \\ &- \langle n_1, n_2 | \hat{C}_I | n_1, n_2 \rangle^2 = \frac{1}{2}, \quad (20a) \end{split}$$

$$\langle n_1, n_2 | \left( \Delta \hat{S}_I \right)^2 | n_1, n_2 \rangle \equiv \langle n_1, n_2 | \hat{S}_I^2 | n_1, n_2 \rangle -$$
$$- \langle n_1, n_2 | \hat{S}_I | n_1, n_2 \rangle^2 = \frac{1}{2}, \quad \forall | n_1 \rangle, | n_2 \rangle. \quad (20b)$$

Равенство дисперсий тригонометрических операторов 1/2 также указывает на равномерное распределение случайных фаз в случае фоковских состояний полей, т. е. полной их неопределенности в данных квантовых состояниях.

В целях сравнения результатов расчетов средних значений и дисперсий (флуктуаций), получаемых с использованием рассматриваемых нами интерференционных тригонометрических операторов, найдем выражения для этих величин в рамках теории эрмитового оператора фазы РВ для произвольных состояний полей. Используя тригонометрические равенства для косинусов и синусов разности фаз

$$\hat{C}_{PB, 12} = \hat{C}_{PB, 1}\hat{C}_{PB, 2} + \hat{S}_{PB, 1}\hat{S}_{PB, 2}, \qquad (21a)$$

$$\hat{S}_{PB, 12} = \hat{S}_{PB, 1} \hat{C}_{PB, 2} - \hat{S}_{PB, 2} \hat{C}_{PB, 1},$$
 (21b)

найдем среднее значения косинуса разности эрмитовых операторов фазы PB для произвольных квантовых состояний двух полей  $|x_1\rangle$ и  $|x_2\rangle$ :

$$\langle \hat{C}_{PB,12} \rangle_{x_1,x_2} \equiv \langle x_1, x_2 | \cos(\hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2}) | x_1, x_2 \rangle.$$

Отметим, что операторы косинуса и синуса в теории PB коммутируют между собой:

$$\left[\hat{C}_{PB, i}, \hat{S}_{PB, j}\right] = 0, \quad i, j = 1, 2.$$

Поскольку

$$\left\langle \hat{C}_{PB,j} \right\rangle_{x_j} = \operatorname{Re} \sum_{n_j=0}^{\infty} \left\langle x_j | n_j \right\rangle \times \left\langle n_j + 1 | x_j \right\rangle, \quad j = 1, 2, \quad (22a)$$

$$\left\langle \hat{S}_{PB,j} \right\rangle_{x_j} = \operatorname{Im} \sum_{n_j=0}^{\infty} \left\langle x_j | n_j \right\rangle \left\langle n_j + 1 | x_j \right\rangle, \quad (22b)$$

получаем для среднего оператора косинуса разности фаз теории PB следующее:

$$\left\langle \hat{C}_{PB, 12} \right\rangle_{x_1, x_2} = \sum_{n_1, n_2 = 0}^{\infty} \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \times \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left[ \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \left\langle x_1 | x_1 \right\rangle \right] \right] + \left$$

$$\times \operatorname{Re}\left(\langle x_{2}|n_{2}\rangle\langle n_{2}+1|x_{2}\rangle\right) + \operatorname{Im}\left(\langle x_{1}|n_{1}\rangle\langle n_{1}+1|x_{1}\rangle\right) \times \\ \times \operatorname{Im}\left(\langle x_{2}|n_{2}\rangle\langle n_{2}+1|x_{2}\rangle\right)\right]. \quad (23)$$

Для среднего от квадрата косинуса разности операторов фаз полей в произвольных квантовых состояниях  $|x_1\rangle,\ |x_2\rangle$  вида

$$\left\langle \hat{C}^2{}_{PB,12} \right\rangle_{x_1,x_2} \equiv \left\langle x_1,x_2 \right| \cos^2\left(\hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2}\right) \left| x_1,x_2 \right\rangle$$
 находим

$$\left\langle \hat{C}^{2}{}_{PB,12} \right\rangle_{x_{1},x_{2}} = \left\langle \hat{C}^{2}{}_{PB,1} \right\rangle_{x_{1}} \left\langle \hat{C}^{2}{}_{PB,2} \right\rangle_{x_{2}} + 
+ 2 \left\langle \hat{C}{}_{PB,1} \hat{S}{}_{PB,1} \right\rangle_{x_{1}} \left\langle \hat{C}{}_{PB,2} \hat{S}{}_{PB,2} \right\rangle_{x_{2}} + 
+ \left\langle \hat{S}^{2}{}_{PB,1} \right\rangle_{x_{1}} \left\langle \hat{S}^{2}{}_{PB,2} \right\rangle_{x_{2}}. (24)$$

Поскольку

$$\begin{split} \left\langle \hat{C}^2{}_{PB,j} \right\rangle_{x_j} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{Re} \sum_{n_j=0}^{\infty} \left\langle x_j | \; n_j \right\rangle \; \times \\ &\quad \times \left\langle n_j + 2 \; | x_j \right\rangle, \quad j = 1, 2, \quad (25) \end{split}$$

$$\left\langle \hat{S}^{2}_{PB,j} \right\rangle_{x_{j}} = \frac{1}{2} - \operatorname{Re} \sum_{n_{j}=0}^{\infty} \left\langle x_{j} | n_{j} \right\rangle \left\langle n_{j} + 2 | x_{j} \right\rangle,$$
 (26)

$$\left\langle \hat{C}_{PB,j} \hat{S}_{PB,j} \right\rangle_{x_j} =$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \sum_{n_j=0}^{\infty} \left\langle x_j | n_j \right\rangle \left\langle n_j + 2 | x_j \right\rangle, \quad (27)$$

получаем из формулы (24) следующее выражение:

$$\left\langle \hat{C}^2_{PB} \right\rangle_{x_1, x_2} = \frac{1}{2} \left( 1 + R_1 R_2 + I_1 I_2 \right), \quad (28)$$

где обозначено

$$R_{j} \equiv \operatorname{Re} \sum_{n_{j}=0}^{\infty} \langle x_{j} | n_{j} \rangle \langle n_{j} + 2 | x_{j} \rangle,$$

$$I_j \equiv \operatorname{Im} \sum_{n_j=0}^{\infty} \langle x_j | n_j \rangle \langle n_j + 2 | x_j \rangle, \quad j = 1, 2.$$

Подобным образом находим средние и дисперсии оператора синуса разности операторов фазы в теории PB:

$$\left\langle \hat{S}_{PB} \right\rangle_{x_1, x_2} = \sum_{n_1, n_2 = 0}^{\infty} \left[ \operatorname{Im} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \times \operatorname{Re} \left( \left\langle x_2 | n_2 \right\rangle \left\langle n_2 + 1 | x_2 \right\rangle \right) - \operatorname{Re} \left( \left\langle x_1 | n_1 \right\rangle \left\langle n_1 + 1 | x_1 \right\rangle \right) \times \operatorname{Im} \left( \left\langle x_2 | n_2 \right\rangle \left\langle n_2 + 1 | x_2 \right\rangle \right) \right], \quad (29)$$

$$\left\langle \hat{S}^2_{PB} \right\rangle_{x_1, x_2} = \frac{1}{2} \left( 1 - R_1 R_2 - I_1 I_2 \right).$$
 (30)

В случае полей в когерентных состояниях

$$|\alpha_j\rangle = \left|\sqrt{n_{\alpha_j}}e^{i\varphi_{\alpha_j}}\right\rangle, \quad j = 1, 2$$

можно получить следующие выражения для средних значений тригонометрических функций разностей операторов фаз полей. Для косинуса разности фаз получаем

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} = \sqrt{n_{\alpha_1} n_{\alpha_2}} e^{-\left(n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2}\right)} \times \times f_1\left(n_{\alpha_1}\right) f_1\left(n_{\alpha_2}\right) \cos\left(\varphi_{\alpha_1} - \varphi_{\alpha_2}\right).$$
(31)

Для дисперсии косинуса разности фаз находим

$$\left\langle \left(\Delta \hat{C}_{PB}\right)^{2}\right\rangle_{\alpha_{1},\alpha_{2}} \equiv$$

$$\equiv \left\langle \alpha_{1},\alpha_{2} \right| \cos^{2}\left(\hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2}\right) \left|\alpha_{1},\alpha_{2}\right\rangle -$$

$$-\left\langle \alpha_{1},\alpha_{2} \right| \cos\left(\hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2}\right) \left|\alpha_{1},\alpha_{2}\right\rangle^{2} =$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ 1 + n_{\alpha_{1}} n_{\alpha_{2}} e^{-\left(n_{\alpha_{1}} + n_{\alpha_{2}}\right)} \left[f_{2}\left(n_{\alpha_{1}}\right) f_{2}\left(n_{\alpha_{2}}\right) \times\right] \right\} \times \cos\left[2\left(\varphi_{\alpha_{1}} - \varphi_{\alpha_{2}}\right)\right] - 2f_{1}^{2}\left(n_{\alpha_{1}}\right) f_{1}^{2}\left(n_{\alpha_{2}}\right) \times$$

$$\times e^{-\left(n_{\alpha_{1}} + n_{\alpha_{2}}\right)} \cos^{2}\left(\varphi_{\alpha_{1}} - \varphi_{\alpha_{2}}\right)\right] \right\}. (32)$$

В формулах (31) и (32) использованы обозначения

$$f_1\left(n_{\alpha_j}\right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n_{\alpha_j}^n}{n!\sqrt{n+1}},$$

$$f_2\left(n_{\alpha_j}\right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n_{\alpha_j}^n}{n!\sqrt{(n+1)(n+2)}}, \quad j = 1, 2.$$
(33)

Функции  $f_1$  и  $f_2$  с ростом величин чисел фотонов когерентных состояний  $n_{\alpha_j} = \left|\alpha_j\right|^2, j=1,2$  стремятся к следующим значениям [3,18]:

$$f_{1}\left(n_{\alpha_{j}}\right) \to \frac{e^{n_{\alpha_{j}}}}{\sqrt{n_{\alpha_{j}}}},$$

$$f_{2}\left(n_{\alpha_{j}}\right) \to \frac{e^{n_{\alpha_{j}}}}{n_{\alpha_{j}}}, \quad n_{\alpha_{j}} \to \infty.$$

$$(34)$$

Формулы (31) и (32) показывают, что среднее и дисперсия косинуса разности фаз явно зависят от разности фаз когерентных состояний  $\varphi_{\alpha_1}$ и  $\varphi_{\alpha_1}$ , по крайней мере, при  $n_{\alpha_j} \sim 1$ . Зависимость от разности фаз когерентных состояний средних и дисперсий  $\varphi_{\alpha_1} - \varphi_{\alpha_2}$  отсутствует лишь при  $n_{\alpha_j} \to \infty$ .

На рис. 1a показана зависимость среднего значения интерференционного оператора косинуса разности фаз полей в когерентных состояниях

$$\left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{\alpha_{1},\alpha_{2}} \equiv \left\langle \alpha_{1}, \alpha_{2} \right| c \hat{o} s \left( \varphi_{1} - \varphi_{2} \right) \left| \alpha_{1}, \alpha_{2} \right\rangle$$

от значений параметров  $n_{\alpha_2}$ и  $\varphi_{\alpha_2}$  состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров состояния  $|\alpha_1\rangle$ , полученная с помощью формулы (18а). В целях сравнения нами рассчитана аналогичная зависимость для среднего значения косинуса разности операторов фаз полей, следующая из теории PB:

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} \equiv \left\langle \alpha_1,\alpha_2 \right| \cos \left( \hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2} \right) |\alpha_1,\alpha_2\rangle,$$

найденная с помощью формулы (31). На рис. 1*6* показана зависимость отношения средних

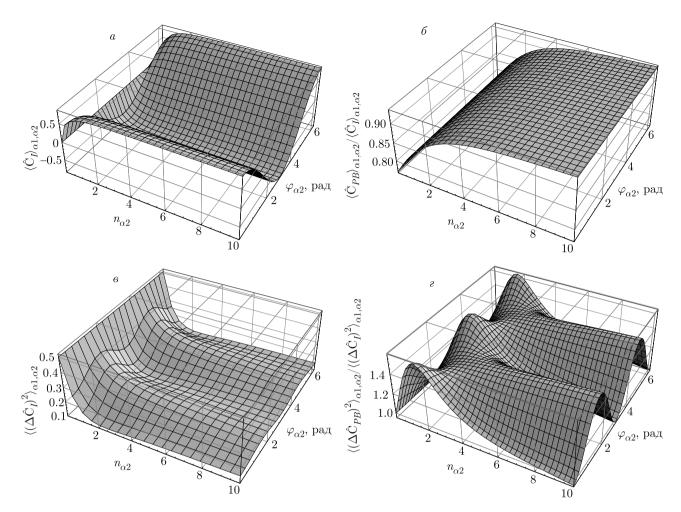


Рис. 1. a) Зависимость среднего значения оператора косинуса разности фаз  $\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}$  для когерентных состояний полей  $|\alpha_1\rangle$  и  $|\alpha_2\rangle$  от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированных значениях  $n_{\alpha_1}=1$  и  $\varphi_{\alpha_1}=0$  когерентного состояния  $|\alpha_1\rangle$ .  $\delta$ ) Отношение средних значений оператора косинуса разности фаз в рамках теории PB и средних интерференционного оператора косинуса разности фаз  $\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}/\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}$  для полей в когерентных состояниях.  $\epsilon$ 0) Зависимость дисперсии оператора разности фаз  $\left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2 \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}$  для когерентных состояний полей  $|\alpha_1\rangle$  и  $|\alpha_2\rangle$ , от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  для фиксированных значений  $n_{\alpha_1}=1$  и  $\varphi_{\alpha_1}=0$ .  $\epsilon$ 2) Зависимость отношения  $\left\langle \left(\Delta \hat{C}_{PB}\right)^2 \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}/\left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2 \right\rangle_{\alpha 1,\alpha 2}$  значений дисперсии косинуса разности операторов фаз в рамках теории PB и дисперсии интерференционного оператора разности фаз для полей в когерентных состояниях от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$ . Значения параметров  $n_{\alpha_1}=1$  и  $\varphi_{\alpha_1}=0$  когерентного состояния  $|\alpha_1\rangle$  фиксированы

 $\left<\hat{C}_{PB}\right>_{\alpha_1,\alpha_2}/\left<\hat{C}_I\right>_{\alpha_1,\alpha_2}$ от параметров когерентных состояний. Как видно на рисунке, результаты двух теорий существенно различаются в квантовой области малых значений средних чисел фотонов полей  $n_{\alpha_j}\sim 1,\ j=1,2.$  Максимальное различие для наблюдаемых средних тригонометрических операторов может достигать для рассматриваемых квантовых состояний полей величины примерно  $25\,\%$  для значений параметра  $n_{\alpha_2}\ll 1.$  С ростом

значений параметра  $n_{\alpha_2}\gg 1$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированном значении  $n_{\alpha_1}=1$  различие результатов двух теорий уменьшается и может достигать величины нескольких процентов. Полное совпадение двух теорий в рассматриваемом случае достигается при  $n_{\alpha_j}\gg 10,\ j=1,2.$ 

Дисперсии интерференционных ТОРФ и дисперсии косинуса разности операторов фаз теории PB, так же как и средние значения этих величин, замет-

но отличаются между собой. На рис. 16 показана зависимость дисперсии

$$\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{\alpha_1, \alpha_2} \equiv \left\langle \alpha_1, \alpha_2 \right| \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \left| \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle \equiv$$

$$\equiv \left\langle \alpha_1, \alpha_2 \right| \hat{C}_I^2 \left| \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle - \left\langle \alpha_1, \alpha_2 \right| \hat{C}_I \left| \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle^2$$

от значений параметров  $n_{\alpha_2}$ и  $\varphi_{\alpha_2}$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров состояния  $|\alpha_1\rangle$ , полученная с помощью формул (18a) и (19a). На рис. 1z приведена зависимость от тех же параметров отношения дисперсии оператора в теории РВ и интерференционного оператора:  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_{PB} \right)^2 \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} / \left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2}$ . На рисунке видно, что дисперсии значительно различаются в квантовой области  $n_{\alpha_j} \sim 1, \ j=1,2,$  где отличие может достигать величины примерно 60 % при определенных значениях фазового угла  $\varphi_{\alpha_2}$ . Точное совпадение двух теорий в случае полей в когерентных состояниях достигается при  $n_{\alpha_j} > 100, \ j=1,2.$ 

#### 4. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ И ДИСПЕРСИИ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ РАЗНОСТИ ФАЗ ПОЛЕЙ В СЖАТЫХ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЯХ

Рассмотрим случай, когда поля находятся в когерентных сжатых состояниях (двухфотоннных когерентных состояниях [13,19]), и найдем наблюдаемые средние значения и дисперсии  $\mathrm{TOP}\Phi$  для таких полей.

Векторы сжатых когерентных состояний полей представляют собой результат действия оператора сжатия на когерентное состояние поля и могут быть записаны в виде

$$|\zeta_j; \alpha_j\rangle = \hat{S}_j(\zeta_j) |\alpha_j\rangle, \quad j = 1, 2,$$
 (35)

где оператор сжатия есть

$$\hat{S}_{j}\left(\zeta_{j}\right) = \exp\frac{1}{2}\left(\zeta^{*} \ \hat{a}_{j}^{2} - \zeta \ \hat{a}_{j}^{\dagger 2}\right).$$

Входящие в оператор сжатия комплексные параметры сжатия имеют вид  $\zeta_j \equiv r_j \; e^{i \theta_j}$ .

Скалярное произведение фоковских и сжатых когерентных состояний могут быть записаны в следующем виде [19]:

$$\langle n_j | \zeta_j; \alpha_j \rangle = \sqrt{\left(\frac{\operatorname{th} r_j}{2} e^{i\theta_j}\right)^{n_j} / (n_j! \operatorname{ch} r_j)} \times \times \exp\left[-\frac{n_{\alpha_j}}{2} \left(1 - \frac{\operatorname{th} r_j}{2} e^{i\left(2\varphi_{\alpha_j} - \theta_j\right)}\right)\right] \times \times H_{n_j} \left(\sqrt{\frac{n_{\alpha_j}}{\operatorname{sh} 2r_j}} e^{i\left(2\varphi_{\alpha_j} - \theta_j\right)}\right),$$

$$\alpha_j = \sqrt{n_{\alpha_j}} e^{i\varphi_{\alpha_j}}, \quad j = 1, 2,$$
(36)

где  $H_{nj}$  — полином Эрмита  $n_j$ -го порядка.

Рассмотрим случай, когда одно из полей находится в сжатом когерентном состоянии  $|\zeta_1; \alpha_1\rangle$ , а второе поле — в когерентном состоянии  $|\alpha_2\rangle$ . Воспользуемся для расчета наблюдаемых средних ТОРФ таких полей формулами (18a), (18b) и соотношением (36). На рис. 2a показана зависимость среднего значения интерференционного оператора косинуса разности фаз для полей в сжатом и когерентном состояниях

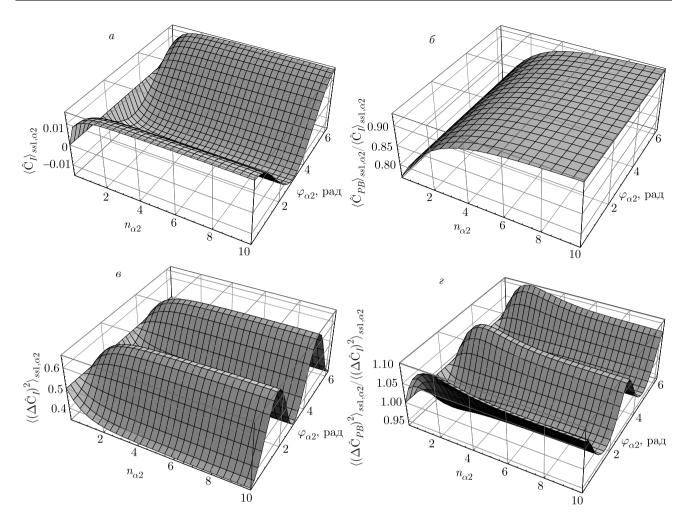
$$\left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{SSL\Omega_{2}} \equiv \left\langle \alpha_{1}; \varsigma_{1} | \left\langle \alpha_{2} | c\hat{o}s \left( \varphi_{1} - \varphi_{2} \right) | \alpha_{2} \right\rangle | \alpha_{1}; \varsigma_{1} \right\rangle$$

от значений параметров  $n_{\alpha_2}$ и  $\varphi_{\alpha_2}$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров сжатого состояния  $|\alpha_1;\varsigma_1\rangle; r_1, \; \theta_1, n_{\alpha_1}$  и  $\varphi_{\alpha_1}$ . Указанная зависимость найдена из формулы (18a) с использованием (36). В целях сравнения нами рассчитана аналогичная зависимость для среднего значения оператора косинуса разности операторов фаз полей, следующая из теории PB:

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss_1,\alpha_2} \equiv \left\langle \alpha_1; \varsigma_1 | \left\langle \alpha_2 | \cos \left( \hat{\varphi}_{PB,1} - \hat{\varphi}_{PB,2} \right) \right. \times \\ \left. \times \left| \alpha_2 \right\rangle | \alpha_1; \varsigma_1 \right\rangle,$$

полученная из формулы (31). На рис. 26зависимость показана отношения средних  $\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss1,\alpha 2} / \left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{ss1,\alpha 2}$  от параметров когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  для фиксированных значений параметров сжатого состояния  $|\alpha_1; \varsigma_1\rangle$ . Как видно на рисунке, результаты двух теорий заметно различаются в квантовой области малых значений чисел фотонов полей  $n_{\alpha_j} = |\alpha_j|^2 \sim 1, j = 1, 2$ . Максимальное различие в случае рассматриваемых квантовых состояний полей может достигать величины примерно  $25\,\%$  для значений параметра  $n_{\alpha_2}\,\ll\,1.$  С ростом параметра  $n_{\alpha_2}\gg 1$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированном значении  $n_{\alpha_1}=1$  различие результатов двух теорий уменьшается и может достигать величины нескольких процентов.

Полное совпадение двух теорий в рассматриваемом случае имеет место для мезоскопических квантовых полей при  $n_{\alpha_j}\gg 10,\, j=1,2.$ 



**Рис. 2.** a) Зависимость среднего значения оператора разности фаз  $\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  для сжатого состояния поля  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  и когерентного состояния поля  $|\alpha_2\rangle$  от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$ . Для фиксированных значений параметров  $n_{\alpha_1}=1,\ \varphi_{\alpha_1}=0,\ r_1=3,\ \theta_1=0$  сжатого состояния  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$ .  $\delta$ ) Отношение средних значений оператора разности фаз в рамках теории PB и средних оператора  $\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss1,\alpha2}/\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  для сжатом и когерентном состояниях.  $\epsilon$ ) Зависимость дисперсии интерференционного оператора разности фаз  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  для сжатого и когерентного состояний полей  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  и  $|\alpha_2\rangle$ , от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$  для фиксированных значений параметров  $n_{\alpha_1}=1,\ \varphi_{\alpha_1}=0,\ r_1=3,\ \theta_1=0$  сжатого состояния  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$ .  $\epsilon$ ) Зависимость отношения  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_{PB} \right)^2 \right\rangle_{ss1,\alpha2}/\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  значений дисперсии косинуса разности операторов фаз в рамках теории PB и дисперсии интерференционного оператора косинуса разности фаз для полей в сжатом и когерентном состояниях от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  когерентного состояния  $|\alpha_2\rangle$ . Значения параметров  $n_{\alpha_1}=1,\ \varphi_{\alpha_1}=0,\ r_1=3,\ \theta_1=0$  сжатого состояния  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  фиксированы

На рис. 26 показана зависимость дисперсии

$$\left\langle \left(\Delta \hat{C}_I\right)^2\right\rangle_{ss_1,\alpha_2} \equiv \langle\alpha_1;\varsigma_1|\langle\alpha_2|\left(\Delta \hat{C}_I\right)^2|\alpha_2\rangle|\alpha_1;\varsigma_1\rangle \equiv \\ \equiv \langle\alpha_1;\varsigma_1|\langle\alpha_2|\hat{C}_I^2|\alpha_2\rangle|\alpha_1;\varsigma_1\rangle - \langle\alpha_1;\varsigma_1|\langle\alpha_2|\hat{C}_I|\alpha_2\rangle|\alpha_1;\varsigma_1\rangle^2 \\ \text{от значений параметров } n_{\alpha_2}$$
и  $\varphi_{\alpha_2}$  состояния  $|\alpha_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров состоя-

ния  $|\alpha_1; \varsigma_1\rangle$ , полученная с помощью формул (26), (24) и (36). На рис. 2г приведена зависимость от тех же параметров отношения дисперсий оператора РВ и дисперсий интерференционного оператора:  $\langle (\Delta \hat{C}_{PB})^2 \rangle_{ss_1,\alpha_2} / \langle (\Delta \hat{C}_I)^2 \rangle_{ss_1,\alpha_2}$ . На рисунке видно, что дисперсии, получаемые в рамках двух теорий, незначительно различаются в квантовой облас-

ти  $n_{\alpha_j} \sim 1, \ j=1,2$ , где отличие не превышает  $15\,\%$  для всех значений фазового угла  $\varphi_{\alpha_2}$ . С ростом сжатия (параметр сжатия  $r_1>1$ ) это различие уменьшается. Практически точное совпадение дисперсий косинуса разности фаз двух теорий в случае полей в сжатом и когерентном состояниях достигается для любых  $n_{\alpha_j}, \ j=1,2$  при  $r_1>6$ , а также для любых  $r_1$  при  $n_{\alpha_i}>100, \ j=1,2$ .

Следовательно, в квантовом режиме микроскопических полей дисперсии ТОРФ полей в сжатом и когерентном состояниях, теории интерференционного оператора и теории РВ совпадают между собой в случае сильного сжатия, тогда как средние значения операторов разности фаз двух теории различаются между собой при  $n_{\alpha_j} \sim 1, j=1,2$  для любой степени сжатия.

Рассмотрим теперь наблюдаемые средние и дисперсии (флуктуации) ТОРФ двух полей в сжатых когерентных состояниях  $|\alpha_1;\varsigma_1\rangle$  и  $|\alpha_2;\varsigma_2\rangle$ . На рис. 3a изображен пример зависимости среднего значения

$$\begin{split} \left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{ss_{1}, ss_{2}} &\equiv \\ &\equiv \left\langle \alpha_{1}; \varsigma_{1} \middle| \left\langle \alpha_{2}; \varsigma_{2} \middle| c \hat{o} s \left( \varphi_{1} - \varphi_{2} \right) \middle| \alpha_{2}; \varsigma_{2} \right\rangle \middle| \alpha_{1}; \varsigma_{1} \right\rangle \end{split}$$

от параметров  $n_{\alpha_2}$  и  $\varphi_{\alpha_2}$  состояния  $|\alpha_2;\varsigma_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров этого состояния  $r_2$  и  $\theta_2$ , и фиксированных значениях всех параметров состояния  $|\alpha_1;\varsigma_1\rangle$ . Рисунок показывает, что для среднего косинуса разности фаз характерно значение  $\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{ss_1,ss_2} \approx 0$  при  $n_{\alpha_2}\gg 1,\, n_{\alpha_1}=1.$  Расчеты, проведенные нами, позволяют сделать общий вывод о том, что наблюдаемые средние ТОРФ полей в сжатых состояниях близки к нулю в случае  $n_{\alpha_1}\gg 1$  или  $n_{\alpha_2}\gg 1$  при  $r_j\gg 1,\, j=1,2,$  аналогично тому, как это имеет место в случае фоковских состояний полей.

Для сравнения нами найдены средние значения тригонометрических функций разности эрмитовых операторов фаз в теории PB для сжатых состояний полей:

$$\begin{split} \left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss_1, ss_2} &\equiv \left\langle \alpha_1; \varsigma_1 | \left\langle \alpha_2; \varsigma_2 \right| \times \right. \\ &\times \cos \left( \hat{\varphi}_{PB, 1} - \hat{\varphi}_{PB, 2} \right) | \alpha_2; \varsigma_2 \rangle | \alpha_1; \varsigma_1 \rangle. \end{split}$$

На рис.  $3 \delta$  показана зависимость отношения средних значений

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss1,ss2} / \left\langle \hat{C}_{I} \right\rangle_{ss1,ss2}$$

от параметров состояния  $|\alpha_2; \varsigma_2\rangle$  при фиксированных значениях параметров состояния  $|\alpha_1; \varsigma_1\rangle$ .

Дисперсия интерференционных операторов синуса и косинуса разности фаз полей в сжатых состояниях, так же как и в случае фоковских состояниях полей, близка к 1/2 в случае значительной величины сжатия  $r_j>1,\ j=1,2.$  На рис.  $3\epsilon$  изображен пример зависимости дисперсии

$$\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss_1, ss_2} \equiv$$

$$\equiv \left\langle \alpha_1; \varsigma_1 | \left\langle \alpha_2; \varsigma_2 | \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 | \alpha_2; \varsigma_2 \right\rangle | \alpha_1; \varsigma_1 \right\rangle$$

для тех же значений параметров квантовых состояний, что и на рис. 3a. Зависимость на рис. 3e показывает, что  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss_1,ss_2} \approx 1/2$  для всех значений  $n_j,\ j=1,2$  в квантовой области их изменения.

Отношение дисперсии косинуса разности операторов фаз в теории PB к соответствующей величине теории интерференционного оператора разности фаз, показано на рис. Зг. Как видно на рисунке, результаты двух теорий практически совпадают между собой для всех значений параметров квантовых состояний.

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что точное количественное согласие теории интерференционного ТОРФ и теории РВ имеет место для сжатых состояний полей при расчете дисперсий (флуктуаций) ТОРФ в квантовом режиме  $n_{\alpha_j} \sim 1, \ j=1,2$  для величин параметров сжатия полей  $r_j > 2, \ j=1,2$ . В то же время, отличие наблюдаемых средних значений ТОРФ в указанных условиях может составлять заметную величину порядка нескольких процентов даже при высокой степени сжатия. Результаты двух теорий для средних и дисперсий ТОРФ совпадают для  $n_{\alpha_j} > 100, \ j=1,2$  при любой степени сжатия.

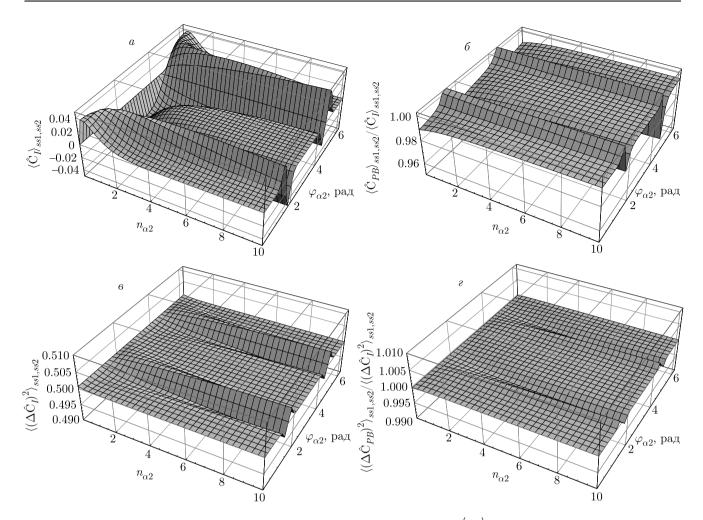
#### 5. ИЗМЕРЯЕМЫЕ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ ФАЗЫ ПОЛЯ

В работе [9] Пегт и Барнетт предположили, что измерение фазы соответствует следующему определению фазовых операторов:

$$(\hat{\cos}\phi)_{M} = k(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}),$$
  

$$(\hat{\sin}\phi)_{M} = ik(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a}),$$
(37)

где k — действительная величина, соответствующая квантовому состоянию поля, для которого проводится измерение. Авторы отмечали, что измерение средних наблюдаемых операторов, определяемых таким образом может проводиться методом оптического балансного гомодинирования. Отметим,



**Рис. 3.** a) Зависимость среднего значения оператора косинуса разности фаз  $\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  для сжатого состояния поля  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  и сжатого состояния поля  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$  от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  состояния  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$ . Значения параметров  $n_{\alpha_1}=1$ ,  $\varphi_{\alpha_1}=0$ ,  $r_1=2.8$ ,  $\theta_1=\pi/2$  состояния  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  и  $r_2=2.3$ ,  $\theta_2=\pi$  состояния  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$ , фиксированы.  $\delta$ ) Отношение средних значений оператора разности фаз в рамках теории PB и средних интерференционного оператора разности фаз  $\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{ss1,ss2}/\left\langle \hat{C}_I \right\rangle_{ss1,ss2}$  для полей в сжатых состояниях для тех же значений параметров, что и на рис. a. a0) Зависимость дисперсии интерференционного оператора косинуса разности фаз  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss1,\alpha2}$  для сжатых состояний полей  $|\alpha_1,\varsigma_1\rangle$  и  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$ , от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  состояния  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$  для тех же значений остальных параметров сжатых состояний. a2) Зависимость отношения  $\left\langle \left( \Delta \hat{C}_{PB} \right)^2 \right\rangle_{ss1,ss2}/\left\langle \left( \Delta \hat{C}_I \right)^2 \right\rangle_{ss1,ss2}$  значений дисперсии косинуса разности операторов фаз в рамках теории PB и дисперсии интерференционного оператора косинуса разности фаз для полей в сжатых состояниях, от средних значений числа фотонов  $n_2$  и фазового угла  $\varphi_2$  сжатого состояния  $|\alpha_2,\varsigma_2\rangle$  для тех же значений остальных параметров сжатых состояний

что в схеме оптического гомодинироваия операторы интерференции (7) и (8) сводятся к той или иной квадратуре измеряемого поля, в зависимости от фазы поля локального осциллятора, подаваемого на второй вход светоделителя. При этом поле локального осциллятора, смешиваемого с измеряемым сигналом, предполагается классическим.

В работе Линча [6] предложено использовать в качестве константы k в (50), для поля в любом квантовом состоянии величины

$$k_L = \frac{1}{\sqrt{\langle \hat{n} \rangle + 1/2}},\tag{38}$$

где  $\langle \hat{n} \rangle$  — среднее значение фотонов поля.

Нетрудно убедиться, что при таком выборе константы k в формулах для тригонометрических операторов фазы не выполняется основное тригонометрическое соотношение:

$$(\hat{\cos}\phi)_M^2 + (\hat{\sin}\phi)_M^2 = \frac{\hat{n}+1}{\langle \hat{n}\rangle + 1/2} \neq \hat{1}.$$
 (39)

Другой выбор константы, следующий из теории SG [1]:  $k_{SG} = 1/\sqrt{\langle \hat{n} \rangle + 1}$ , также не приводит к выполнению основного тригонометрического соотношения, однако, в этом случае оно выполняются для средних значений для любого квантового состояния поля. Отметим также, что измеряемые операторы фазы, следующие из теории Сасскинда – Глоговера [1–3] определяются неоднозначно, так, например,

$$(\hat{\cos}\phi)_{SG} = \left(\hat{a}\,\hat{n}^{-1/2} + \hat{n}^{-1/2}\,\hat{a}^{\dagger}\right)/2 =$$

$$= \left((\hat{n}+1)^{-1/2}\,\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\,(\hat{n}+1)^{-1/2}\right)/2 \quad (40)$$

при замене  $\hat{n} \to \langle \hat{n} \rangle$  в выражении (40) для оператора косинуса, приводящей операторы теории Сасскинда – Глоговера к виду измеряемых операторов (37), константы нормировки измеряемого оператора косинуса

$$(\hat{\cos}\phi)_{M,SG} = k_{SG} \left(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}\right)$$

принимают различные значения  $k_{SG,1}=1/2\sqrt{\langle n\rangle}$  или  $k_{SG,2}=1/2\sqrt{\langle n\rangle+1}$ , при этом  $k_{SG,1}$  не определена в случае  $\langle n\rangle=0$ .

Расчеты, использующие определение (37), (38) измеряемых операторов фазы поля, приведенные в статье [20], показывают, что дисперсии и наблюдаемые средние значения измеряемых тригонометрических операторов фазы качественно отличаются от результатов, следующих из теории эрмитова оператора фазы РВ [7,8].

В работах [21–23] в качестве измеряемых операторов разности фаз двух полей рассмотрены следующие операторы:

$$\hat{C}_{M, 12} = K\hat{I}_C, \quad \hat{S}_{M, 12} = K\hat{I}_S,$$
 (41)

где константа пропорциональности K выбрана в виде

$$K = \frac{1}{\sqrt{\left\langle \hat{I}_C^2 \right\rangle + \left\langle \hat{I}_S^2 \right\rangle}} = \frac{1}{\sqrt{2\left(\left\langle n_1 \right\rangle + \left\langle \hat{n}_2 \right\rangle + 2\left\langle \hat{n}_1 \right\rangle \left\langle \hat{n}_2 \right\rangle)}}.$$
 (42)

Используя такое определение ТОР $\Phi$ , нетрудно показать, что

$$\hat{C}_{M,12}^2 + \hat{S}_{M,12}^2 = \frac{\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + 2\hat{n}_1\hat{n}_2}{\langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle + 2\langle n_1 \rangle \langle n_2 \rangle} \neq \hat{1}, \quad (43)$$

т. е. для измеряемых операторов разности фаз, вводимых с помощью (41) и (42), не выполняется основное тригонометрическое соотношение, справедливым является лишь соотношение для средних квантовомеханических:

$$\left\langle \hat{C}_{M,12}^{2}\right\rangle +\ \left\langle \hat{S}_{M,12}^{2}\right\rangle =1.$$

В случае полей в когерентных состояниях

$$|\alpha_j\rangle = \left|\sqrt{n_{\alpha_j}}e^{i\varphi_{\alpha_j}}\right\rangle, \quad j = 1, 2$$

можно получить следующие выражения для средних значений измеряемых тригонометрических операторов:

$$\left\langle \hat{C}_{M,12} \right\rangle \equiv \left\langle \alpha_1, \alpha_2 | \hat{C}_{M,12} | \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{2 n_{\alpha_1} n_{\alpha_2}}{n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2} + 2 n_{\alpha_1} n_{\alpha_2}}} \cos \left( \varphi_{\alpha_1} - \varphi_{\alpha_2} \right), \quad (44a)$$

$$\begin{split} \left\langle \hat{S}_{M,12} \right\rangle &\equiv \left\langle \alpha_1, \alpha_2 \middle| \hat{S}_{M,12} \middle| \alpha_1, \alpha_2 \right\rangle = \\ &= \sqrt{\frac{2 \, n_{\alpha_1} n_{\alpha_2}}{n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2} + 2 \, n_{\alpha_1} n_{\alpha_2}}} \, \sin \left( \varphi_{\alpha_2} - \varphi_{\alpha_1} \right), \quad (44b) \end{split}$$

а для дисперсий операторов следующие выражения:

$$\begin{split} &\left\langle \left(\Delta \hat{C}_{M,12}\right)^{2}\right\rangle \equiv \\ &\equiv \left\langle \alpha_{1}, \alpha_{2} \right| \hat{C}_{M,12}^{2} |\alpha_{1}, \alpha_{2}\rangle - \left\langle \alpha_{1}, \alpha_{2} \right| \hat{C}_{M,12} |\alpha_{1}, \alpha_{2}\rangle^{2} = \\ &= \frac{n_{\alpha_{1}} + n_{\alpha_{2}}}{2\left(n_{\alpha_{1}} + n_{\alpha_{2}} + 2 n_{\alpha_{1}} n_{\alpha_{2}}\right)} = \left\langle \left(\Delta \hat{S}_{M,12}\right)^{2}\right\rangle. \end{split} \tag{45}$$

Сравнение формулы (31) для среднего значения косинуса разности фаз полей в когерентных состояниях, полученной в рамках теории РВ и той же величины для измеряемого интерференционного оператора (44a), показывает, что данные величины обладают идентичной зависимостью от разности фазовых углов когерентных состояний

$$\Delta \equiv \varphi_{\alpha_2} - \varphi_{\alpha_1}$$
.

Расчеты наблюдаемых средних, проведенные с использованием формул (31) и (44a), показали, что величина

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} / \left\langle \hat{C}_{M,12} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} \approx 0.55$$

при 
$$n_{\alpha_1} \approx 0$$
,  $n_{\alpha_2} \sim 1$  и

$$\left\langle \hat{C}_{PB} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} / \left\langle \hat{C}_{M,12} \right\rangle_{\alpha_1,\alpha_2} \approx 0.95$$

при  $n_{\alpha_1}\gg 1,\, n_{\alpha_2}\sim 1$  для любых значений  $\Delta.$ 

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что измерение величины интерференционного члена светоделителя может служить для достаточно точной оценки средних значений ТОРФ квантовых полей в когерентных состояниях при  $n_{\alpha_j}>2$ , j=1,2. Расхождение с теорией РВ в этом случае составляет величину около  $10\,\%$ .

Дисперсии измеряемых тригонометрических операторов разности фаз (45) полей в когерентных состояниях существенно отличаются от соответствующих дисперсий операторов разности фаз в теории PB. Сравнение формулы (45) с формулой (32) для дисперсии оператора косинуса разности операторов фаз в теории PB показывает, что теория PB (так же как и теория интерференционного TOPФ) предсказывает ярко выраженную зависимость дисперсии от значений фазовых углов когерентных состояний  $\varphi_{\alpha_j}, j=1,2,$  тогда как соответствующая дисперсия измеряемого оператора разности фаз (45) не зависит от величин этих параметров квантовых состояний полей  $|\alpha_1\rangle$  и  $|\alpha_2\rangle$ .

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что измеряемые операторы разности фаз полей в случае когерентных квантовых состояний полей не могут использоваться даже для качественной оценки дисперсий (флуктуаций) ТОРФ в квантовой области при  $n_{\alpha_j} \sim 1, j=1,2.$ 

#### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе развит метод построения эрмитовых тригонометрических операторов разности фаз (ТОРФ) двух квантовых электромагнитных полей, использующий операторы интерференции светоделителя. Проведено сравнение величин наблюдаемых средних и дисперсий (флуктуаций) для получаемых в рамках такой теории операторов с соответствующими величинами, следующими из теории эрмитового оператора Пегга – Барнетта (РВ), для различных квантовых состояний полей.

Показано, что для фоковских состояний полей  $|n_j\rangle,\ j=1,2$  результаты двух теорий совпадают между собой.

В случае, если оба поля находятся в когерентных состояниях  $|\alpha_j\rangle$ , j=1,2, средние значения и дисперсии интерференционных операторов косинуса и синуса разности фаз полей обладают теми же качественными зависимостями от параметров кван-

товых состояний полей, что и соответствующие операторы теории PB. В то же время, результаты двух теории могут количественно различаться в квантовой области слабых полей. Так, различие двух теорий для дисперсий ТОРФ может достигать  $60\,\%$  для  $n_j = \left|\alpha_j\right|^2 \sim 1, \, j=1,2.$  Точное согласие результатов двух теории достигается при  $n_j \gg 10, \, j=1,2.$ 

Отличие результатов теории РВ от результатов теории интерференционных ТОРФ для средних величин операторов разности фаз двух полей в сжатом  $|\varsigma_1;\alpha_1\rangle$  и когерентном  $|\alpha_2\rangle$  состояниях составляет для квантовых полей с  $n_{\alpha_{j}} \sim 1, j = 1, 2$  величину до 15 %, а для полей с  $n_{\alpha_i} > 10, j = 1$  или 2, величину порядка 1% для произвольного значения параметра сжатия  $r_1$ . Точное совпадение результатов двух теорий достигается для любой степени сжатия одного из полей для мезоскопических квантовых полей при  $n_{\alpha_i} > 100, j = 1, 2$ . Для дисперсий ТОРФ отличие результатов теории интерференционных операторов и теории РВ пренебрежимо мало в случае сильного сжатия  $r_1 \gg 1$  в квантовом режиме микроскопических полей  $n_{\alpha_i} \sim 1, j = 1, 2.$  В случае  $r_1 \sim 1$  точное совпадение результатов обеих теорий имеет место при  $n_{\alpha_i} > 100, j = 1, 2.$ 

В случае, когда оба поля находятся в сжатых состояниях,  $|\alpha_j;\varsigma_j\rangle$ , j=1,2, дисперсии в теории интерференционных полей ТОРФ и в теории РВ различаются незначительно для величин параметров сжатия полей  $r_j>2,\ j=1,2$  при любых  $n_{\alpha_j}=|\alpha_j|^2.$  В случае слабо сжатых состояний, при  $r_j<2,\ j=1,2,$  результаты двух теорий совпадают для  $n_{\alpha_j}\gg 10,\ j=1,2.$ 

Различие наблюдаемых средних значений ТОРФ может составлять заметную величину порядка нескольких процентов даже при высокой степени сжатия. Результаты двух теорий, как для средних, так и для дисперсий операторов разности фаз точно совпадают для  $n_{\alpha_j} > 100, j=1,2$  при любой степени сжатия.

Показано, что измеряемые тригонометрические операторы разности фаз полей, представляющие собой нормированные интерференционные операторы светоделителя, могут служить для качественной (или полуколичественной) оценки средних величин операторов разности фаз согласно теории PB в случае когерентных состояний полей в квантовом режиме. В то же время, в тех же условиях, дисперсии измеряемых операторов разности фаз качественно отличаются от соответствующих величин, получаемых в рамках теории эрмитового оператора фазы PB.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. L. Susskind and J. Glogower, Physics 1, 49 (1964).
- P. Carruthers and M. M. Nieto, Phys. Rev. Lett. 14, 387 (1965).
- P. Carruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. 40, 411 (1968).
- 4. E. C. Lerner, Nuovo Cimento B 56, 183 (1968).
- 5. R. Lynch, J. Opt. Soc. Am. B 3, 1006 (1986).
- 6. R. Lynch, J. Opt. Soc. Am. B 4, 1723 (1987).
- S. M. Barnett and D.T. Pegg, J. Mod. Opt. 36, 7 (1989).
- D. T. Pegg and S. M. Barnett, Phys. Rev. A 39, 1665 (1989).
- S. M. Barnett and D. T. Pegg, J. Phys. A-Mathematical and General. 19, 3849 (1986).
- 10. R. Lynch, Phys. Rev. A 41, 2841 (1990).
- V. N. Popov and V. S. Yarunin, J. Mod. Opt. 39, 1525 (1992).
- 12. R. Lynch, Phys. Rep. 256, 367 (1995).

- 13. W. Vogel and D.-G. Welsch, *Quantum Optics*, Wiley-VCH (2006).
- 14. Ю. И. Воронцов, УФН 172, 907 (2002).
- A. P. Alodjants and S. M. Arakelian, J. Mod. Optics 46, 475 (1999).
- Richard A. Campos, Bahaa E. A. Saleh, and Malvin C. Teich, Phys. Rev. A 40, 1371 (1989).
- 17. Ulf Leonhardt, Rep. Prog. Phys. 66, 1207 (2003).
- **18**. Rodney Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Oxford University Press. (2000).
- 19. Horace P. Yuen, Phys. Rev. A 13, 2226 (1976).
- N. Gronbech-Jensen, P. L. Christiansen, and P. S. Ramanujam, J. Opt. Soc. Am. B 6, 2423 (1989).
- J. W. Noh, A. Fougeres, and L. Mandel, Phys. Rev. A 45, 424 (1992).
- 22. J. W. Noh, A. Fougeres, and L. Mandel, Phys. Rev. A 46, 2840 (1992).
- P. Riegler and K. Wodkiewicz, Phys. Rev. A 49, 1387 (1994).

# ВСТРЕЧНОЕ ЧЕТЫРЕХФОТОННОЕ СМЕШИВАНИЕ В ФОРМИРОВАНИИ ФАНТОМНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

 $A.\ B.\ Белинский^*.\ P.\ Cuhrx^{**}$ 

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

> Поступила в редакцию 29 июня 2020 г., после переработки 17 августа 2020 г. Принята к публикации 11 октября 2020 г.

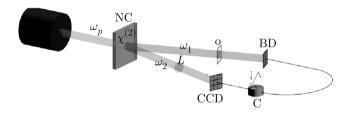
Показаны преимущества встречного четырехфотонного смешивания при формировании фантомных изображений по сравнению с трехфотонным параметрическим рассеянием в смысле повышения дифракционного предела пространственного разрешения. Даны необходимые формальные соотношения, подтверждающие эффективность этого решения.

**DOI:** 10.31857/S004445102102005X

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Фантомные изображения [1] — один из вариантов решения проблемы изучения чувствительных к свету объектов, прямое оптическое наблюдение которых затруднено. Для формирования фантомных изображений необходим источник коррелированных световых пучков, один из которых взаимодействует с объектом, а другой — нет (см. рис. 1). При этом в объектном канале детектор дает информацию только о полной интенсивности прошедшего излучения. Сопряженный пучок не взаимодействует с объектом, но регистрируется матрицей фотодетекторов, допуская измерение пространственной корреляционной функции интенсивности между двумя каналами.

Одним из важных доводов в пользу использования квантовых фантомных изображений является создание максимально щадящих условий освещения исследуемого объекта, когда воздействие излучения на объект (иногда необратимое) минимально [2]. Особенно это важно при облучении живых существ, например, рентгеновским излучением.



**Рис. 1.** Классическая схема формирования квантовых фантомных изображений: NC — нелинейный кристалл;  $\omega_p$  — накачка;  $\omega_1$  и  $\omega_2$  — пучки запутанных пар фотонов (пучки расходятся вследствие использования неколлинеарного процесса параметрического рассеяния [3]); О — объект; BD — интегрирующий детектор в объектном канале; L — оптический объектив; CCD — матрица фотодетекторов в восстанавливающем канале; С — коррелятор интенсивностей (схема совпадений)

#### 2. КАЧЕСТВО ИЗОБРАЖЕНИЯ

Вопросам качества квантовых фантомных изображений в последнее время уделяется значительное внимание [4–8], что обусловлено не только существенными пробелами в теории, но и откровенно неудовлетворительным пространственным разрешением, достигнутым в экспериментах. При этом основным фактором, ограничивающим пространственное разрешение, является дифракция. Дело в том, что оптические системы традиционно используемых схем обладают малым относительным отверстием. Но малая светосила отрицательно сказывается на качестве любых изображений, поскольку определяет дифракционное ограничение простран-

<sup>\*</sup> E-mail: belinksy@inbox.ru \*\* E-mail: ranjit.singh@mail.ru

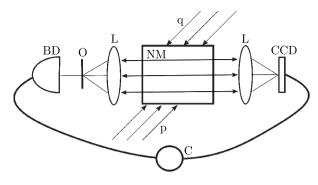


Рис. 2. Схема формирования фантомного изображения при встречном четырехфотонном смешивании с параллельным ходом лучей между объективами L и нелинейной средой NM с кубической нелинейностью; в прозрачном нелинейном кристалле с кубической нелинейностью  $\chi^{(3)}$  пары фотонов накачки преобразуются в пару сигнального и холостого фотонов, р, q — встречные пучки накачки; пучки запутанных пар фотонов освещают объект O и матрицу фотодетекторов ССD в восстанавливающем канале, причем и тот и другая находятся в фокальных плоскостях оптических объективов L; BD — интегрирующий детектор в объектном канале; C — коррелятор интенсивностей (схема совпадений)

ственного разрешения, а именно этот фактор для фантомных изображений является решающим, см., например, [4–6].

Но почему же в схемах с параметрическим рассеянием нельзя достичь высокой светосилы? В первую очередь, за счет малого угла параметрического захвата, в котором наблюдается экспоненциальное усиление. А именно, этот угол в конечном счете определяет относительное отверстие. Как его увеличить? Проще всего — уменьшая толщину кристалла. Но перспективы такого решения не беспредельны, ибо при этом снижается эффективность параметрического процесса.

А что, если использовать встречное четырехфотонное смешивание как в обращающих волновой фронт зеркалах (ОВФ-зеркалах, см., например, [9] и цитируемую там литературу)? Только затравкой при этом должен быть не внешний сигнал, а вакуумные флуктуации. В изотропной среде с кубической нелинейностью генерация может идти во всех направлениях. Следовательно, нет принципиальных ограничений для светосилы. С другой стороны, пространственная корреляция сигнального и холостого фотонов, распространяющихся в строго противоположных направлениях, следующая из закона сохранения импульса, обеспечивает прекрасные возможности формирования фантомных изображений: сигнальный фотон будет освещать объект, а холостой —

регистрироваться матрицей фотодетекторов, рис. 2. При этом с точки зрения геометрической оптики, лучи обоих фотонов необходимо находятся на одной прямой. Такое схемное решение, как представляется, может дать резкий скачок повышения качества фантомных изображений.

#### 3. ЧЕТЫРЕХФОТОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

В процессе четырехфотонного кросс-взаимодействия пары фотонов накачки преобразуются в пары сигнальных (s) и холостых (i) фотонов с частотами

$$\omega_p + \omega_q = \omega_s + \omega_i. \tag{1}$$

Помимо этого, фактически, закона сохранения энергии должен сохраняться и импульс, следовательно, волновые векторы подчиняться соотношению

$$\mathbf{k}_p + \mathbf{k}_q = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_i. \tag{2}$$

Кроме того, существует жесткая связь между поляризациями сигнального и холостого фотонов.

Самовоздействия мы не учитываем, полагая его коэффициент нелинейности значительно меньше соответствующего коэффициента кроссваимодействия. Но даже если это не так, самовоздействие вряд ли сильно исказит пространственную корреляцию фотонов, поскольку для построения фантомных изображений требуются очень малые интенсивности световых пучков (именно с целью щадящего воздействия на исследуемые объекты), при которых эффект самовоздействия будет незначителен.

Поскольку эффективность нелинейного процесса мала, истощением накачки в первом приближении можно пренебречь, считая ее амплитуду постоянной. С учетом того, что для реального наблюдения встречного четырехфотонного смешивания фотонов в накачке должно быть много, ее можно описывать классически. Для простоты полагаем ее также плоской. Тогда динамика системы в представлении Гейзенберга будет описываться системой уравнений (см., например, [10])

$$\frac{\partial \hat{A}_s(x,y,z)}{z} + i \frac{1}{2k_s} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \hat{A}_s(x,y,z) =$$

$$= i \chi^{(3)} \hat{A}_i^+(x,y,z), \quad (3)$$

$$\frac{\partial \hat{A}_i(x,y,z)}{z} - i \frac{1}{2k_i} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \hat{A}_i(x,y,z) =$$

$$= -i\chi^{(3)} \hat{A}_s^+(x,y,z). \quad (4)$$

Здесь полевые операторы

$$\hat{A}_{j}(\mathbf{r},z) = \int_{-\infty}^{\infty} d^{2}\boldsymbol{\varkappa} \,\hat{a}_{j}(\boldsymbol{\varkappa},z)e^{i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\varkappa}},\tag{5}$$

$$\hat{A}_{j}^{\dagger}(\mathbf{r},z) = \int_{-\infty}^{\infty} d^{2} \boldsymbol{\varkappa} \, \hat{a}_{j}^{\dagger}(\boldsymbol{\varkappa},z) e^{-i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\varkappa}}, \tag{6}$$

где  $\hat{a}_j$  и  $\hat{a}_j^\dagger$  — соответственно операторы уничтожения и рождения фотонов, интегрирование ведется в поперечной плоскости  $\mathbf{r}=\{x,y\},\ z$  — продольная координата,  $k_j$  — волновое число,  $\chi^{(3)}$  — коэффициент, пропорциональный кубичной нелинейности и квадрату амплитуды неистощимой накачки. Второе слагаемое левых частей (3), (4) описывает дифракцию.

Система уравнений (3), (4) аналогична соответствующей системе для комплексных амплитуд A в классическом описании. Линейность уравнений позволяет заменить комплексные амплитуды A соответствующими операторами в представлении Гейзенберга, поскольку в линейных уравнениях перемножений операторов друг на друга нет, и некоммутативность операторов на результат не влияет. Аналогичным образом влияние дифракции описывается и для трехфотонных процессов, см., например, [11-15].

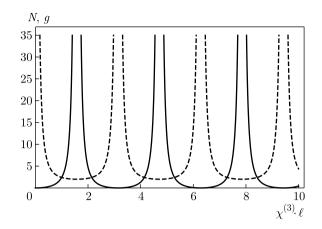
Систему операторных уравнений (3), (4) можно решить с помощью преобразования Фурье по x и y. Тогда получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которых для нелинейной среды длиной  $\ell$  имеет следующий вид (ср. также с [16]):

$$\hat{a}_s(\boldsymbol{\varkappa}, \ell) = e^{iK\ell} \sec(\chi^{(3)}\ell) \hat{a}_s(\boldsymbol{\varkappa}, 0) + i \operatorname{tg}(\chi^{(3)}\ell) \hat{a}_i^{\dagger}(\boldsymbol{\varkappa}, \ell), \quad (7)$$

$$\hat{a}_i(\boldsymbol{\varkappa}, 0) = i \operatorname{tg}(\chi^{(3)}\ell) \hat{a}_s^{\dagger}(\boldsymbol{\varkappa}, 0) + e^{iK\ell} \operatorname{sec}(\chi^{(3)}\ell) \hat{a}_i(\boldsymbol{\varkappa}, \ell), \quad (8)$$

где  $K = |\mathbf{z}|^2 / 2k_{s,i}, k_s = k_i.$ 

Для проверки адекватности полученных результатов проверим коммутационные соотношения для операторов  $\hat{a}_s(\mathbf{x},\ell), \, \hat{a}_s^{\dagger}(\mathbf{x},\ell), \, \hat{a}_i(\mathbf{x},0)$  и  $\hat{a}_i^{\dagger}(\mathbf{x},0)$ . Как



**Рис. 3.** Жирная кривая показывает среднее число фотонов в модах s и i  $(N_s=N_i)$ , а штриховая — коэффициент корреляции после нелинейного взаимодействия в случае, когда затравкой было вакуумное состояние

и следовало ожидать, они равны единичному оператору.

Рассчитаем среднее число фотонов и коэффициент их корреляции в случае, когда моды s и i исходно (на входах) находятся в вакуумном состоянии:

$$N_s(\mathbf{x}, \ell) = \langle \hat{a}_s^{\dagger}(\mathbf{x}, \ell) \hat{a}_s(\mathbf{x}, \ell) \rangle = \operatorname{tg}^2(\chi^{(3)}\ell), \quad (9)$$

$$N_i(\boldsymbol{\varkappa},0) = \langle \hat{a}_i^{\dagger}(\boldsymbol{\varkappa},0)\hat{a}_i(\boldsymbol{\varkappa},0)\rangle = \operatorname{tg}^2(\chi^{(3)}\ell), \qquad (10)$$

$$g_{si}^{(2)} = 1 + \csc^2(\chi^{(3)}\ell).$$
 (11)

Результаты представлены на рис. 3.

Замечательно прежде всего то, что в выражения для средних чисел фотонов не входит и. Это означает, что усиление абсолютно не зависит от наклона пучков, т.е. все они усиливаются одинаково, следовательно, их угловая апертура не ограничена условием фазового синхронизма и может принимать произвольное значение, определяемое лишь апертурой оптических объективов, т.е. чисто техническими особенностями, а не принципиальным лимитом. Таким образом, поставленная цель достигнута, и качество дифракционно-ограниченной системы может быть существенно повышено, поскольку сделать светосильную качественную оптику значительно проще, чем быть связанным непреодолимым условием фазового синхронизма.

#### 4. ДОПОЛНИТЕЛЬНОЕ ЗАМЕЧАНИЕ

Для снижения аберраций имеет смысл компоновка оптической системы, в которой нелинейная среда работала бы в параллельных пучках лучей, см. также [15,17]. Можно поместить нелинейный кристалл между двумя объективами так, чтобы он работал в параллельных пучках, как это показано на рис. 2. При этом объект и фантомное изображения должны находиться в фокальных плоскостях этих объективов. Это хороший вариант компоновки, поскольку не только уничтожает связанные с дефокусировкой искажения, но и полностью компенсирует аберрации, вносимые нелинейной средой. Ведь с точки зрения геометрической оптики он работает как плоскопараллельная пластина, вносящая, по крайней мере, сферическую аберрацию в сходящихся или расходящихся пучках. А в коллимированных — аберрации отсутствуют.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итоги работы, можно заключить, что встречное четырехфотонное смешивание может дать существенный выигрыш в качестве фантомных изображений, поскольку при отсутствии ограничений угловой апертуры световых пучков, связанных с нивелированием условия фазового синхронизма, пространственная корреляция сигнального и холостого пучков в полной мере остается. А снятие верхнего предела угловой апертуры дает возможность повысить предельное пространственное разрешение за счет смягчения дифракционных ограничений.

Вместе с тем, следует учитывать возможность негативного воздействия конкурирующих со встречным четырехфотонным смешиванием процессов, в частности, самовоздействия. Определенный оптимизм здесь внушают два обстоятельства. Во-первых, малая интенсивность генерируемых пучков, необходимая для формирования фантомных изображений, обусловит и незначительное самовоздействие. Ведь регистрация ведется в режиме счета фотонов. Во-вторых, само существование зеркал с обращением волнового фронта (ОВФ-зеркал), использующих четырехфотонный процесс, также способных строить изображения, позволяет надеяться на успех и в случае фантомных изображений.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-01-00598 A).

#### ЛИТЕРАТУРА

- Квантовое изображение, под ред. М. И. Колобова (ориг.), А. С. Чиркина (перев.), Физматлит, Москва (2009).
- M. G. Basset, F. Setzpfandt, F. Steinlechner et al., Laser & Photonics Reviews. 13, 1900097 (2019).
- 3. Д. Н. Клышко, Физические основы квантовой электроники, Наука, Москва (1986).
- А. В. Белинский, Вестник МГУ. Серия 3: Физика, астрономия № 5, 3 (2018).
- P.-A. Moreau, P. A. Morris, E. Toninelli et al., Sci. Rep. 8, 13183 (2018).
- P.-A. Moreau, P. A. Morris, E. Toninelli et al., Opt. Express. 26, 7528 (2018).
- **7**. Д. А. Балакин, А. В. Белинский, КЭ **49**, 967 (2019).
- 8. D. A. Balakin, A. V. Belinsky, and A. S. Chirkin, Quantum Information Processing. 18, 80 (2019).
- 9. Б. Я. Зельдович, Н. Ф. Пилипецкий, В. В. Шкунов, *Обращение волнового фронта*, Наука, Москва (1985).
- **10**. А. В. Белинский, Журнал прикладной спектроскопии **50**, 469 (1989).
- **11.** А. В. Белинский, А. С. Чиркин, КЭ **15**, 2150 (1988).
- **12**. М. И. Колобов, И. В. Соколов, ЖЭТФ **96**, 1945 (1989).
- M. I. Kolobov and I. V. Sokolov, Phys. Lett. A 140, 101 (1989).
- **14**. И. В. Соколов, Опт. и спектр. **70**, 670 (1991).
- A. S. Chirkin and E. V. Makeev, J. Opt. B. Quantum Semiclass. Opt. 5, S500 (2005).
- 16. A. Yariv and D. Pepper, Opt. Lett. 1, 16 (1977).
- **17**. А. В. Белинский, КЭ **50**, 951 (2020).

## ЭФФЕКТИВНЫЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР РЕЗОНАТОРА С ОСЦИЛЛИРУЮЩИМИ ПАРАМЕТРАМИ

A. И. Трубилко  $^{a^*},\ A.\ M.\ Башаров$   $^{b,c^{**}}$ 

<sup>а</sup> Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России 196105, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» 123182, Москва, Россия

> <sup>с</sup> Московский физико-технический институт 141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 11 августа 2020 г., после переработки 21 сентября 2020 г. Принята к публикации 21 сентября 2020 г.

Введено понятие эффективного квантового осциллятора и найдена добавка к энергии основного состояния, обусловливающая дополнительный сдвиг энергетических состояний в условиях периодического изменения его частоты.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020061

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени существуют два экспериментально продемонстрированных физических эффекта, обусловленные проявлением основного вакуумного состояния бозонного поля, — эффект Казимира [1] и лэмбовский сдвиг [2] атомных уровней. Оба эффекта являются следствием существования флуктуаций вакуумного состояния электромагнитного поля, описываемого известными гейзенберговскими коммутационными соотношениями. И если лэмбовский сдвиг является прямым проявлением энергии взаимодействия атома с окружающим электромагнитными полем, то статический эффект Казимира является следствием изменения граничных условий задачи, дискретизирующих число возможных состояний полевого энергетического континуума в пространстве резонатора. Отметим, что этот эффект также зарегистрирован с высокой степенью точности современными экспериментальными методами [3].

Вместе с тем уже более полувека исследуется и динамический эффект Казимира, заключающийся в генерации квантов электромагнитного поля в усло-

виях периодического изменения параметров квантовой системы во времени [4, 5]. Его первое экспериментальное подтверждение осуществлено в работе [6]. Описание такой системы оказывается эквивалентным наличию в ней параметрического генератора, что было впервые продемонстрировано еще в работе [7] при условиях гармонического колебания одного из зеркал резонатора в вакууме. Однако создание безынерционного идеального зеркала, совершающего колебания, вызывает технические трудности. Поэтому в работе [8] предложен его аналог с помощью возбуждения в зеркале высокочастотых плазмонных колебаний в течение некоторых промежутков времени, которые и продуцируют рождение фотонов внутри резонатора. Такая модуляция коэффициента отражения одного из зеркал и ее отсутствие отвечают условиям соответственно динамического и статического эффектов. Квантование классических уравнений Максвелла с изменяющимися граничными условиями приводит к модели Мура – Лоу – Додонова 9-11. В типичном рассматриваемом случае периодического изменения граничных условий или коэффициента преломления среды [4,5] модель в представлении взаимодействия содержит быстро меняющиеся во времени слагаемые.

Чтобы извлечь информацию о такой системе, ее необходимо рассматривать как открытую систему. При достаточно быстром изменении слагаемых

<sup>\*</sup> E-mail: trubilko.andrey@gmail.com

<sup>\*\*</sup> E-mail: basharov@gmail.com

во времени (в представлении взаимодействия) использование исходного гамильтониана некорректно в типичном случае моделирования взаимодействия с окружением белым шумом. Это доказано в работе [12], а значительно ранее исследователи подмечали, что использование точного исходного гамильтониана в теории открытых систем приводит к кинетическому уравнению для открытой системы, не отвечающему ее реальной динамике. В то же время использование в теории оптических открытых систем приближения вращающейся волны приводит к реалистичному кинетического уравнению для открытой системы. Это отмечалось, например, в работе [13]. В работе [12] также доказано, что использование (вместо точного гамильтониана) эффективного гамильтониана в том представлении, как это сформулировано в работе [14], адекватно теории открытых оптических систем. Теория эффективного гамильтониана, в том виде как она представлена в [14] и в других работах авторов, является алгебраической формулировкой теории возмущений, уточняющей и обобщающей приближение вращающей волны, включая ее как частный случай первого порядка по взаимодействию. Поэтому представляется естественным применить алгебраическую теорию возмущений и к задаче о резонаторе с колеблющимся зеркалом. В теории открытых квантовых систем об использовании указанной алгебраической теории возмущений говорят как о локальном подходе к теории открытых квантовых систем.

В условиях, когда гамильтониан резонатора меняется со временем, его описание как открытой системы во внешнем поле (колеблющееся зеркало) выделяет в рассматриваемой модели эффективный квантовый осциллятор как самостоятельный объект, характеризуемый своей частотой. Эта частота оказывается сдвинутой по сравнению с частотой осциллятора с неподвижным зеркалом, причем этот сдвиг может быть экспериментально зарегистрирован. Если резонатор с колеблющимся зеркалом будет участвовать в обычных для квантовой оптики взаимодействиях с электромагнитными полями, например, взаимодействуя с ними на неподвижном зеркале, то при его описании в рамках локального подхода эффективный осциллятор проявится в качестве основного самостоятельного объекта взаимодействия, так что его параметры могут быть при их помощи зарегистрированы. Подчеркнем, что рассмотрение резонатора с колеблющимся зеркалом как открытой системы необходимо для извлечения спектроскопической информации о нем, а без введения понятия эффективного осциллятора невозможно корректно говорить об изменениях в спектральных характеристиках микрорезонатора с осциллирующими параметрами. Такая точка зрения отсутствовала в предыдущих работах.

Рассмотрение резонаторной моды в условиях внешнего модулирования колебаний одного из зеркал как эффективного осциллятора во внешнем поле в некотором смысле оказывается аналогичным описанию динамики атома в классическом заданном высокочастотном электромагнитном поле. В обеих задачах гамильтониан системы оказывается зависящим от времени, и затруднительно говорить о спектре гамильтониана всей системы. Можно пользоваться методом Флоке [15], представлениями о квазиэнергии и усредненном гамильтониане, но в данной задаче они, скорее, затушевывают физику процессов. В случае атома периодическое классическое поле (как резонансное, так и нерезонансное) вызывает так называемые динамические штарковские сдвиги атомных уровней за счет высокочастотного эффекта Штарка [16]. При этом становится возможным говорить о спектре атома и энергии его основного состояния. Аналогично, локальный подход к задаче о динамическом эффекте Казимира позволяет говорить о спектре эффективного осциллятора и энергии его основного состояния. Гамильтониан эффективного осциллятора в дальнейшем будем также именовать эффективным гамильтонианом осциллятора, полагая, что это естественно с точки зрения теории эффективного гамильтониана и не вызовет недоразумений.

Метод эффективного гамильтониана эквивалентен суммированию бесконечного числа членов обычной теории возмущений, а по сравнению с приближением вращающейся волны устанавливает жесткие ограничения на условия справедливости последнего и дает поправки, что часто называют выходом за приближение вращающейся волны или учетом антивращающих слагаемых. Эти поправки могут быть существенными и иметь экспериментальное проявление. Например, в случае взаимодействия атома и вакуумного электромагнитного поля в электродипольном приближении эти поправки дают альтернативный вывод лэмбовского сдвига, а в случае атомного ансамбля — учет диполь-дипольного взаимодействия. Подчеркнем, что применяемый нами локальный подход не использует каких-либо искусственных приближений и соображений, а позволяет естественным образом учитывать основные используемые приближения, отделяя медленную и быстровременную динамики задачи. Используемая методика позволяет провести корректный учет эффектов второго порядка, определяемых квантовой интерференцией от различных каналов взаимодействий. Именно эта естественная адекватность и раскрывает в полной мере его преимущества по сравнению с другими методами решения, зачастую выявляя новые явления, как, например, рассматриваемое ниже в этой статье.

Экспериментальные исследования состояния поля в динамическом эффекте Казимира обычно проводят или прямыми спектроскопическими методами, или посредством регистрации состояния атома, помещенного в пространство между двумя зеркалами резонатора. Вторая постановка получила название квантовой электродинамики резонатора [17] и обычно осуществляется на ридберговских высоковозбужденных состояниях. Аналогичная физическая ситуация реализуется в спазере [18], описывающем взаимодействие плазмонов с выделенной квантовой точкой, отвечающей двухуровневой модели. В работе [19] найден эффект, согласно которому быстрая модуляция параметров резонатора приводит к дополнительному лэмбовскому сдвигу рабочих уровней атома в резонаторе, что влияет на генерируемое состояние поля и приводит к дополнительному механизму рождения квантов.

В этой работе мы обращаем внимание на достаточно простой, но в то же время неучтенный эффект. Он заключается в появлении в режиме периодической модуляции параметров системы дополнительного сдвига собственной частоты эффективного осциллятора в основном состоянии. Экспериментальная регистрация вакуумного состояния эффективного осциллятора вполне осуществима методами спектроскопии [20]. Отметим, что в большинстве работ рассмотрен и реализован случай резонансного взаимодействия, где представленный здесь эффект оказывается завуалирован процессом радиационного давления порождаемого излучения и резонатора. Мы уделяем особое внимание также и случаю нерезонансного взаимодействия, где представленный и выявленный эффект проявится в эксперименте в значительно большей мере. В некотором смысле найденный эффект дополняет результаты работы [19], полученные для атомного осциллятора на случай квантового осциллятора. При этом впервые локальный подход квантовой теории применен к задаче о динамическом эффекте Казимира.

#### 2. ЛОКАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ЗАДАЧЕ О ДИНАМИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ КАЗИМИРА

Рассмотрим резонатор в модели Мура – Лоу – Додонова [9–11] для самой простой ситуации одномодового приближения. Гамильтониан такой системы, в отличие от общего случая действия всех допустимых резонатором осцилляторов на выделенный, зависит от операторов рождения  $a^{\dagger}$  и уничтожения a только избранного осциллятора и описывается следующим полным гамильтонианом системы:

$$H = H_1 + H_2,$$
  
 $H_1 = \hbar \omega(t) a^{\dagger} a, H_2 = i \hbar \chi(t) [a^{\dagger^2} - a^2].$  (1)

При записи выражений (1) мы учли модуляцию константы параметрического взаимодействия

$$\chi(t) = \frac{1}{4\omega(t)} \, \frac{d\omega}{dt},$$

которая моделируется гармонической зависимостью частоты  $\omega(t) = \omega_0(1 + \epsilon \sin \eta t)$ , где  $\omega_0$  — собственная частота рассматриваемой моды в статическом режиме,  $\eta$  — частота модуляции, а глубина модуляции  $\epsilon$  считается малым параметром,  $\epsilon \ll 1$ . Такой закон может быть обеспечен адекватной зависимостью от времени какого-либо параметра системы это может быть как гармоническое колебание одного из зеркал, созданное, например, колебаниями поверхностной плазмонной моды, так и соответствующая зависимость его характеристик, например коэффициента пропускания от времени. Заметим, что мы выбираем традиционный вид гамильтониана для рассматриваемой задачи, который обычно используется в задачах квантовой оптики [21] и квантовой электродинамики [22] резонаторов для генерации электромагнитных полей в квантовых состояниях.

Удобно переписать выражение (1) в виде

$$H = H_0 + V_1 + V_2, (2)$$

где выделены гамильтониан стационарной задачи  $H_0 = \hbar \omega_0 a^\dagger a$  и два зависящих от времени слагаемых, отвечающих малым возмущениям:

$$V_1 = -i\frac{\hbar\omega_0}{2}\epsilon(e^{i\eta t} - e^{-i\eta t})a^{\dagger}a,$$

$$V_2 = i \frac{\hbar \epsilon \eta \cos \eta t}{4} (a^{\dagger^2} - a^2).$$

Указанное разделение полного гамильтониана и выделение слагаемых, отвечающих малому возмущению системы и параметрическому взаимодействию, позволяют построить эффективный гамильтониан системы. Для этого воспользуемся методами алгебраической теории возмущений [14]. Его основная парадигма состоит в нахождении такого вида

оператора унитарного преобразования, применение которого к гамильтониану системы и ее волновой функции позволяет провести усреднение по быстропротекающим процессам. Основным критерием применения метода является получение гамильтониана такого вида, в котором отсутствуют быстро меняющиеся во времени слагаемые в представлении взаимодействия. Совершим унитарное преобразование  $\hat{T}$  над вектором состояния  $|\Psi\rangle$  системы,  $|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{T} |\Psi\rangle$ , который теперь описывается уравнением

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\Psi}\rangle = \tilde{H} |\tilde{\Psi}\rangle$$

с преобразованным гамильтонианом

$$\tilde{H} = \hat{T}H\hat{T}^{\dagger} - i\hbar\hat{T}\frac{d}{dt}\hat{T}^{\dagger}.$$
 (3)

Для дальнейшего рассмотрения удобно перейти к представлению взаимодействия Дирака, отмечая вектор состояния  $|\Psi(t)\rangle$  аргументом t и представляя уравнение Шредингера как

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \left(V_1(t) + V_2(t)\right) |\Psi(t)\rangle,$$
 (4)

где выделенные взаимодействия имеют следующий вид:

$$\begin{split} V_1(t) &= -i\frac{\hbar\omega_0}{2} \times \\ &\times \epsilon \left\{ \exp[i(2\omega_0 + \Delta)t] - \exp[-i(2\omega_0 + \Delta)t] \right\} a^\dagger a, \end{split}$$

$$\begin{split} V_2(t) &= i \frac{\hbar \epsilon \eta \cos{(2\omega_0 + \Delta)t}}{4} \times \\ &\times [a^{\dagger^2} \exp(2i\omega_0 t) - a^2 \exp(-2i\omega_0 t)]. \end{split}$$

При записи последних мы представили частоту модуляции как  $\eta=2\omega_0+\Delta.$ 

 ${
m Pacc mot pum}$  два случая — наличие и отсутствие в системе каких-либо резонансов.

В случае отсутствия резонансов считаем отстройку  $\Delta$  большой, и слагаемые, содержащие функции  $\exp(-i\omega_0 t)$ ,  $\exp(-i\Delta t)$ , являются быстроменяющимися функциями времени.

Совершая унитарное преобразование уравнения (4), найдем уравнение для преобразованного вектора  $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{V}^{eff}(t) |\tilde{\Psi}(t)\rangle,$$
 (5)

которое определяется искомым эффективным гамильтонианом  $\tilde{V}^{eff}(t)$  системы. Последний, в свою

очередь, зависит от количества слагаемых, которые учитываются в разложениях по малым параметрам задачи,

$$\tilde{V}^{eff}(t) = \tilde{V}^{(1,0)}(t) + \tilde{V}^{(0,1)}(t) + \tilde{V}^{(1,1)}(t) + \dots, \quad (6)$$

где первый верхний индекс указывает порядок разложения по взаимодействию  $V_1(t)$ , а правый — по взаимодействию  $V_2(t)$ . Представим оператор унитарного преобразования через генератор  $\hat{T} = \exp\left(-iS(t)\right)$ ,  $S(t) = S^{\dagger}(t)$ , который также разложим в ряд по этим же параметрам:

$$S(t) = S^{(1,0)}(t) + S^{(0,1)}(t) + S^{(1,1)}(t) + \dots$$
 (7)

Воспользовавшись известной формулой разложения Бейкера – Кемпбелла – Хаусдорфа для произвольного оператора O и эрмитова оператора R,

$$e^{iRt}Oe^{-iRt} = O + i\left[R,O\right] + \frac{i^2}{2!}\left[R,\left[R,O\right]\right] +$$
$$+ \frac{i^3}{3!}\left[R,\left[R,\left[R,O\right]\right]\right] + \dots,$$

приравняем соответствующие порядки в уравнении (3).

Для случая отсутствия резонансов в системе операторы  $V_1(t)$  и  $V_2(t)$  отвечают объединенному оператору  $V(t)=V_1(t)+V_2(t)$ , характеризуемому одним малым параметром  $\epsilon$ . Введем соотношения

$$\begin{split} \tilde{V}^{(1)}(t) &= \tilde{V}^{(1,0)}(t) + \tilde{V}^{(0,1)}(t), \\ S^{(1)}(t) &= S^{(1,0)}(t) + S^{(0,1)}(t), \\ \tilde{V}^{(2)}(t) &= \tilde{V}^{(2,0)}(t) + \tilde{V}^{(0,2)}(t), \\ \tilde{V}^{(1,1)}(t) &= 0, \quad S^{(2)}(t) = S^{(2,0)}(t) + S^{(0,2)}(t). \end{split}$$

Тогда первый порядок теории возмущений отвечает уравнению

$$\tilde{V}^{(1)}(t) = V(t) + \hbar \frac{d}{dt} S^{(1)}(t) = 0,$$

которое определяет следующий явный вид оператора  $S^{(1)}(t)$  в условиях адиабатического начала осциллянии:

$$S^{(1)}(t) = \frac{\epsilon\omega_0}{2\eta} (e^{i\eta t} - e^{-i\eta t}) a^{\dagger} a - \frac{\epsilon\eta}{8} a^{\dagger^2} \left( \frac{\exp[i(2\omega_0 + \eta)t]}{2\omega_0 + \eta} + \frac{\exp[i(2\omega_0 - \eta)t]}{2\omega_0 - \eta} \right) - \frac{\epsilon\eta}{8} a^2 \left( \frac{\exp[-i(2\omega_0 - \eta)t]}{2\omega_0 - \eta} + \frac{\exp[-i(2\omega_0 + \eta)t]}{2\omega_0 + \eta} \right).$$

Для второго порядка следует уравнение

$$\tilde{V}^{(2)}(t) = -\frac{i}{2} \Big[ S^{(1)}(t), V(t) \Big]',$$

где штрих означает, что в выражении оставлены только медленно меняющиеся во времени слагаемые. Обратим внимание, что в приведенной формуле перед коммутатором стоит сомножитель -i/2 вместо -i, если было бы использовано только второе слагаемое разложения Бейкера – Кемпбелла – Хаусдорфа. Различие связано с корректным учетом слагаемого второго порядка в последнем слагаемом правой части уравнения (3).

Явное выражение для  $\tilde{V}^{(2)}(t)$  имеет простой вид:

$$\tilde{V}^{(2)}(t) = -\hbar \frac{(\epsilon \eta)^2}{16} \left( a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) \times \left[ \frac{1}{2\omega_0 + \eta} + \frac{1}{2\omega_0 - \eta} \right]. \quad (8)$$

Для случая нерезонансного взаимодействия выражение (8) является единственным слагаемым первого неисчезающего порядка в картине взаимодействия и определяет динамику системы. В картине Шредингера ему отвечает эффективный гамильтониан  $H_0 + \tilde{V}^{(2)}$ , описывающий эффективный осциллятор. Здесь  $\tilde{V}^{(2)} = \tilde{V}^{(2)}(t)$  и мы опустили знак аргумента, поскольку явное наличие аргумента времени отмечает представление взаимодействия.

Среднее значение оператора  $\tilde{V}^{(2)}(t)$  можно найти разными способами, поскольку оно определено средним значением оператора  $a^{\dagger}a$  числа возбуждений системы. Например, это можно сделать путем построения гейзенберговых уравнений движения в представлении взаимодействия. В данном случае очевидно, что исследуемый оператор  $a^{\dagger}a$  является интегралом движения, а его среднее определяется начальным значением в вакуумном состоянии, следовательно, равно нулю. Физически это означает, что вакуумное состояние не развивается в этом порядке разложения, а поправка к энергии основного состояния определена его флуктуациями и уже учтена.

Эта поправка к энергии основного состояния квантового осциллятора, производимая в динамическом эффекте, для случая отсутствия резонансов в системе равна

$$\Delta E = -\frac{(\epsilon \eta)^2}{32} \left[ \frac{1}{2\omega_0 + \eta} + \frac{1}{2\omega_0 - \eta} \right]. \tag{9}$$

Именно эта величина и характеризует дополнительный стационарный энергетический сдвиг основного состояния осциллятора резонатора, который здесь выступает в роли эффективного осциллятора. Подчеркнем, что она также продуцирована коммутационными соотношениями операторов рождения и уничтожения фотонов.

Рассмотрим случай двухфотонного резонанса в системе в условиях, когда  $\eta \approx 2\omega_0$ , а отстройка частот  $\Delta$  — величина малая. Тогда, используя разложения (6), (7) и применяя формулу Бейкера – Кемпбелла – Хаусдорфа, в первом порядке имеем

$$\tilde{V}^{(1,0)}(t) = \hbar \frac{d}{dt} S^{(1,0)}(t) + \tilde{V}^{(1)}(t) = 0, 
S^{(1,0)}(t) = \epsilon \omega_0 \frac{\cos((2\omega_0 + \Delta)t)}{2\omega_0 + \Delta} a^{\dagger} a, 
\tilde{V}^{(0,1)}(t) = \hbar \frac{d}{dt} S^{(0,1)}(t) + \tilde{V}^{(2)}(t) = 
= i\hbar \frac{\epsilon \eta}{8} \left( e^{-i\Delta t} a^{\dagger^2} - e^{i\Delta t} a^2 \right), 
S^{(0,1)}(t) = \frac{\epsilon \eta}{8} \left( \frac{\exp[i(4\omega_0 + \Delta)t]}{4\omega_0 + \Delta} a^{\dagger^2} + 
+ a^2 \frac{\exp[-i(4\omega_0 + \Delta)t]}{4\omega_0 + \Delta} \right).$$
(10)

Представим выражения и для вторых порядков:

$$\tilde{V}^{(2,0)}(t) = \tilde{V}^{(1,1)}(t) = 0, 
\tilde{V}^{(0,2)}(t) = -\frac{i}{2} \left[ S^{(0,1)}(t), V_2(t) \right]' = 
= -\hbar \frac{(\epsilon \eta)^2}{32} \frac{1 + 2a^{\dagger}a}{4\omega_0 + \Delta}.$$
(11)

Заметим, что в представлении Шредингера эффективный гамильтониан резонатора имеет вид

$$H = \tilde{H}_0^{eff} + i\hbar \frac{\epsilon \eta}{8} \left( a^{\dagger^2} \exp(-2i\omega_0 t) - a^2 \exp(2i\omega_0 t) \right),$$
$$\tilde{H}_0^{eff} = H_0 - \hbar \frac{(\epsilon \eta)^2}{32} \frac{1 + 2a^{\dagger} a}{4\omega_0 + \Delta}.$$

Здесь  $\tilde{H}_0^{eff}$  — гамильтониан эффективного осциллятора, а его взаимодействие с движущимся зеркалом описывается оператором

$$i\hbar \frac{\epsilon \eta}{8} \Big( a^{\dagger^2} \exp(-2i\omega_0 t) - a^2 \exp(2i\omega_0 t) \Big).$$

Необходимые для дальнейшего средние от операторов наиболее просто могут быть определены в гейзенберговской картине взаимодействия, эволюцию операторов в которой будем обозначать, чтобы не было путаницы, нижними индексами. Динамика системы в главном порядке определяется теперь именно взаимодействием (10), которое описывает явление вырожденной параметрической генерации. Эволюция операторов рождения и уничтожения в простом случае  $\exp(\pm i \Delta t) \approx 1$  сводится к известному преобразованию

$$a_t = a_0 \operatorname{ch} r + a_0^{\dagger} \operatorname{sh} r,$$

где нижний индекс «0» отвечает начальным условиям, а  $r = (\epsilon \eta/4)t$  — параметр сжатия.

Усредним теперь искомые средние по исходному вакуумному состоянию. В этом случае не зависящая от времени добавка к энергии определяется соотношением

$$-\hbar \frac{(\epsilon \eta)^2}{32} \frac{1}{4\omega_0 + \Delta}.$$

Остальные средние зависят от параметра сжатия, который, в свою очередь, определяется временем взаимодействия. В частности, слагаемое от среднего числа рожденных из вакуума квантов возбуждения,  $\langle a_t^{\dagger} a_t \rangle = \sin^2 r$ , определяет радиационное давление.

В исходной шредингеровской картине развитому из основного вакуумного состояния эффективного осциллятора отвечает его сжатое вакуумное состояние, а его средняя энергия наряду со стационарным сдвигом в том же порядке имеет зависящее от времени слагаемое от среднего значения числа квантов возбуждения, полученных в процессе вырожденной параметрической генерации.

Отметим, что найденные в задаче величины не зависят от выбора модуляции частоты в форме  $\omega(t)=\omega_0(1+\epsilon\sin\eta t)$  или  $\omega(t)=\omega_0(1+\epsilon\cos\eta t).$ 

С точки зрения унитарной симметрии квантовой теории, задачу можно исследовать диагонализацией исходного гамильтониана. Последнее отвечает глобальному подходу квантовой теории и также осуществляется унитарным преобразованием, например методом непрерывного унитарного преобразования [23–25]. В обсуждаемой задаче диагонализация гамильтониана (1) не проводилась. Локальный подход в рассматриваемых условиях оказывается проще и эффективнее. Диагональная часть эффективного гамильтониана уже содержит основные поправки и вводит понятие эффективного осциллятора, которое сохраняется при учете возможных новых взаимодействий при рассмотрении резонатора с колеблющимся зеркалом как объекта теории открытых квантовых систем. Дальнейшая диагонализация эффективного гамильтониана дает поправки к уже полученным величинам более высокого порядка малости [14].

Проанализированная здесь ситуация, когда в динамическом эффекте Казимира уровни энергии стационарного режима гармонического осциллятора приобретают дополнительный энергетический сдвиг, по нашему мнению, является чрезвычайно важной с фундаментальной точки зрения. Приведем следующее рассуждение в простейшем случае. Найдем силу Казимира как производную убыли работы  $\mathcal{E}$ , совершенной при адиабатическом изменении размера  $\ell$  квантования одномерного резонатора [26]. Эту физическую величину в статическом слу-

чае найдем как помодовую разность энергии электромагнитного поля внутри резонатора и в свободном пространстве. Единственная собственная частота одночастотного резонатора из граничных условий определена соотношением  $\omega_0 = \pi c/\ell$ , где c скорость света. Для случая свободного пространства собственная энергия равна нулю ввиду устремления собственного размера к бесконечности. Величина силы притяжения в этом случае определяется соотношением  $F = -\hbar \omega_0^2 / 2\pi c$ . Отметим, что собственная энергия всех остальных мод свободного пространства не зависит от параметра  $\ell$  и вклада в значение силы не дает. Этот же результат может быть получен и путем адиабатического изменения параметра проницаемости двух стенок, разграничивающих одномерное пространство.

Регистрация предложенного явления может быть осуществлена в следующем эксперименте. Пусть резонатор представляет собой два параллельных зеркала, где только одно подвергается динамическим осцилляциям, а другое непосредственно служит для регистрации силы Казимира. Различия наблюдаются в разнице значений величины силы по сравнению с ситуацией, когда оба зеркала неподвижны, а эксперимент статичен. Отметим, что к настоящему времени удалось зарегистрировать величину энергии основного состояния осциллятора по эффекту возникновения сжатых квантовых состояний параметрического генератора [20]. Кроме того, развитие методов исследования в нанометровом диапазоне [27], как, например, совершенствование метода динамической голографии [28], позволяет надеяться на регистрацию рассмотренного нами эффекта.

#### з. ОБСУЖДЕНИЕ

Представленное применение методов локального подхода квантовой теории к динамическому эффекту Казимира демонстрирует возможность следующего общего подхода к подобным задачам. Полученный вид эффективного гамильтониана задачи в резонансном и нерезонансном случаях достаточно универсален. Локальный подход основан на алгебраической теории возмущений [12, 14, 29], которая позволяет получать эффективные гамильтонианы задач типа Мура – Лоу – Додонова в областях параметров, в которых частотный спектр системы четко обусловлен одной или несколькими характерными частотами, а некоторые взаимодействия могут считаться малыми. При этом локальный подход да-

ет возможность обсуждать и исследовать спектры основных эффективных компонент открытой системы. Виды эффективных гамильтонианов здесь универсальны и определяются помимо структуры спектра подсистем открытых систем, в которой возможны различные резонансные условия, алгеброй операторов задачи. Поэтому определенные в данной работе эффективные гамильтонианы для случаев нерезонансного изменения параметров и двухквантового резонанса при изменении параметров могут быть получены путем применения алгебраической теории возмущений к фундаментальным квантовым моделям Джейнса – Каммингса [30] и Тависа – Каммингса [31], в которых константы взаимодействия фотонной моды с атомами промодулированы и рассмотрены соответствующие резонансные (или нерезонансные) условия. Соответствующие вычисления здесь стандартны и аналогичны [32].

При этом возникающие сдвиги энергетических уровней и константы связи следует рассматривать как параметры теории, которые могут быть получены в результате прямого квантования классической модели задачи, как это проделано в классических работах [9–11]. Отметим, что до сих пор для анализа эффектов в условиях квантовой модели, вызванных периодическими изменениями ее параметров, практикуется непосредственное квантование исходной классической модели, как, например, в недавней работе [33], в которой, как и раньше [9–11], ничего не говорится о роли эффективного квантового осциллятора и его возможном сдвиге энергии.

Подход на основе алгебраической теории возмущений при применении к известным квантовым моделям (минуя стадию первичного квантования) оставляет в стороне лишь вопросы и эффекты, связанные с нетривиальным адиабатическим изменением параметров квантовой системы. Но при этом локальный подход к известным моделям позволяет вводить понятия эффективных составляющих открытых систем и сразу представлять и анализировать возможные новые физические эффекты, обусловленные периодическим изменением каких-либо параметров рассматриваемой модели в очерченных рамках. Поэтому представленный в работе подход дает теоретическую основу для дальнейших исследований динамики резонатора с периодической модуляцией границ как открытой системы. При этом параметры возникающих эффективных компонент доступны экспериментальным измерениям.

Финансирование. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00234а).

#### ЛИТЕРАТУРА

- H. B. Z. Casimir, Proc. Kon. Neder. Akad. Wet. 51, 793 (1948).
- Jr W. E. Lamb and R. C. Retherford, Phys. Rev. 72, 241 (1947).
- **3**. J. N. Mundey, F. Capasso, and V. A. Parsegian, Nature **457**, 170 (2009).
- 4. V. V. Dodonov, Physics 2, 67 (2020).
- 5. V. V. Dodonov, Phys. Scr. 82, 038105 (2010).
- C. M. Wilson, G. Johansson, A. Pourkabirian, J. R. Johansson, T. Duty, F. Nori, and P. Delsing, Nature 479, 376 (2011).
- 7. Л. А. Ривлин, КЭ 6, 2248 (1979).
- 8. C. Braggio, G. Bressi, G.Carugno, C. del Noce, G. Galeazzi, A. Lombardi, A. Palmieri, G. Ruoso, and D. Zanello, Europhys. Lett. **70**, 754 (2005).
- 9. G. T. Moore, J. Math. Phys. 11, 2679 (1970).
- 10. C. K. Law, Phys. Rev. A 49, 433 (1994).
- V. V. Dodonov and A. B. Klimov, Phys. Rev. A 53, 2664 (1996).
- **12**. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ **111**, 632 (2020).
- 13. D. F. Walls, Z. Phys. 234, 231 (1970).
- 14. A. I. Maimistov and A. M. Basharov, *Nonlinear Optical Waves*, Kluwer Acad., Dordrecht (1999).
- **15**. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в од*ном и двух измерениях, Мир, Москва (1990).
- **16**. В. С. Бутылкин, А. Е. Каплан, Ю. Г. Хронопуло, Е. И. Якубович, *Резонансные взаимодействия света с веществом*, Наука, Москва (1977).
- **17**. Г. Вальтер, УФН **166**, 777 (1996).
- **18**. D. J. Bergman and M. I. Stockman, Phys. Rev. Lett. **90**, 027402 (2003).
- **19**. Ю. Е. Лозовик, Н. Б. Нарожный, А. М. Федотов, Письма в ЖЭТФ **72**, 344 (2000).
- 20. I.-C. Benea-Chelmus, F. F. Settembrini, G. Scalari, and J. Faist, Nature 568, 202 (2019).
- **21**. Д. Н. Клышко, *Фотоны и нелинейные среды*, Наука, Москва (1980).

- **22**. В. Н. Горбачев, А. И. Трубилко, Опт. и спектр. **83**, 295 (1997).
- 23. F. Wegner, Ann. Phys. 3, 77 (1994).
- S. D. Glazek and K. G. Wilson, Phys. Rev. D 48, 5863 (1993).
- S. D. Glazek and K. G. Wilson, Phys. Rev. D 49, 4214 (1994).
- **26**. В. М. Мостепаненко, Н. Н. Трунов, УФН **156**, 385 (1988).
- 27. G. L. Klimchitskaya, V. M. Mostepanenko, V. M. Petrov, and T. Tschudi, Phys. Rev. Appl. 10, 014010 (2018).

- **28**. В. М. Петров, М. П. Петров, В. В. Брыскин, Е. Петтер, Т. Чуди, ЖЭТФ **131**, 798 (2007).
- **29**. А. М. Башаров, ЖЭТФ **142**, 419 (2012).
- **30**. E. T. Jaynes and F. W. Cummings, Proc. of the IEEE **51**, 89 (1963).
- **31**. M. Tavis and F. W. Cummings, Phys. Rev. **170**, 379 (1968).
- **32**. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ **110**, 505 (2019).
- **33**. M. H. Michael, J. Schmiedmayer, and E. Demler, Phys. Rev. A **99**, 053615 (2019).

# ИСТОЧНИК ЭКСТРЕМАЛЬНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ РАЗРЯДА, ПОДДЕРЖИВАЕМОГО ИМПУЛЬСОМ ИЗЛУЧЕНИЯ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

И. С. Абрамов  $a,b^*$ , Е. Д. Господчиков  $a^{**}$ , А. Г. Шалашов a

<sup>а</sup> Институт прикладной физики Российской академии наук 603950, Нижний Новгород, Россия

<sup>b</sup> Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского 603950. Нижний Новгород. Россия

Поступила в редакцию 21 августа 2020 г., после переработки 13 октября 2020 г. Принята к публикации 14 октября 2020 г.

Обсуждается возможность поддержания разряда в ксеноне, эффективно излучающем свет в диапазоне длин волн  $11.2~{\rm hm}\pm1$ %, субнаносекундным импульсом терагерцевого излучения. Проведено моделирование такого разряда для параметров, характерных для экспериментов с использованием современных лазеров на свободных электронах в качестве источников мощного терагерцевого излучения. Показано, что модернизированный лазер на свободных электронах в ИЯФ СО РАН (NovoFEL-3) позволит поддерживать точечный плазменный разряд с плотностью возбужденных ионов  ${\rm Xe}^{10+} - {\rm Xe}^{11+}$ , достаточной для выхода экстремального ультрафиолетового излучения со средней мощностью 35 Вт в диапазоне  $11.2~{\rm hm}\pm1$ %.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020073

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к разработке источников экстремального ультрафиолетового (ЭУФ) излучения с длиной волны 9–14 нм связан с развитием проекционной литографии: переход к более коротковолновому излучению для экспонирования позволяет уменьшить размеры элементов интегральных схем, обеспечивая большую производительность при прочих равных условиях [1].

В качестве эффективного механизма генерации ЭУФ-излучения может выступать спонтанное линейчатое излучение неравновесной плазмы многозарядных ионов. С повышением заряда иона его линейчатый спектр смещается в более коротковолновую область. Для ионов определенных элементов практически все излучение может лежать в диапазоне 5–100 нм уже при кратности 3+ и выше [2].

Излучение в ЭУФ-диапазоне может быть сфокусировано для дальнейшего использования лишь оптикой на основе многослойных зеркал [3]. Диапазон длин волн, в котором многослойные зеркала эффективно отражают ЭУФ-излучение, довольно узкий:  $13.5 \text{ нм} \pm 1 \%$  для Мо/Si-оптики,  $11.2 \text{ нм} \pm 1 \%$  для оптики на основе Ru/Be- и Мо/Ве-зеркал [4]. Это определяет целевые (стандартные) диапазоны ЭУФ-излучения для промышленного применения. Реализация эффективных источников ЭУФ-света в стандартных диапазонах требует ионов более высокой зарядности и специального подбора элементов. Так, для получения излучения в диапазоне  $13.5 \text{ нм} \pm 1 \%$ требуются ионы олова  $\mathrm{Sn}^{7+}$ –  $\mathrm{Sn}^{12+}$ , а для диапазона  $11.2 \text{ нм} \pm 1\%$  требуются ионы ксенона  $Xe^{10+}$  [5, 6]. Необходимая плазма, как правило, создается в результате воздействия излучения лазера на жидкую оловянную [7,8] или газообразную ксеноновую [9,10] мишень.

Для эффективного поглощения лазерного излучения требуется плазма с концентрацией электронов более  $10^{19}~{\rm cm}^{-3}$ , однако такие плотности не являются оптимальными для генерации целевого

<sup>\*</sup> E-mail: abramov@appl.sci-nnov.ru

<sup>\*\*</sup> E-mail: egos@ipfran.ru

ЭУФ-излучения [2,11]. Перенос излучения с длиной волны порядка 10 нм в настолько плотной плазме затруднен эффектом запирания, состоящим в активном перепоглощении этого излучения ионами и в последующем гашении возбуждения ионов электронным ударом [12]. Для разряда с характерными размерами в десятки микрометров этот эффект не оказывает заметного влияния на выход ЭУФ-излучения при концентрациях ионов меньше или порядка  $10^{17}$  см $^{-3}$ , что, с учетом кратности ионизации 9-10, соответствует концентрациям электронов до  $10^{18}$  см<sup>-3</sup> [2]. При использовании газообразной мишени существенны также потери на поглощение ЭУФ-излучения окружающим разряд нейтральным газом [10]. Для слоя газа толщиной порядка размера разряда эффект существенно снижает выход излучения при концентрациях газа порядка  $10^{19}~{\rm cm}^{-3}$  и выше [13].

Разряд с плотностью электронов порядка  $10^{18}~{\rm cm}^{-3}~{\rm будет}$  наиболее эффективно поглощать электромагнитные волны с длиной волны  $20{\text -}30~{\rm мкм}$ , т. е. с частотой  $10{\text -}15~{\rm TГц}$ . Продемонстрировать разряд такого типа на сегодняшний момент — довольно трудная задача, поскольку источников терагерцевого ( ${\rm ТГц}$ ) излучения с достаточной мощностью немного. Если речь идет об излучении мощностью более  $1~{\rm BT}$ , то на данный момент можно указать всего два типа источников — это суб ${\rm TΓq}$ -гиротроны и  ${\rm TΓq}$ -лазеры на свободных электронах ( ${\rm ЛСЭ}$ ).

Большинство субТГц-гиротронов работают на частотах от 250 до 700 ГГц с пиковой мощностью до 100 кВт [14]. Генерация излучения на частоте 1 ТГц является рекордом для современных гиротронов, на этой частоте получена мощность до 2 кВт в импульсе [15, 16]. Вопрос использования таких гиротронов для поддержания плазмы, излучающей в ЭУФ-диапазоне, подробно исследован теоретически [2, 17–20], разряд такого типа продемонстрирован в экспериментах [13, 21]. ЛСЭ могут генерировать ТГц-излучение более высоких частот, в том числе и частоты более 10 ТГц [22, 23]. При высокой пиковой мощности излучения, ЛСЭ обладает коротким (1-100 пс) по сравнению с гиротронами импульсом излучения. Сложность синхронизации затрудняет его использование для испарения жидкой капли-мишени, но оставляет возможность применения для поддержания разряда в непрерывном потоке газа.

В данной работе теоретически исследованы особенности поддержания разряда такого типа в ксеноновой мишени, а именно:

- установлено, каким требованиям помимо длины волны должен удовлетворять импульс ТГц-излучения для создания разряда оптимальной плотности, излучающего в ЭУФ-диапазоне; проведена оценка, какие из действующих и планируемых ЛСЭ для этого подходят (разд. 2);
- выполнено моделирование разряда, поддерживаемого коротким импульсом ТГц-излучения ЛСЭ в ксеноне, установлены характерные параметры получаемой многозарядной плазмы и ее линейчатого излучения (разд. 3).

#### 2. ТРЕБОВАНИЯ К ЛСЭ

Многозарядная плазма несовместима с неполной ионизацией газа. При интенсивностях полей, характерных для ТГц-ЛСЭ, основным механизмом ионизации является ионизация электронным ударом [24, 25], при этом сечение ионизации нейтрального газа, как правило, существенно превышает сечения ионизации ионов высокой кратности [26]. Так, например, различие между сечениями ионизации нейтрального и десятикратно ионизированного ксенона составляет два порядка. Если допустить сопоставимые концентрации многозарядных ионов и нейтрального газа, то энергия, в первую очередь, идет на ионизацию нейтральных атомов. Более того, ионизация электронным ударом происходит последовательно: ион с зарядом Z появляется из иона с зарядом Z-1, а вероятность его появления пропорциональна концентрации иона-источника. Поэтому пока степень ионизации плазмы далека от 100 %, вероятность появления ионов кратностью выше  $\mathrm{Xe}^{2+}$ ничтожна (малы не только сечения их появления, но и концентрация источников). Таким образом, необходимым условием создания плазмы многозарядных ионов является обеспечение возможности полной ионизации нейтрального газа.

Длительность импульса ЛСЭ мала по сравнению с характерным временем  $t_{is}$  разлета плазмы. Это время можно оценить, считая, что характерный масштаб разряда совпадает с длиной волны  $\lambda$  поддерживающего ТГц-излучения, а средняя скорость коллективного (амбиполярного) движения электронов и ионов совпадает с ионно-звуковой скоростью:

$$t_{is} = \lambda / \sqrt{Z_{eff} \mathcal{E}_e / m_i}, \tag{1}$$

где  $\mathcal{E}_e$  — средняя энергия электронов,  $Z_{eff}$  и  $m_i$  — эффективный заряд и масса ионов. Характерное время разлета плазмы ксенона, поддерживаемой лазерным излучением с длиной волны 20 мкм при

средней энергии около 100 эВ составляет  $t_{is} \approx 3$  нс при  $Z_{eff}=1$ , что как минимум на порядок превышает длительность ТГц-импульса. Это означает, что нарабатываемая за время импульса плазма накапливается в каждой точке пространства независимо, движением плазмы и потерями частиц можно пренебречь. По этой же причине разница в динамических давлениях холодных атомов и горячих электронов не успевает вызвать разницы в их концентрациях, поэтому концентрация  $n_e$  электронов плазмы при полной однократной ионизации будет близка к начальной концентрации  $n_0$  нейтрального газа, при которой реализуется пробой.

Если объем, занимаемый газом, много меньше области, занимаемой электромагнитным полем ТГц-излучения, то значительная часть излучения пролетит мимо газообразной мишени и будет потеряна. Поэтому имеет смысл рассматривать разряд в газе, занимающем область, сопоставимую или превосходящую размеры области, занимаемой ТГц-полем. В этом случае характерный размер разряда, развивающегося в газе в отсутствие потерь частиц, будет определяться размерами области, занятой электромагнитным полем, т.е. будет иметь характерные размеры порядка длины волны  $\lambda$  T $\Gamma$ ц-излучения (в случае предельной фокусировки) или больше. Концентрация электронов  $n_e$  в этом случае не может сильно превосходить критическую концентрацию  $n_{cr}$ , при которой происходит отсечка излучения на длине волны  $\lambda \ (n_{cr} = \pi m_e c^2/e^2 \lambda^2)$ , или  $n_{cr}$  [см<sup>-3</sup>]  $\approx 10^{13} \lambda$  [см]<sup>-2</sup> [27]). Таким образом, в развитой стадии рассматриваемого разряда имеем  $n_e \sim n_{cr}$ .

Резюмируем выводы:

- для создания многозарядной плазмы необходима полная ионизация;
- в случае полной однократной ионизации концентрация электронов порядка начальной концентрации нейтрального газа;
- в развитой стадии разряда концентрация электронов порядка критической концентрации,

и получаем важное ограничение: начальная концентрация нейтрального газа не должна превосходить критическую концентрацию электронов. В противном случае в разряде не реализуется полная ионизация газа, а следовательно, не будет многозарядных ионов.

С другой стороны, за время работы лазера должен произойти пробой газа, т. е. должна успеть развиться электронная лавина. При предельно сфокусированном ТГп-излучении в область с радиу-

сом, равным длине волны  $\lambda$ , осцилляторная энергия электрона может быть оценена как

$$W = \frac{2e^2 P_0}{\pi^2 m_e c^3},\tag{2}$$

где  $P_0$  — мгновенная мощность ТГц-излучения в пике импульса,  $m_e$  — масса электрона, e — заряд электрона, c — скорость света в вакууме. В полях, характерных для излучения ЛСЭ, осцилляторная энергия  $W\sim 100$  эВ. Частота излучения ЛСЭ и частота соударений электронов с нейтральными атомами при концентрации газа  $n_0\sim 10^{18}~{\rm cm}^{-3}$  сопоставимы. В этих условиях  $\mathcal{E}_e\sim W$ , т. е. средняя энергия электронов на начальном этапе развития разряда есть просто их осцилляторная энергия. Условие развития электронной лавины за время действия импульса длительностью  $t_p$  можно представить как [28]

$$N_i = k_{i0} n_0 t_p \gg 1. \tag{3}$$

Здесь  $N_i$  — количество актов ионизации на один электрон за время импульса,  $k_{i0}$  — константа ионизации нейтрального газа при  $\mathcal{E}_e \sim W$ .

Если условие развития электронной лавины выполнено, то дальнейшее развитие разряда идет по следующему сценарию. Пока концентрация электронов меньше критической величины  $n_{cr}$ , электроны эффективно греются. Поскольку потерь частиц нет, энергия электронов тратится только на ионизацию и возбуждение ионов, а излишек запасается в средней энергии кинетического движения электронов. Тяжелые частицы при этом остаются холодными. Когда концентрация электронов превосходит критическое значение, большая часть энергии падающего на плазменное образование электромагнитного поля начинает отражаться. Нагрев электронов прекращается, но они продолжают тратить запасенную энергию на ионизацию и возбуждение ионов — плазма остывает. Плазма с высоким средним зарядом остывает быстро, поскольку времена жизни ее излучательных переходов невелики. Так, наиболее интенсивные линии Xe<sup>10+</sup> характеризуются временами порядка 0.1 пс. После остывания плазма эффективно распадается за счет рекомбинации, причем ионы с большими зарядовыми числами Z пропадают первыми, поскольку частота рекомбинации растет пропорционально  $Z^3$  [29]. Например, время рекомбинации для  $Xe^{10+}$  составляет 100 пс при  $n_e = 6 \cdot 10^{18} \ {\rm cm}^{-3}$  и  $\mathcal{E}_e = 10 \ {\rm эB}$ . Типичные для ЛСЭ частоты следования импульсов составляют 10-100 МГц, поэтому многозарядная плазма полностью распадается к началу следующего импульса.

	$\lambda$ , mkm	$t_p$ , пс	$P_0$ , MBT	W, эВ	$N_i$		
NovoFEL-1	130	75	0.7	8	0.1		
NovoFEL-2	37	20	3	36	2.7		
NovoFEL-3	11	20	1.5	18	16.4		
FELIX-1	25	5	7	83	2.2		
FELIX-2	25	5	25	297	2.5		
FEL-TUS FIR	25	20	5	59	7.7		
FELBE U100	18	1	5	59 59	0.7		
FEL FIR-1 (Osaka)	20	5	5		2.9		
Моделиро- вание	20	20	10	119	14.6		

**Таблица 1.** Характерные параметры современных ЛСЭ

Примечание. Величина  $N_i$  рассчитана для ксеноновой плазмы. В последней строке приведены параметры, использованные при моделировании режима горения разряда, обсуждаемого в разд. 3.

В табл. 1 приведены характеристики режимов работы существующих ТГц-ЛСЭ: NovoFEL (ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия), FELIX (Университет Неймегена, Нидерланды), FEL-TUS FIR (Токийский университет науки, Япония), FELBE (Гельмгольц-Центр Дрезден-Россендорф, Дрезден, Германия), Osaka FEL FIR-1 (Университет Осаки, Япония). Характерные мощности и длительности импульсов взяты из сводной таблицы ТГц-лазеров, составленной Гельмгольц-Центром Дрезден-Россендорф, Германия [22], и из обзора [23]. Две установки из табл. 1 удовлетворяют условию (3): NovoFEL-3 и FEL-TUS FIR.

Для нас наибольший интерес представляет установка NovoFEL-3, т. е. планируемая третья очередь новосибирского ЛСЭ. К сожалению, эта установка не вполне оптимальна для нашей задачи из-за слишком малой длины волны излучения, которая соответствует критической концентрации электронов  $10^{19}~{\rm cm}^{-3}$ . При такой концентрации происходит эффективное запирание ЭУФ-линий (11.2  ${\rm hm}\pm1\,\%$ ) в объеме разряда, кроме того, возможно поглощение ЭУФ-излучения окружающим нейтральным газом [13]. Меньшая же плотность буферного газа приведет к снижению эффективности поглощения  ${\rm T}$ Гц-излучения.

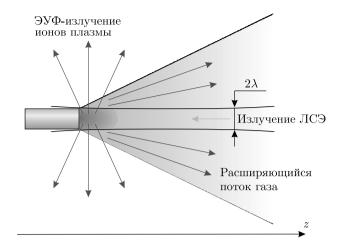


Рис. 1. Схема эксперимента по генерации ЭУФ-света в разряде, поддерживаемом полем ТГц-ЛСЭ

Оптимальной баланс между поглощением ТГц-излучения и выходом ЭУФ-излучения реализуется при критической концентрации электронов плазмы  $(2-3) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что соответствует длине волны ТГц-излучения около 20 мкм. Переход к длине волны 20 мкм при сохранении длительности импульса 20 пс и мощности 1.5 МВт соответствует существенному уменьшению параметра  $N_i$ . Для поддержания его на прежнем уровне требуется  $P_0 \sim 10$  MBт. Именно эти параметры, отраженные в последней строке табл. 1, мы возьмем за основу для моделирования в следующем разделе. И длина волны, и мощность ТГц-излучения такого уровня изначально планировались как достижимые для третьей очереди новосибирского ЛСЭ, но к настоящему времени не были продемонстрированы экспериментально из-за технологических сложностей [30, 31].

#### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЯДА

Рассмотрим процесс, схема которого представлена на рис. 1. Поток нейтрального ксенона расширяется в откачиваемый объем, что создает градиент концентрации газа с резким максимумом в окрестности сопла. Навстречу распространяется предельно сфокусированный пучок ТГц-излучения, который пробивает газ и поддерживает импульсный плазменный разряд с (возможно) многозарядными ионами. Будем строить одномерную модель такого разряда: параметры плазмы зависят от времени t и координаты z вдоль газовой струи. В начальный момент времени будем считать заданным распределение концентрации нейтрального газа  $n_0(0,z)$ ; для

развития пробоя допустим также наличие затравочных электронов с концентрацией  $n_e \ll n_0$ . Начальная концентрация нейтрального газа в сопле в наших расчетах составляет  $2.5 \cdot 10^{18}~{\rm cm}^{-3}$ , начальная степень ионизации  $1\,\%$ . Как уже отмечалось выше, для моделирования разряда, эффективного для генерации ЭУФ-света, в качестве базового мы использовали набор параметров «оптимизированного» эксперимента на NovoFEL, заданный в последней строке табл. 1.

Установим иерархию характерных времен. Время  $t_{is}$ , на котором скажутся эффекты, связанные с разлетом плазмы, согласно оценке (1) составляет единицы наносекунд. Перераспределение энергии электронов внутри разряда за счет теплопроводности определяется не ионно-звуковой скоростью, а тепловой скоростью электронов; характерное время  $t_{th}$  этого процесса составляет десятки пикосекунд. Время  $t_c$  между соударениями электрона с атомами и ионами ксенона при их концентрациях  $n_0 \sim 10^{18} \ {\rm cm}^{-3} \ {\rm cocтавляет} \ 0.1$ -1 пс и уменьшается как  $1/Z^2$  с ростом заряда иона [28]. Нижняя граница применимости квазистационарного приближения при описании электромагнитного поля есть время  $t_{em}=1/\omega=\lambda/2\pi c$ ; при  $\lambda=20$  мкм имеем  $t_{em}\approx$ pprox 10 ac. Таким образом получаем

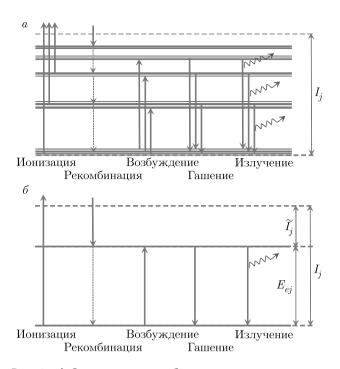
$$t_{em} \ll t_c \lesssim t_p \lesssim t_{th} \ll t_{is}.$$
 (4)

Характерные времена, на которых мы будем рассматривать развитие разряда, по порядку величины совпадают с длительностью  $t_p$  импульса излучения ЛСЭ и лежат между временами свободного пробега электронов  $t_c$  и перераспределения энергии электронов за счет теплопроводности  $t_{th}$ . Поэтому при моделировании импульсного ТГц-разряда мы будем пренебрегать эффектами диффузии и теплопроводности для плазмы и волновым запаздыванием для электромагнитного поля.

Если пренебречь пространственным транспортом энергии и частиц плазмы, то разряд можно описать с помощью балансных уравнений для концентрации возбужденных  $\overline{n}_j$  и невозбужденных  $\underline{n}_j$  нейтральных атомов (при j=0) и ионов (при  $j=1,\ldots,j_{max}$ ) Хе $^{j+}$  плюс уравнение для средней энергии электронов  $\mathcal{E}_e$ :

$$\frac{d\mathcal{E}_e}{dt} = \sum_s a_s, \quad \frac{d\underline{n}_j}{dt} = \sum_s b_{sj}, \quad \frac{d\overline{n}_j}{dt} = \sum_s c_{sj}. \quad (5)$$

Коэффициенты  $a_s$ ,  $b_{sj}$  и  $c_{sj}$ , описывающие элементарные процессы, представлены в табл. 2. В интересующих нас условиях основное влияние на ди-



**Рис. 2.** a) Схематическое изображение неупругих процессов в плазме разряда.  $\delta$ ) Упрощенная схема неупругих процессов

намику разряда оказывают следующие элементарные процессы: упругие электрон-ионные соударения, ионизация, возбуждение, дезактивация (гашение) ионов электронным ударом, тройная рекомбинация и линейчатое излучение ионов. Диаграмма неупругих процессов изображена на рис. 2а. Процессы фоторекомбинации можно исключить из рассмотрения, поскольку при характерных для разряда плотности плазмы и средней энергии электронов тройная рекомбинация существенно вероятнее [28]. Данные о сечениях ионизации взяты из работы [26]. Сечения возбуждения и гашения определены в приближении Бете [32]. Необходимые для этого характеристики линий ионов ксенона, включая коэффициенты Эйнштейна, рассчитаны при помощи кода Коуэна [33]. Исключение составляет  $Xe^{10+}$ , для которого есть основанные на спектроскопических измерениях результаты [5]. Данные о факторе Гаунта, используемом в приближении Бете, взяты из работ [34,35]. Данные о транспортном сечении упругих соударений электронов с атомами взяты из работ [36,37]. Данные об упругих соударениях заряженных частиц и тройной рекомбинации почерпнуты из монографии [28], а для многозарядных ионов — из [29].

Связанно-связанные переходы электронных состояний в ионах моделируются на основе подхода, предложенного нами ранее [2], со следующим упро-

s	$a_s$	$b_{sj}$	$c_{sj}$	Комментарий
1	$-\delta \sum_{j=0}^{j_{max}} k_{cj} n_j \mathcal{E}_e$	0	0	упругие столкновения
2	$-\sum_{j=0}^{j_{max}} (I_j k_{ij} \underline{n}_j + \widetilde{I}_j \widetilde{k}_{ij} \overline{n}_j) - \frac{\mathcal{E}_e}{n_e} \frac{dn_e}{dt}$	$-k_{ij}\underline{n}_{j}n_{e} + k_{ij-1}\underline{n}_{j-1}n_{e}$	$-\widetilde{k}_{ij}\overline{n}_{j}n_{e} + \widetilde{k}_{ij-1}\overline{n}_{j-1}n_{e}$	ионизация
3	$\sum_{j=0}^{j_{max}} \widetilde{I}_j k_{rj} \underline{n}_j n_e$	$-k_{rj}\underline{n}_{j}n_{e}^{2}$	$k_{rj+1}\underline{n}_{j+1}n_e^2$	рекомбинация
4	$-\sum_{j=0}^{j_{max}} E_{ej} k_{ej} \underline{n}_j$	$-k_{ej}\underline{n}_{j}n_{e}$	$k_{ej}\underline{n}_{j}n_{e}$	возбуждение
5	$\sum_{j=0}^{j_{max}} E_{ej} k_{dj} \overline{n}_j$	$k_{dj}\overline{n}_{j}n_{e}$	$-k_{dj}\overline{n}_{j}n_{e}$	гашение
6	0	$\eta_j A_j \overline{n}_j$	$-\eta_j A_j \overline{n}_j$	УФ-излучение
7	$Q_a$	0	0	ТГц-поглощение

Таблица 2. Коэффициенты балансных уравнений (5)

 $\Pi$ римечание. Обозначения:  $k_j$  с дополнительными индексами c,i,r,e и d— соответственно константы процессов упругих соударений, ионизации, рекомбинации, возбуждения и гашения,  $\tilde{k}_{ij}$ — константа ионизации из возбужденного состояния,  $I_j$ — энергия ионизации,  $E_{ej}$ — энергия эффективного перехода,  $\tilde{I}_j = I_j - E_{ej}$ — энергия ионизации из возбужденного состояния,  $\delta = 2m_e/m_i$ — постоянная обмена энергией,  $n_j = \underline{n}_j + \overline{n}_j$ — полная концентрация j-й компоненты плазмы,  $n_e = \sum_{j=1}^{jmax} Z_j n_j$ — концентрация электронов,  $Q_a$ — удельная мощность поглощения излучения ЛСЭ.

щением. Поскольку переходы между связанными состояниями не являются равновероятными и для большинства ионов коэффициенты Эйнштейна переходов из основной электронной конфигурации в возбужденные имеют выделенные максимумы в узком диапазоне энергий перехода, будем описывать один эффективный переход с усредненной энергией  $E_{ej}$  и суммарной частотой  $A_j$ :

$$E_{ej} = \sum_{l=1}^{l_{max}} \alpha_{jl} A_{jl} E_{ejl} / \sum_{l=1}^{l_{max}} \alpha_{jl} A_{jl},$$

$$A_j = \sum_{l=1}^{l_{max}} \alpha_{jl} A_{jl},$$
(6)

где индексы  $j=0,\ldots,j_{max}$  нумерует атомы и ионы  $Xe^{j+}$ , а индексы  $l=1,\ldots,l_{max}$  — переходы,  $A_{jl}$  — коэффициент Эйнштейна l-го перехода внутри j-го иона,  $E_{ejl}$  — энергия этого перехода,  $\alpha_{jl}$  — доля статистического веса нижнего энергетического уровня перехода в структуре основного состояния (подробнее см. разд. 3 работы [2]). Упрощенная таким образом схема элементарных процессов изображена на рис. 26. Для учета эффекта запирания излучения,

соответствующего эффективной линии (6), при расчете радиационных потерь из плазменного объема (s=6) мы используем модифицированную частоту переходов  $\hat{A}_j = \eta_j A_j$ , при этом коэффициент запирания излучения  $\eta_i$  определяется выражением

$$\eta_j = \theta_j / (\theta_j + \beta_j), \tag{7}$$

где  $\theta_j$  — вероятность того, что излученный j-м ионом фотон дойдет до границы разряда без поглощения, а  $\beta_j$  — вероятность гашения возбужденного иона электронным ударом, т. е. отношение частоты гашения к частоте переходов  $A_j$  [2,12,38].

Константы всех процессов получены усреднением их сечений по максвелловскому распределению электронов по скоростям. Это обусловлено доступностью части данных именно в такой форме, однако можно привести и физическое обоснование такого приближения. В обсуждаемых ниже примерах моделирования за 10 пс после начала импульса ЛСЭ в разряде достигается средняя концентрация электронов  $n_e \sim 10^{19}~{\rm cm}^{-3}$ . При таких концентрациях и средней энергии электронов порядка осцилляторной,  $\mathcal{E}_e \sim W \sim 100$  эВ, характерное время максвел-

лизации за счет кулоновских соударений не превышает 1 пс. Поэтому можно ожидать, что на развитой стадии разряда распределение электронов близко к максвелловскому. При пробое газа и в начале развития разряда распределение может значительно отклоняться от равновесного, однако максимумы сечений процессов, происходящих с нейтральными атомами и ионами невысокой кратности, лежат ниже осцилляторной энергии, поэтому усредненные значения констант элементарных процессов не зависят от деталей функции распределения. С другой стороны, максимумы сечений неупругих процессов для ионов с высокой кратностью ионизации, доминирующих на развитой стадии, смещаются в область высоких энергий, где отклонение функции распределения от равновесной может оказаться существенным даже в плотной плазме. Анализ подобных тонких эффектов выходит за рамки настоящей работы.

Итак, для описания разряда мы рассматриваем  $2j_{max} + 3$  обыкновенных дифференциальных уравнений (5), которые описывают эволюцию плазмы во времени независимо в каждой пространственной точке z. Неоднородность решений в пространстве определяется начальными условиями (распределением концентрации  $n_0$  струи нейтрального газа) и неоднородным профилем поглощения мощности излучения ЛСЭ (член  $Q_a$  в уравнении для  $\mathcal{E}_e$ ). Для расчета мощности поглощения будем решать балансные уравнения совместно с уравнениями Максвелла, которые позволят последовательно описать влияние плазмы на внешнее электромагнитное поле в условиях, когда концентрация электронов приближается к критическому значению. В нашей постановке электромагнитное поле представляет собой монохроматическую плоскую линейно-поляризованную ТЕМ-волну, распространяющуюся в неоднородной плоскослоистой среде, характеризуемой комплексной диэлектрической проницаемостью [27]

$$\varepsilon(t,z) = 1 - \frac{\omega_p^2(t,z)}{\omega^2 + \nu^2(t,z)} \left[ 1 - \frac{i\nu(t,z)}{\omega} \right], \quad (8)$$

где  $\omega$  — частота излучения,  $\omega_p^2=4\pi e^2 n_e/m_e$  — квадрат электронной ленгмюровской частоты,  $\nu$  — эффективная (суммарная) частота соударений электронов,

$$\nu(t,z) = \sum_{j=0}^{j_{max}} \left( (k_{cj} + k_{ij} + k_{ej} + k_{rj} n_e) \underline{n}_j + (k_{cj} + \widetilde{k}_{ij} + k_{dj}) \overline{n}_j \right).$$
(9)

Времена  $t_{em}$  так малы, что для отыскания распределения электромагнитных полей можно использо-

вать стационарные уравнения Максвелла для комплексных амплитуд:

$$\frac{dE_x}{dz} = i\frac{\omega H_y}{c}, 
\frac{dH_y}{dz} = i\omega \frac{\varepsilon E_x}{c},$$
(10)

где  $\varepsilon$  зависит от t как от параметра. Решая (10), определяем поглощаемую мощность в расчете на один электрон:

$$Q_a(t,z) = \frac{P_0}{\pi \lambda^2 n_e} \frac{d}{dz} \operatorname{Re} \left[ E_x H_y^* \right]. \tag{11}$$

В итоге уравнения (5) и (10) образуют замкнутую систему уравнений для моделирования динамики импульсного пространственно-неоднородного разряла.

Для анализа результатов моделирования введем интегральные энергетические характеристики разряда. Полная мгновенная мощность поглощения излучения ЛСЭ электронами разряда,  $P_a(t)$ , вычисляется как

$$P_a(t) = \pi \lambda^2 \int_{0}^{\infty} Q_a n_e dz, \qquad (12)$$

где  $q_a=\pi\lambda^2Q_an_e$  — линейная плотность мощности поглощения. Полная мгновенная мощность потерь на линейчатое излучение ионов,  $P_r$ , определяется интегралом:

$$P_r(t) = \pi \lambda^2 \int_0^\infty \sum_{j=0}^{m_{max}} \eta_j A_j E_{ej} \overline{\eta}_j dz.$$
 (13)

Для получения мощности излучения в целевом ЭУФ-диапазоне,  $P_{EUV}$ , необходимо взять аналогичный интеграл, но суммируя в (6) только те линии, длина которых лежит в диапазоне 11.2 нм  $\pm$  1%.

Система балансных уравнений (5) и уравнений Максвелла (10) решается численно. При решении уравнений (5) шаг по времени выбирается меньшим характерных времен всех элементарных процессов; в приведенных ниже расчетах он составляет 0.02 пс. Пространственный шаг сетки фиксирован и равен 1 мкм, что соответствует 20 узлам на длину волны электромагнитного поля  $\lambda=20$  мкм. На каждом шаге по времени профиль энерговыделения  $Q_a(t,z)$  определяется путем решения стационарных уравнений Максвелла (10) с текущей диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon(t,z)$ , полученной на предыдущем шаге по времени. Для решения уравнений Максвелла

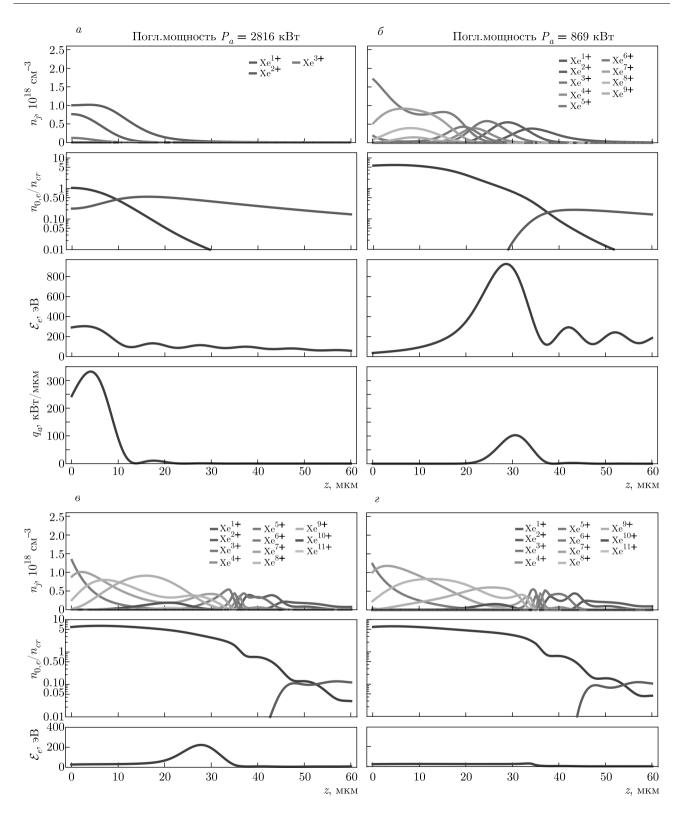


Рис. 3. (В цвете онлайн) Пространственные распределения параметров плазмы в моменты времени 7.25 пс (a), 20 пс (b), 40 пс (b) и 80 пс (b). Для каждой группы сверху вниз: концентрации ионов; концентрации электронов (синяя кривая) и нейтральных атомов (красная кривая), отнесенные к критической концентрации электронов; средняя энергия электронов; плотность поглощаемой мощности излучения для a и b. Параметры моделирования: концентрация нейтрального газа у сопла a0 a10 смa3, длина волны излучения ЛСЭ a30 мкм, мгновенная мощность излучения a40 МВт, длительность импульса a50 пс

используется метод с адаптивным пространственным шагом, обеспечивающий относительную точность решения не менее  $0.001\,\%$ ; при этом диэлектрическая проницаемость задается интерполяционной функцией с узлами на пространственной сетке с фиксированным шагом. В расчетах использовалась величина  $j_{max}=15$ , т. е. нам было достаточно учитывать первые 15 ионов ксенона; вклад ионов с более высокой кратностью ионизации в баланс энергии был пренебрежимо мал.

Перейдем к обсуждению результатов моделирования для базовых параметров ЛСЭ, заданных в последней строке табл. 1. На рис. 3 приведены распределения ключевых характеристик плазмы вдоль z в разные моменты времени. Развитие разряда в каждой пространственной точке следует сценарию, описанному в разд. 2. Вследствие этого в определенный момент времени  $t \approx 7\text{--}8$  пс в разряде появляется область закритической плазмы, которая начинает отражать падающее на нее излучение и остывать. Характерное распределение характеристик плазмы в пространстве в этот момент времени изображено на рис. За. Далее область закритической плазмы продолжает расширяться и к концу импульса занимает пространство от z = 0 (газовое сопло) до  $z \approx 30$  мкм. Характерное распределение характеристик плазмы в конце импульса изображено на рис. Зб. Излучение ионов с Z < 6 существенно запирается в объеме разряда, поэтому до появления ионов  $Xe^{6+}$  энергия электронов в основном тратится на ионизацию. Далее к потерям на ионизацию добавляются потери на излучение. К концу импульса их мощность достигает примерно 50 кВт, из которых 1 кВт — это излучение в диапазоне 11.2 нм  $\pm$  1 %. После завершения импульса ТГц-излучения в электронах плазмы запасена еще значительная энергия, которой хватает на то, чтобы обеспечить заметное количество ионов Xe<sup>10+</sup>. Это повышает долю целевого ЭУФизлучения, которая через 20 пс после окончания импульса составляет уже около 10% всего излучения, при этом мгновенная мощность излучения достигает 25 кВт. Характерное распределение характеристик плазмы в этот момент времени изображено на рис. Зв. Через 60 пс после окончания импульса большая часть энергии электронов оказывается потраченной. Остывшая плазма перестает эффективно излучать на длине волны 11.2 нм  $\pm 1\%$ . Характерное распределение характеристик плазмы изображено на рис. 3г.

На рис. 4 приведены интегральные энергетические характеристики разряда (мощность поглощения излучения ЛСЭ и мощность спонтанного излучения

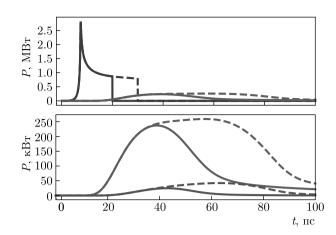


Рис. 4. (В цвете онлайн) Мгновенная мощность поглощения излучения ЛСЭ (синие линии), мощность линейчатого излучения плазмы во всем диапазоне (красные линии) и в целевом ЭУФ-диапазоне  $11.2\,$  нм  $\pm\,1\,$ % (фиолетовые линии). Верхний и нижний графики отличаются только масштабом вертикальной оси. Сплошные линии соответствуют длительности ТГц-импульса  $20\,$  пс, штриховые —  $30\,$  пс. Остальные параметры моделирования те же, что и для рис.  $30\,$ 

плазмы во всем диапазоне и в целевом ЭУФ-диапазоне) в зависимости от времени. Если проинтегрировать мощность излучения по времени, получим, что импульс излучения ЛСЭ ( $\lambda=20$  мкм,  $t_p=20$  пс,  $P_0=10$  МВт) приводит к генерации 0.7 мкДж ЭУФ-излучения в целевом диапазоне 11.2 нм  $\pm 1\,\%$  в телесный угол  $4\pi$ . При частоте следования импульсов в 50 МГц, что соответствует средней мощности излучения ЛСЭ 10 кВт, средняя мощность ЭУФ-излучения в диапазоне 11.2 нм  $\pm 1\,\%$  составит 35 Вт, а КПД генерации ЭУФ-излучения — 0.35 %. При этом мощность УФ-излучения плазмы во всем диапазоне не меньше 350 Вт.

В заключение приведем расчет, подтверждающий сделанное выше утверждение, что новосибирский ЛСЭ в том варианте (NovoFEL-1), в котором он сейчас доступен в центре коллективного пользования (ЦКП), не подходит для демонстрации ксенонового разряда, излучающего в целевом ЭУФ-диапазоне. На рис. 5 изображено распределение характеристик плазмы, устанавливающееся к концу типичного импульса NovoFEL-1. Начальная концентрация нейтрального газа в окрестности газового сопла,  $n_0(0,0)=2.5\cdot 10^{18}~{\rm cm}^{-3}$ , выбрана такой, чтобы за время импульса успевала развиться электронная лавина. Тем не менее энергии, запасенной в электронах, не хватает для полной ионизации нейтральных

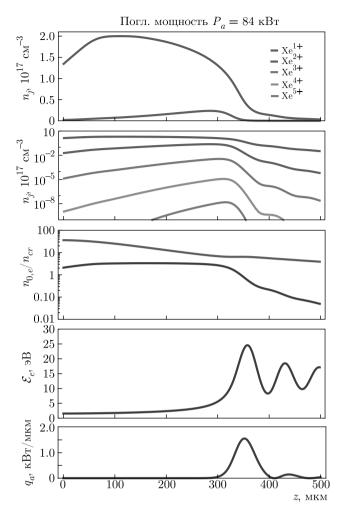


Рис. 5. (В цвете онлайн) Пространственные распределения параметров плазмы в момент времени 75 пс. Сверху вниз: концентрации ионов; концентрации ионов в логарифмическом масштабе; концентрация электронов (синяя кривая) и нейтральных атомов (красная кривая), отнесенные к критической концентрации электронов; средняя энергия электронов; плотность поглощаемой мощности излучения. Параметры моделирования: концентрация нейтрального газа у сопла  $2.5 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ , длина волны излучения  $\Pi$ СЭ  $\Pi$ 30 мкм, мгновенная мощность излучения  $\Pi$ 37 мкм, игновенная мощность излучения  $\Pi$ 48 гельность импульса  $\Pi$ 5 пс

атомов, остающихся в области закритической плазмы. Соответственно, концентрация многозарядных ионов с Z>2 ничтожно мала, поэтому излучение в целевом ЭУФ-диапазоне практически отсутствует. Остальное ЭУФ-излучение разряда к концу импульса устанавливается на уровне  $0.7~{\rm kBT}$  мгновенной мощности. В основном это линии, длина волны которых лежит в районе  $50-80~{\rm kB}$  мм. Средняя мощность излучения плазмы во всем ЭУФ-диапазоне может быть оценена примерно в  $10~{\rm BT}$  при частоте следо-

вания импульсов ЛСЭ  $5.6~\mathrm{MГ}$ ц. Заметим, что характерные времена излучения линий ионов с малыми Z сравнимы с временами разлета плазмы, что нарушает приближения, сделанные в нашей модели. Это может повлиять на оценку средней мощности  $ЭУ\Phi$ -излучения, но не меняет вывода об отсутствии  $ЭУ\Phi$ -излучения в целевом диапазоне.

#### 4. ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для обеспечения генерации ЭУФ-излучения в плазме ксенона подходят ЛСЭ с длиной волны излучения  $\lambda \sim 20$  мкм, мгновенной мощностью  $P_0 \sim 1\text{--}10$  МВт и длительностью импульса не менее 20 пс. Основное преимущество ТГц-диапазона по сравнению с ИК-диапазоном, покрываемым оптическими лазерами, — возможность более простого согласования излучения с плазменным образованием, приводящая к эффективному вкладу мощности излучения в неравновесные электроны. При этом формируется плазма, оптимальная с точки зрения выхода ЭУФ-излучения.

Минусом рассмотренной схемы является малая длина импульса ТГц-излучения, характерная для современных ЛСЭ. В этой связи рационально попытаться упростить развитие электронной лавины на начальной стадии разряда, обеспечив как можно более эффективную предионизацию до импульса ЛСЭ. Это позволит увеличить интервал времени, в течении которого короткий импульс излучения ЛСЭ взаимодействует с плазмой многозарядных ионов. Для оценки эффекта на рис. 4 штриховыми линиями приведен расчет, соответствующий увеличению длительности ТГц-импульса с 20 до 30 пс. Увеличение длительности импульса в полтора раза приведет к увеличению суммарной энергии ЭУФ-излучения в три раза. Такая высокая эффективность связана с тем, что в течение дополнительных 10 пс излучение взаимодействует с плазмой, в которой много ионов с высоким зарядом (вплоть до  $Xe^{6+}$ ). Предионизация плазмы из газового состояния может осуществляться, например, лазером оптического диапазона.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-90019). Один из авторов (И. С. А.) благодарит за персональную поддержку Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 18-1-5-12-1).

#### ЛИТЕРАТУРА

- V. Bakshi, EUV Lithography, SPIE Press, Bellingham, Washington (2018).
- I. S. Abramov, E. D. Gospodchikov, and A. G. Shalashov, Phys. Rev. Appl. 10, 034065 (2018).
- C. Wagner and N. Harned, Nature Photonics 4, 24 (2010).
- N. I. Chkhalo and N. N. Salashchenko, AIP Advances 3, 082130 (2013).
- S. S. Churilov, Y. N. Joshi, J. Reader, and R. R. Kildiyarova, Phys. Scripta 70, 126 (2004).
- J. White, P. Hayden, P. Dunne et al., J. Appl. Phys. 98, 113301 (2005).
- 7. D. C. Brandt, I. Fomenkov, and J. Stewart, Proc. SPIE 11323, EUV Lithography XI, 113230W (2020).
- 8. H. Mizoguchi, H. Nakarai, T. Abe et al., Proc. SPIE 11323, EUV Lithography XI, 113230X (2020).
- 9. N. I. Chkhalo, S. A. Garakhin, A. Ya. Lopatin et al., AIP Advances 8, 105003 (2018).
- S. G. Kalmykov, P. S. Butorin, and M. E. Sasin, J. Appl. Phys. 126, 103301 (2019).
- Y. Izawa, K. Nishihara, H. Tanuma et al., J. Phys.: Conf. Ser. 112, 042047 (2008).
- **12**. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
- **13**. A. G. Shalashov, A. V. Vodopyanov, I. S. Abramov et al., Appl. Phys. Lett. **113**, 153502 (2018).
- M. Thumm, J. Infrared Millim. Terahertz Waves 41, 1 (2020).
- M. Yu. Glyavin, A. G. Luchinin, and G. Yu. Golubiatnikov, Phys. Rev. Lett. 100, 015101 (2008).
- V. L. Bratman, Yu. K. Kalynov, and V. N. Manuilov, Phys. Rev. Lett. 102, 245101 (2009).
- **17**. А. Г. Шалашов, И. С. Абрамов, С. В. Голубев, Е. Д. Господчиков, ЖЭТФ **150**, 254 (2016).
- **18**. И. С. Абрамов, Е. Д. Господчиков, А. Г. Шалашов, Изв. вузов, Радиофизика **58**, 1022 (2015).
- A. G. Shalashov, S. V. Golubev, I. S. Abramov, and E. D. Gospodchikov, AIP Conf. Proc. 1771, 070001 (2016).

- **20**. I. S. Abramov, E. D. Gospodchikov, and A. G. Shalashov, Phys. Plasmas **24**, 073511 (2017).
- M. Y. Glyavin, S. V. Golubev, I. V. Izotov et al., Appl. Phys. Lett. 105, 174101 (2014).
- 22. Table of Parameters for IRTHz FELs Worldwide, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf Official Website (2020), https://www.hzdr.de/FEL table
- **23**. Н. А. Винокуров, О. А. Шевченко, УФН **188**, 493 (2018).
- Ю. П. Райзер, Лазерная искра и распространение разрядов, Наука, Москва (1974).
- **25**. *Физическая энциклопедия*, т. 2, под ред. А. М. Прохорова, Советская энциклопедия, Москва (1990), с. 552.
- V. M. Povyshev, A. A. Sadovoy, V. P. Shevelko et al., JINR Comm. E9-2001-148 (2001).
- **27**. В. Л. Гинзбург, *Распространение электромагнитных волн в плазме*, Физматлит, Москва (1960).
- **28**. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Интеллект, Долгопрудный (2009).
- 29. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Физматгиз, Москва (1963).
- G. N. Kulipanov, E. G. Bagryanskaya, E. N. Chesnokov et al., IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol. 5, 798 (2015).
- **31**. О. А. Шевченко, В. С. Арбузов, Н. А. Винокуров и др., Изв. вузов, Радиофизика **59**, 671 (2016).
- **32.** J. D. Huba, NRL: Plasma Formulary No. NRL/PU/ 6790-04-477 (2004).
- **33**. R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Univ. of California Press (1981).
- **34**. H. Van Regemorter, Astrphys. J. **136**, 906 (1962).
- D. H. Sampson and H. L. Zhang, Phys. Rev. A 45, 1556 (1992).
- D. F. Register, L. Vuskovic, and S. Trajmar, J. Phys. B 19, 1685 (1986).
- T. Koizumi, E. Shirakawa, and I. Ogawa, J. Phys. B 19, 2331 (1986).
- **38**. J. P. Apruzese, J. Quantitative Spectrosc. Rad. Transfer **34**, 447 (1985).

# ЛАЗЕРНАЯ ИЗОТОПНО-СЕЛЕКТИВНАЯ ИК-ДИССОЦИАЦИЯ МОЛЕКУЛ С НЕБОЛЬШИМ ИЗОТОПИЧЕСКИМ СДВИГОМ В СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ СКАЧКА УПЛОТНЕНИЯ

 $\Gamma$ . H. Макаров $^*$ , A. H. Петин

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

> Поступила в редакцию 26 августа 2020 г., после переработки 10 сентября 2020 г. Принята к публикации 17 сентября 2020 г.

Представлены результаты исследований лазерной изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул (на примере  ${
m CF_3Br}$  и  ${
m CF_2HCl}$ ), характеризующихся небольшим (менее  $0.25~{
m cm}^{-1}$ ) изотопическим сдвигом в спектрах ИК-поглощения, в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения (ударной волны), формирующегося перед твердой поверхностью при падении на нее интенсивного импульсного газодинимически охлажденного молекулярного потока. Исследования проводились с использованием для формирования молекулярного потока и скачка уплотнения как чистых газов  ${
m CF_3Br}$  и  ${
m CF_2HCl}$ , так и смеси  ${
m CF_3Br/CF_2HCl}$  при соотношении давлений 1/1. Установлено, что эффективность диссоциации молекул в скачке уплотнения, а также в падающем на поверхность потоке существенно больше, чем в невозмущенном потоке. Показано (на примере  ${\rm CF_3Br}$ ), что при возбуждении молекул в скачке уплотнения и в падающем на поверхность потоке сильно (в 5-10 раз) увеличивается выход диссоциации по сравнению с выходом диссоциации в невозмущенном потоке и значительно (в 3-5 раз) уменьшается порог диссоциации. Установлено также, что в случае облучения молекул в смеси имеет место взаимное сильное увеличение эффективности их диссоциации по сравнению со случаем облучения молекул в отдельности, что позволяет проводить изотопно-селективную лазерную ИК-диссоциацию молекул при небольших плотностях энергии возбуждения ( $\Phi \le 1.0$ – $1.5~\mathrm{Дж/cm}^2$ ) и тем самым увеличить селективность процесса. Это показано на примере селективной по изотопам хлора и брома диссоциации указанных молекул в скачке уплотнения. Получены коэффициенты обогащения  $K_{enr}(^{35}\mathrm{Cl})^{37}\mathrm{Cl})=0.90\pm0.05$  в остаточном газе  ${
m CF_2HCl}$  и  $K_{enr}(^{79}{
m Br}/^{81}{
m Br})=1.20\pm0.09$  в формировавшемся продукте  ${
m Br_2}$  при облучении соответственно смеси молекул  ${\rm CF_2HCl/CF_3Br}=1/1$  и молекул  ${\rm CF_3BrCO_2}$  лазером на линии 9R(30) (на частоте 1084.635 см $^{-1}$ ) при плотности энергии  $\Phipprox 1.3\,$  Дж/см $^2$ . Обсуждается применение полученных результатов для лазерного разделения изотопов на практике.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020085

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Сегодня проводится много исследований с использованием молекулярных и кластерных пучков, направленных на разработку низкоэнергетических методов молекулярного лазерного разделения изотопов (МЛРИ) (molecular laser isotope separation, MLIS) [1–18]. Основной целью этих исследований является поиск эффективных и экономичных методов

разделения изотопов урана, а также других тяжелых элементов. Из большого числа предложенных на сегодня лазерных методов разделения изотопов наилучшие результаты были получены с применением метода инфракрасной (ИК) многофотонной диссоциации молекул излучением мощных импульсных СО<sub>2</sub>-лазеров [19–25]. На основе этого метода в России (в г. Калининграде) в недавнем прошлом было открыто и успешно функционировало производство по разделению изотопов углерода с использованием молекул СГ<sub>2</sub>HCl (фреона-22) [23–25]. Развитие этого метода для разделения изотопов тяжелых элементов, в том числе урана, сдерживается из-за

<sup>\*</sup> E-mail: gmakarov@isan.troitsk.ru

высокой энергоемкости процесса, отсутствия высокоэффективных и мощных лазерных систем и ряда других факторов [1,9]. Так, для диссоциации молекулы UF<sub>6</sub> необходимо поглощение около 40–50 квантов ИК-излучения с длиной волны 16 мкм, т.е. поглощение энергии около 3.2–4.0 эВ. Поэтому актуальны и востребованы исследования, направленные на разработку низкоэнергетических методов МЛРИ (с энергией активации процесса не более 0.5–1 эВ [1]), а также альтернативных им методов.

В качестве низкоэнергетических методов МЛРИ рассматриваются хорошо сегодня изученные методы изотопно-селективного подавления кластеризации молекул и изотопно-селективной лиссоциации небольших ван-дер-ваальсовых кластеров [1,2,5-16], а также ряд других, менее изученных методов [1,3,4]. В настоящее время в США разрабатывается технология разделения изотопов урана SILEX (separation of isotopes by laser excitation) [26-28]. Принципы этой технологии не раскрываются, однако с большой вероятностью можно полагать, что в ее основе лежат низкоэнергетические процессы [29]. Технология SILEX, по утверждениям разработчиков, применима также для разделения изотопов других элементов (кремния, бора, серы, углерода, кислорода и др.) [1,26].

В работах [1,30] 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 интенсивного импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока (пучка). Этот подход был предложен и развит в работах [31–35], в которых в неравновесных термодинамических условиях исследовалась селективная ИК-диссоциация молекул  $SF_6$  [31–34] и  $CF_3I$  [35] (см. обзор [36]).

В указанных работах [31–36] установлено, что в случае возбуждения молекул  $SF_6$  [31–34] и  $CF_3I$  [35, 36] в неравновесных условиях формирующегося перед поверхностью скачка уплотнения, а также в падающем на поверхность потоке достигаются высокие значения выхода продуктов и селективности при сравнительно низкой плотности энергии возбуждения (менее  $1.5-2.0~\text{Дж/cm}^2$ ). Такие плотности энергии значительно (в 3-5~раз) меньше плотностей энергии, необходимых для диссоциации молекул в невозмущенных струях и потоках. Поэтому, хотя в основе развитого в работах [31–35] подхода лежит диссоциация молекул, из-за умеренной плот-

ности энергии, необходимой для этого, его можно рассматривать как альтернативу низкоэнергетическим методам МЛРИ [1,30].

В случае молекул SF<sub>6</sub> и CF<sub>3</sub>I изотопические сдвиги в спектрах ИК-поглощения возбуждаемых лазером колебаний  $\nu_3$  (SF<sub>6</sub>) и  $\nu_1$  (CF<sub>3</sub>I) составляют соответственно  $\Delta \nu_{is} \approx 17~{\rm cm}^{-1}$  (относительно изотопов  $^{32}{
m S}$  и  $^{34}{
m S}$ ) [37,38] и  $\Delta \nu_{is} \approx 27~{
m cm}^{-1}$  (относительно изотопов  $^{12}$ С и  $^{13}$ С) [39]. Эти величины значительно превышают ширины полос ИК-поглощения молекул в охлажденном молекулярном потоке. Принципиально другая ситуация реализуется в случае молекул, имеющих небольшой изотопический сдвиг в спектрах ИК-поглошения возбуждаемых дазером колебаний, когда спектры поглощения разных изотопомеров 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 нами были выполнены эксперименты по изотопно-селективной ИК-диссоциации в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения других хорошо изученных в плане многофотонного ИК-возбуждения и диссоциации молекул [19], а именно, CF<sub>3</sub>Br и CF<sub>2</sub>HCl. Некоторые результаты, полученные с этими молекулами, приведены соответственно в работах [17] и [18]. Указанные молекулы характеризуются очень малыми (менее  $0.25 \text{ см}^{-1}$ ) изотопическими сдвигами в спектрах ИК-поглощения возбуждаемых СО2-лазером колебаний по отношению к изотопам соответственно брома и хлора. Так, изотопический сдвиг в спектре поглощения колебания  $\nu_1 \approx 1085 \text{ см}^{-1}$  [40] молекул CF<sub>3</sub>Br составляет  $\Delta_{is} \approx 0.248 \text{ см}^{-1}$  [40], а изотопический сдвиг в спектре поглощения колебания  $u_3 \approx 1109 \text{ см}^{-1} [41] \text{ молекул } \text{CF}_2\text{HCl} - \Delta_{is} \approx$  $\approx 0.048~{
m cm}^{-1}$  [41]. Поэтому полученные с этими молекулами результаты представляют особый интерес в контексте выяснения возможности применения рассматриваемого подхода для разделения изотопов в молекулах, имеющих небольшой изотопический сдвиг в спектрах возбуждаемых колебаний, что характерно для молекул, содержащих изотопы тяжелых элементов. Например, для изотопомеров  $^{235}{
m UF}_{6}$  и  $^{238}{
m UF}_{6}$  изотопический сдвиг в спектре колебания  $\nu_3 \approx 627 \text{ см}^{-1} [42, 43]$  также мал и составляет около  $0.65 \text{ см}^{-1}$  [42, 43].

В данной работе нами представлены результаты более детального исследования лазерной ИК-диссо-

циации указанных молекул в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения и проведен их анализ. Подробно описаны экспериментальная установка и метод исследования. Приведены результаты измерений основных характеристик изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул выхода и селективности диссоциации — при облучении молекул в скачке уплотнения, а также в потоке, падающем на поверхность, и в невозмущенном потоке. Представлены результаты исследований по взаимному сильному увеличению эффективности изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул (на примере CF<sub>2</sub>HCl и CF<sub>3</sub>Br) в случае их облучения резонансным лазерным излучением в бимолекулярной смеси по сравнению со случаем их облучения в отдельности. Обсуждаются возможные причины сильного взаимного влияния на возбуждение и диссоциацию молекул. Подчеркивается значение наблюдаемого эффекта для лазерного разделения изотопов на практике. Показано, что указанный эффект открывает возможность проводить изотопноселективную ИК-лиссопиацию молекул при небольших  $(1.0-1.5 \, \text{Дж/см}^2)$  плотностях энергии возбуждения и тем самым увеличить селективность процесса, что также продемонстрировано в работе.

#### 2. НЕРАВНОВЕСНЫЕ 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,  $\tau_{tr} \leq \tau_{rot} \leq \tau_{vib}$ . Степень отклонения от локального равновесия зависит от числа столкновений  $z_{col}$ , необходимых для релаксации данной степени свободы. Для многоатомных молекул обычно выполняется соотношение  $z_{tr} \leq z_{rot} \leq z_{vib}$ . Поэтому для эффективных температур в потоке реализуется [44] условие

$$T_{1,tr} \le T_{1,rot} \le T_{1,vib}. \tag{1}$$

В скачке уплотнения [45, 46], который формируется при взаимодействии интенсивного импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока с поверхностью, из-за разницы в скоростях поступательной, вращательной и колебательной релаксаций [47] реализуются обратные соотношению (1) неравновесные условия:

$$T_{2.tr} \ge T_{2.rot} \ge T_{2.vib}. \tag{2}$$

При этом из-за большого времени колебательно-поступательной релаксации (например,  $\tau_{V-T}p \approx 135~{\rm mkc}\cdot{\rm Торр}$  для  ${\rm CF_3Br}$  [48],  $\tau_{V-T}p \approx 65~{\rm mkc}\cdot{\rm Торр}$  для  ${\rm CF_2HCl}$  [49]) 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 значительно выше, чем в невозмущенном потоке:

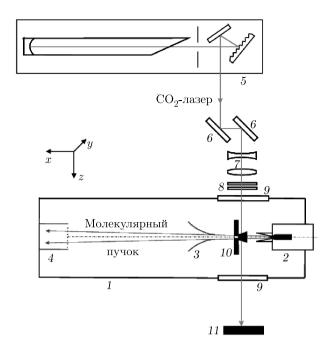
$$T_{2.tr} > T_{1.tr}, \quad T_{2.rot} > T_{1.rot}.$$
 (3)

Таким образом, в скачке уплотнения создаются новые неравновесные условия, которые характеризуются тем, что колебательная температура молекул существенно меньше поступательной и вращательной температур. Именно в таких условиях нами в данной работе исследовалась селективная диссоциация молекул  $CF_3Br$  и  $CF_2HCl$ . Ранее [34] на примере  $SF_6$  нами было показано, что колебательная температура значительно сильнее влияет на формирование селективности диссоциации молекул, чем вращательная.

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

#### 3.1. Экспериментальная установка

Схема установки показана на рис. 1. Она включает высоковакуумную камеру с импульсным источником молекулярного пучка, квадрупольный массспектрометр КМС-01/250 для детектирования частиц пучка и перестраиваемый по частоте импульсный СО<sub>2</sub>-лазер с энергией в импульсе до 4 Дж для возбуждения молекул. Импульс излучения лазера состоял из пика длительностью около 100 нс (на полувысоте) и хвостовой части длительностью около  $0.5 \, \text{мкс}$ , 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. Верхний предел диапазона регистрируемых массовых чисел масс-спектрометра m/z = 300 а.е.м. В качестве регистратора ионов в масс-спектрометре использовался вторичный электронный умножитель



**Рис. 1.** Схема экспериментальной установки: 1 — высоковакуумная камера; 2 — импульсное сопло; 3 — коническая диафрагма; 4 — квадрупольный масс-спектрометр; 5 — импульсный  $\mathrm{CO}_2$ -лазер; 6 — зеркала; 7 — цилиндрические линзы; 8 — ослабители ИК-излучения; 9 — окна из  $\mathrm{NaCl}$ ; 10 — подложка с усеченным конусом для формирования скачка уплотнения; 11 — поглотитель

ВЭУ-6. Камеры источника молекулярного пучка и квадрупольного масс-спектрометра откачивались турбомолекулярными насосами до давления не более соответственно  $10^{-5}$  Торр и  $10^{-7}$  Торр.

Молекулярный пучок CF<sub>3</sub>Br (либо CF<sub>2</sub>HCl или смеси молекул CF<sub>2</sub>HCl/CF<sub>3</sub>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°. Частота повторения импульсов сопла была 0.7 Гц. 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, расположенным 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. ИК-излучение лазера с помощью медных зеркал и двух фокусирующих цилиндрических линз с фокусными расстояниями 240 и 180 мм фокусировалось и вводилось в камеру молекулярного пучка через окно из NaCl.

Лазерное излучение пересекало молекулярный пучок под углом примерно 90°. Размеры лазерного пучка в области пересечения с молекулярным пучком составляли около 8×6 мм<sup>2</sup>. Расстояние от сопла до середины зоны облучения молекулярного потока составляло 3.5 см. С целью обнаружения и изучения селективности процесса диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br CO<sub>2</sub>-лазер был настроен на частоту генерации  $1084.635 \text{ см}^{-1}$  (линия излучения 9R(30)). Эта линия излучения лазера попадает между Q-ветвями спектра поглощения колебания  $\nu_1$  молекул  $\mathrm{CF_3}^{79}\mathrm{Br}$  $(1084.769 \text{ cm}^{-1})$  и  $\text{CF}_3^{81}\text{Br}$   $(1084.521 \text{ cm}^{-1})$  [40] Отстройки линии лазера от Q-ветвей составляют соответственно  $0.134~{\rm cm}^{-1}$  и  $0.114~{\rm cm}^{-1}$ . Указанная линия генерации лазера сильно поглощается также молекулами CF<sub>2</sub>HCl; она попадает в Р-ветвь колебания  $\nu_3$  молекулы. Отстройка этой линии от Q-ветви колебания  $\nu_3$  CF<sub>2</sub>HCl составляет около 24.4 см<sup>-1</sup> [41]. Для ослабления энергии лазера использовались плоскопараллельные пластинки из СаF<sub>2</sub>. Настройка частоты генерации СО<sub>2</sub>-лазера осуществлялась по линиям поглощения аммиака с помощью оптико-акустического приемника. Из-за сравнительно небольшой апертуры лазерного пучка в зоне пересечения с молекулярным потоком облучению подвергалась примерно 1/20 часть (вдоль направления оси x) потока.

В экспериментах с молекулярным потоком, падающим на поверхность, на расстоянии x = 50 мм от сопла располагалась перпендикулярно направлению потока полированная подложка из дюралюминия толщиной 6 мм и диаметром 50 мм. В центре подложки имелось полированное конусное отверстие с диаметром на входе 1.2 мм (со стороны сопла) и 5.0 мм на выходе. При падении интенсивного импульсного молекулярного потока на эту пластинку перед ней формировался скачок уплотнения (ударная волна) [45, 46] с неоднородными, нестационарными и неравновесными условиями [32, 33]. Характерный размер фронта скачка уплотнения, который по порядку величины равен длине свободного пробега молекул [45, 46], в условиях рассматриваемых экспериментов составлял 5-7 мм [32, 33, 35]. 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 [32, 36] и попадали в ионизатор масс-спектрометра.

#### 3.2. Метод исследования

При лазерной ИК-диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br образуются радикалы CF<sub>3</sub> и атомы Br, а конечными продуктами диссоциации и последующих химических реакций являются молекулы  $C_2F_6$  и  $Br_2$  [50]. При лазерной ИК-диссоциации молекул CF<sub>2</sub>HCl образуются радикалы CF<sub>2</sub> и молекулы HCl. В результате последующей рекомбинации радикалов СГ2 образуются молекулы С<sub>2</sub>F<sub>4</sub> [51]. Энергия диссоциации молекул  $CF_3$ Br составляет  $66.9 \pm 3.0$  ккал/моль [52]. Энергия диссоциации молекул СF<sub>2</sub>HCl значительно меньше, чем у молекул CF<sub>3</sub>Br. Она составляет  $47.9 \pm 4.0$  ккал/моль [52]. Отметим, что обе молекулы включают в себя изотопомеры: первая — изотопомеры CF<sub>3</sub><sup>79</sup>Br (с содержанием в природе около 50.56%) и  $\mathrm{CF_3}^{81}\mathrm{Br}$  (с содержанием около 49.44%), а вторая — изотопомеры CF<sub>2</sub>H<sup>35</sup>Cl (с содержанием по хлору 75 %) и  $CF_2H^{37}Cl$  (25 %).

Селективность диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br относительно изотопов брома определялась нами на основе измерений коэффициента обогащения в продукте Вг2. В экспериментах измерялись ионные сигналы  $^{79}$ Br $^{79}$ Br $^+$ ,  $^{79}$ Br $^{81}$ Br $^+$ ,  $^{81}$ Br $^{81}$ Br $^+$  (m/z = 158, 160, 162), возникающие в масс-спектре в результате облучения молекулярного потока лазером. Отношение концентраций атомов  $^{79}{\rm Br}$  к атомам  $^{81}{\rm Br}$ в образовавшемся продукте  $Br_2 (R_L = {}^{79}Br/{}^{81}Br)$ сопоставлялось с аналогичным отношением концентраций изотопов брома в необлученном молекулярном газе CF<sub>3</sub>Br. Исходя из процентного содержания изотопомеров  ${\rm CF_3Br}$  в природе  $(50.56\,\%\,{\rm CF_3}^{79}{\rm Br}$ и 49.44% CF<sub>3</sub><sup>81</sup>Br), отношение концентраций изотопов брома в необлученном газе CF<sub>3</sub>Br составляет  $R_0 = {}^{79}{\rm Br}/{}^{81}{\rm Br} \approx 1.023$ . С целью более точного определения отношения концентраций изотопов брома в формирующемся продукте Br<sub>2</sub> экспериментально измеренные ионные массовые пики  $^{79} \mathrm{Br}^{79} \mathrm{Br}^{+}$ ,  $^{79} \mathrm{Br}^{81} \mathrm{Br}^{+}$  и  $^{81} \mathrm{Br}^{81} \mathrm{Br}^{+}$  аппроксимировались нами гауссовыми функциями. Проводилось также интегрирование ионных сигналов в диапазоне указанных массовых пиков. Полученные обоими методами результаты хорошо совпадали между собой. Коэффициент обогащения в продукте Br<sub>2</sub> определялся как

$$K_{enr} \left(^{79} \text{Br} / ^{81} \text{Br} \right) = \frac{R_L}{R_0} = \frac{\left(^{79} \text{Br} / ^{81} \text{Br} \right)_{in \text{Br}_2}}{\left(^{79} \text{Br} / ^{81} \text{Br} \right)_{in \text{CF}_3 \text{Br}}}.$$
 (4)

Выходы диссоциации  $\beta_{35}$  и  $\beta_{79}$  молекул  ${\rm CF_2HCl}$  и  ${\rm CF_3Br}$  определялись на основе измерений интенсивности времяпролетных спектров соответственно молекулярного иона  ${\rm CF_2H^{35}Cl^+}$  (m/z=86) и ионного фрагмента  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br^+}$  (m/z=129). Времяпролетные спектры указанных ионов измерялась как в отсутствие возбуждения молекул в формирующемся перед поверхностью скачке уплотнения, так и при их возбуждении лазером. Так, в случае  ${\rm CF_2HCl}$ 

$$S_L = S_0(1 - \beta_{35}\Gamma),\tag{5}$$

где  $S_0$  и  $S_L$  — времяпролетные ионные сигналы  $\mathrm{CF}_2\mathrm{H}^{35}\mathrm{Cl}^+$  соответственно в отсутствие возбуждения молекул и при их возбуждении лазером,  $\Gamma$  — отношение облучаемого объема ко всему объему молекулярного потока. В экспериментах мы анализировали с помощью масс-спектрометра состав лишь облучаемой лазерным излучением части молекулярного потока. Поэтому в нашем случае реализовывалось условие  $\Gamma=1$ .

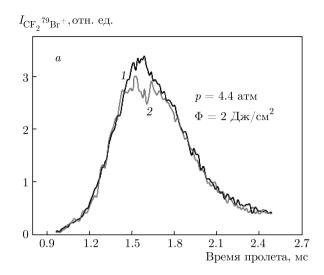
Коэффициент обогащения  $K_{enr}(^{35}\mathrm{Cl})^{37}\mathrm{Cl})$  в остаточном после облучения газе  $\mathrm{CF_2HCl}$  (изотопом  $^{35}\mathrm{Cl}$  по отношению к изотопу  $^{37}\mathrm{Cl})$  определялся как отношение концентраций изотопов  $^{35}\mathrm{Cl}$  и  $^{37}\mathrm{Cl}$  в остаточном после облучения газе  $\mathrm{CF_2HCl}$  к аналогичному отношению концентраций изотопов хлора в исходном (природном) газе  $\mathrm{CF_2HCl}$  из соотношения

$$K_{enr} (^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}) = \frac{1 - \beta_{35}}{1 - \beta_{37}}.$$
 (6)

На основе соотношений, аналогичных соотношениям (5) и (6), определялись также выход диссоциации  $\beta_{79}$  и коэффициент обогащения  $K_{enr}(^{79}{\rm Br}/^{81}{\rm Br})$  в остаточном после облучения газе CF<sub>3</sub>Br.

Отношение концентраций атомов  $^{79}{\rm Br}$  к атомам  $^{81}{\rm Br}$  в образовавшемся продукте  ${\rm Br_2}$  при каждой фиксированной плотности энергии возбуждающего излучения определялось в результате усреднения десяти циклов измерений интенсивностей указанных выше ионных пиков молекулярного брома. Отношение концентраций изотопов хлора в остаточном газе  ${\rm CF_2HCl}$  определялось путем усреднения пяти измеренных масс-спектров.

Синхронизация импульса лазерного излучения с импульсом молекулярного пучка контролировалась по временному положению максимума амплитуды «выжигания» провала в ионных сигналах  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br}^+$  или  ${\rm CF_2}^{35}{\rm Cl}^+$  (рис. 2).



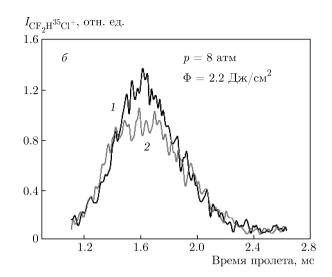


Рис. 2. (В цвете онлайн) Временные зависимости величин ионных сигналов  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br}^+$  (a) и  ${\rm CF_2H^{35}Cl^+}$  (b) без облучения молекулярного потока в скачке уплотнения (a) и в случае облучения  ${\rm CO_2}$ -лазером (a) на линии a0 (a1) (на частота a1084.635 смa1) при плотностях энергии a2 Дж/смa2 (a2) и a2.2 Дж/смa2 (a6). Давление a3 вгана соплом a4 атм (a6). Давление a4 смеси a5 вгана соплом a6 атм (a6). Длительности импульсов открывания сопла a6 мкс (a7) и 475 мкс (a8) и 475 мкс (a9) и 475 мкс (a

Эксперименты проводились в режиме онлайн, что позволяло получать информацию о диссоциации молекул и образующихся продуктах в каждом отдельном импульсе возбуждения. Основной целью работы было исследование возможности реализации селективной относительно изотопов брома и хлора диссоциации молекул  $CF_3Br$  и  $CF_2HCl$  с использованием нового подхода. В рамки работы входило измерение зависимостей выхода и селективности диссоциации молекул  $CF_3Br$  и  $CF_2HCl$  как в чистом газе, так и в бимолекулярной смеси от плотности энергии возбуждающего излучения при облучении молекул в невозмущенном потоке, а также в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения.

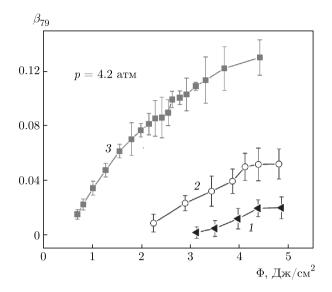
#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

### 4.1. Изотопно-селективная диссоциация молекул ${ m CF_3Br}$

На рис. 2a показаны временные зависимости (времяпролетные спектры) ионного сигнала  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br}^+$  без облучения молекулярного потока и при его облучении лазерным импульсом на линии 9R(30) (на частоте  $1084.635~{\rm cm}^{-1}$ ) при плотности энергии возбуждающего излучения  $2.0~{\rm Дж/cm}^2$ . Давление газа над соплом  $4.4~{\rm atm}$ . Видно, что при облучении потока лазерным импульсом во временной зависимости молекулярного ионного сигнала  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br}^+$  «выжигается» провал. Глубина прова-

ла, равная выходу диссоциации молекул CF<sub>3</sub><sup>79</sup>Br, зависит от плотности энергии возбуждающего излучения и определяется на основе приведенного выше соотношения (5). В случае возбуждения молекул в невозмущенном потоке по положению и ширине провала можно оценить облучаемую лазером часть молекулярного потока. При возбуждении молекул в падающем потоке, а также в скачке уплотнения ширина провала увеличивается из-за перемешивания возбужденных и невозбужденных молекул в результате столкновений в скачке уплотнения. В случае возбуждения молекул непосредственно в скачке уплотнения лазерным импульсом облучается также большая доля молекул падающего потока.

На рис. 26 приведены временные зависимости (времяпролетные спектры) ионного сигнала  ${\rm CF_2H^{35}Cl^+}$  без облучения молекул в скачке уплотнения и при их облучении лазерным импульсом на линии 9R(30) (на частоте 1084.635 см<sup>-1</sup>) при плотности энергии возбуждающего излучения  $2.2 \, \text{Дж/см}^2$ . Над соплом смесь газов CF<sub>2</sub>HCl/CF<sub>3</sub>Br при соотношении давлений 1/1 и суммарном давлении 8.0 атм. На этом рисунке также видно, что при облучении молекул лазерным импульсом во временной зависимости ионного сигнала CF<sub>2</sub>H<sup>35</sup>Cl<sup>+</sup> «выжигается» провал. Отметим довольно большую глубину провала в случае облучения молекул CF<sub>2</sub>HCl в смеси с молекулами CF<sub>3</sub><sup>79</sup>Br даже при сравнительно небольшой плотности энергии возбуждающего лазерного излучения.



**Рис. 3.** Зависимости выхода диссоциации молекул  ${\rm CF_3Br}$  от плотности энергии лазерного излучения в случае возбуждения молекул в невозмущенном молекулярном потоке (1), в потоке, падающем на поверхность (2), и в скачке уплотнения (в ударной волне) (3). Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера. Давление газа над соплом 4.2 атм. Длительность импульса открывания сопла 310 мкс

Эксперименты по диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br проводилась при трех различных условиях: 1) в невозмущенном молекулярном потоке; 2) в потоке, падающем на поверхность; 3) в скачке уплотнения. На рис. 3 представлены измеренные нами по ионному сигналу CF<sub>2</sub><sup>79</sup>Br<sup>+</sup> зависимости выхода диссоциации  $\beta_{79}$  молекул  ${\rm CF_3}^{79}{\rm Br}$  от плотности энергии Ф лазерного излучения в случае возбуждения молекул в невозмущенном молекулярном потоке, в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения. Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера. Видно, что в широком диапазоне плотностей энергии ( $\Phi = 0.75$ –4.9 Дж/см<sup>2</sup>) выход диссоциации молекул CF<sub>3</sub><sup>79</sup>Br в случае их возбуждения в скачке уплотнения, а также в потоке, падающем на поверхность, существенно больше, чем в случае их возбуждения в невозмущенном потоке. Так, например, при плотности энергии возбуждения  $\Phi \approx 3~\text{Дж/cm}^2$  выход диссоциации молекул в потоке, падающем на поверхность, примерно в 4 раза, а в скачке уплотнения более чем в 10 раз превышает выход диссоциации молекул в невозмущенном потоке.

Это различие еще больше при плотностях энергии возбуждения менее 2 Дж/см<sup>2</sup>. При таких плотностях энергии выход диссоциации молекул в скачке уплотнения более чем на порядок больше выхода диссоциации в потоке, падающем на поверхность, в

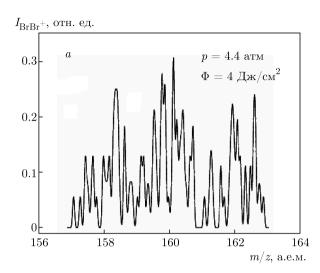
то время как в невозмущенном потоке диссоциация молекул вообще не наблюдается. На рис. З видно также, что в случае возбуждения молекул в скачке уплотнения и в потоке, падающем на поверхность, значительно (в 3–5 раз) уменьшается порог диссоциации. Полученные результаты указывают на то, что при возбуждении молекул в скачке уплотнения, а также в потоке, падающем на поверхность, весьма большой вклад в суммарный выход диссоциации вносят процессы возбуждения и диссоциации молекул за счет столкновений в формирующемся перед поверхностью скачке уплотнения [26, 27, 30].

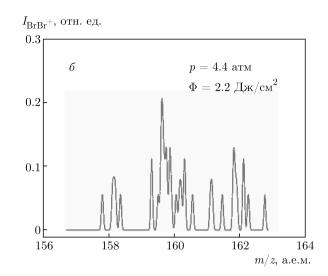
Плотность  $\rho_2$  газа  $CF_3Br$  в формирующемся перед поверхностью прямом скачке уплотнения можно оценить [45,46] из соотношения

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1},\tag{7}$$

где  $\rho_1$  — плотность газа  $\mathrm{CF_3Br}$  в падающем на поверхность потоке, а  $\gamma=c_p/c_v=1.14$  — отношение удельных теплоемкостей  $\mathrm{CF_3Br}$ . Проведенные нами с использованием этого соотношения (и с учетом геометрии потока) оценки показывают, что в условиях наших экспериментов (давление газа над соплом 4.2 атм, длительность импульса открывания сопла 350 мкс, число молекул, вытекающих из сопла за импульс, примерно  $1.54 \cdot 10^{17}$ ) концентрация молекул в невозмущенном потоке составляла около  $5.2 \cdot 10^{15}$  см $^{-3}$ , а в скачке уплотнения — примерно в 15.3 раза больше, т.е. около  $7.9 \cdot 10^{16}$  см $^{-3}$ , что соответствует давлению примерно 2.2 Торр.

Увеличение выхода диссоциации молекул CF<sub>3</sub><sup>79</sup>Br в случае их возбуждения в потоке, падающем на поверхность, а также в скачке уплотнения (по сравнению с таковым при возбуждении в невозмущенном потоке) объясняется следующими обстоятельствами. При облучении молекул в невозмущенном потоке их диссоциация происходит только за счет радиационного возбуждения (столкновений молекул в потоке нет), в то время как при облучении молекул в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения — за счет радиационного и столкновительного механизмов возбуждения [31–35]. Кроме того, в случае облучения молекул непосредственно в скачке уплотнения существенно возрастает эффективность их возбуждения из-за более высоких плотности и температуры газа в нем по сравнению с таковыми в невозмущенном потоке. Последнее обстоятельство способствует также более эффективному формированию конечных продуктов диссоциации — молекул  $C_2F_6$  и  $Br_2$ .





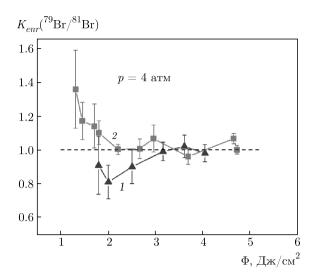
**Рис. 4.** Масс-спектры ионов молекулярного брома  $^{79}{\rm Br}^{79}{\rm Br}^+$ ,  $^{79}{\rm Br}^{81}{\rm Br}^+$ ,  $^{81}{\rm Br}^{81}{\rm Br}^+$  ( $m/z=158,\ 160,\ 162$ ), образующегося при лазерной ИК-диссоциации  ${\rm CF_3Br}$  в падающем на поверхность потоке при плотностях энергии возбуждающего излучения  $4\ {\rm Дж/cm^2}$  (a) и  $2.2\ {\rm Дж/cm^2}$  (b). Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера. Давление газа над соплом  $4.4\ {\rm atm}$ . Длительность импульса открывания сопла  $350\ {\rm mkc}$ 

Из представленных на рис. З результатов следует также, что незначительная диссоциация молекул  $CF_3Br$  в случае их возбуждения в невозмущенном потоке происходит на данной частоте облучения только при очень высоких плотностях энергии ( $\Phi \geq 4.5$ –5 Дж/см²), в то время как при плотностях энергии  $\Phi \leq 3.5$ –4 Дж/см² диссоциация молекул практически не имеет места. В то же время при высоких плотностях энергии возбуждения селективная диссоциация молекул не реализуется из-за большого динамического полевого уширения возбуждемых переходов молекулы (частоты Раби) и малого изотопического сдвига в спектрах ИК-поглощения изотопомеров  $CF_3Br$ .

Поэтому в случае молекул CF<sub>3</sub>Br наблюдать изотопическую селективность диссоциации возможно только при небольших плотностях энергии возбуждения — при  $\Phi \le 1.5$ –2 Дж/см<sup>2</sup>, т. е. в случае возбуждения молекул в потоке, падающем на поверхность, или в скачке уплотнения. В первом из этих случаев условия возбуждения молекул лазером не отличаются от условий возбуждения в невозмущенном потоке, в то время как в случае возбуждения молекул в скачке уплотнения эти условия совершенно другие (см. соотношение (3)). В скачке уплотнения значительно более высокие, чем в невозмущенном потоке, как концентрация, так и вращательная температура молекул [32, 33]. При небольших изотопических сдвигах в спектрах ИК-поглощения это может привести не только к уменьшению селективности диссоциации молекул по сравнению с селективностью диссоциации в невозмущенном и падающем на поверхность потоках, но даже к изменению ее значения относительно единицы.

На рис. 4 показаны масс-спектры молекул  $Br_2$ , образующихся при диссоциации молекул  $CF_3Br$  в потоке, падающем на поверхность, при плотностях энергии возбуждения,  $\Phi=4~\rm Дж/cm^2$  и  $\Phi=2.2~\rm Дж/cm^2$ . В первом случае никакого обогащения в продукте  $Br_2$  нами не наблюдалось (в пределах ошибки измерений), в то время как во втором случае наблюдалось обогащение продукта  $Br_2$  изотопом  $^{81}Br$ , и коэффициент обогащения в продукте  $Br_2$  составил  $K_{enr}(^{79}Br/^{81}Br)\approx 0.85\pm 0.07$ . При увеличении плотности энергии возбуждения до  $\Phi\approx3$ –3.5  $\rm Дж/cm^2$  коэффициент обогащения принимал значение  $K_{enr}(^{79}Br/^{81}Br)\approx 1.00\pm 0.05$ .

Основной причиной уменьшения селективности диссоциации молекул  ${\rm CF_3Br}$  с увеличением плотности энергии возбуждения является увеличение динамического полевого уширения переходов молекулы, которое определяется выражением  $\Delta \nu_R = \mu E/\hbar c$  (частота Раби), где  $\mu$  — дипольный момент перехода, E — напряженность электрического поля лазерного импульса, c — скорость света. Так, при плотности энергии возбуждения  $\Phi \approx 2.5~{\rm Дж/cm^2}$  и  $\mu \approx 0.23~{\rm Д}~[53]$  частота Раби достигает величины  $\Delta \nu_R \approx 0.53~{\rm cm^{-1}}$ . Она превышает как отстройки частоты лазера от частот Q-ветвей возбуждаемых переходов, так и величину изотопиче-



**Рис. 5.** Зависимости коэффициентов обогащения  $K_{enr}(^{79}\mathrm{Br}/^{81}\mathrm{Br})$  в продукте  $\mathrm{Br}_2$  от плотности энергии возбуждающего излучения в случае облучения молекул  $\mathrm{CF}_3\mathrm{Br}$  в потоке, падающем на поверхность (1), и в скачке уплотнения (в ударной волне) (2). Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера (на частоте 1084.635 см $^{-1}$ ). Давление газа над соплом 4 атм. Длительность импульса открывания сопла 350 мкс

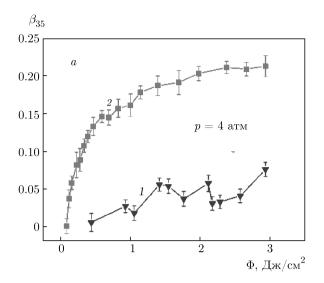
ского сдвига в спектрах ИК-поглощения молекул  ${\rm CF_3}^{79}{\rm Br}$  и  ${\rm CF_3}^{81}{\rm Br}$  (около  $0.245~{\rm cm}^{-1}$ ). Поэтому при таких плотностях энергии пиковой частью лазерного импульса, вероятно, эффективно возбуждаются оба изотопомера  ${\rm CF_3Br}$ .

На рис. 5 приведены зависимости коэффициентов обогащения в продукте  $Br_2$  от плотности энергии в диапазоне  $\Phi = 1.25 - 4.75 \, \text{Дж/см}^2$  в случае возбуждения молекул в потоке, падающем на поверхность (1), и непосредственно в скачке уплотнения (2). В обоих случаях молекулы облучались на линии 9R(30) дазера (на частоте 1064.635 см<sup>-1</sup>). На рис. 5 видно, что при сравнительно высоких плотностях энергии возбуждения ( $\Phi \approx 2.5$ –4.75 Дж/см<sup>2</sup>) коэффициенты обогащения практически равны единице. Диссоциация молекул CF<sub>3</sub>Br происходит не селективно. Селективность диссоциации молекул наблюдается лишь при небольших плотностях энергии  $(\Phi \le 2.0 \; \text{Дж/см}^2)$ , и она увеличивается с уменьшением плотности энергии возбуждения. Так, при  $\Phi \approx 1.75 \; \text{Дж/см}^2 \;$  коэффициент обогащения в продукте  $\mathrm{Br}_2$  в случае облучения молекул в скачке уплотнения составляет  $K_{enr}(^{79}{\rm Br}/^{81}{\rm Br}) \approx 1.20 \pm$  $\pm$  0.09, а в потоке, падающем на поверхность, —  $K_{enr}(^{79}{\rm Br}/^{81}{\rm Br}) \approx 0.85 \pm 0.07$ . Наблюдается также тенденция к дальнейшему увеличению селективности диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br при последующем уменьшении плотности энергии возбуждения. Разные значения коэффициентов обогащения по отношению к единице в указанных двух случаях связаны, вероятно, с совершенно разными термодинамическими условиями, которые реализуются в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения (см. соотношения (1)–(3)).

Отметим здесь, что увеличение селективности ИК-диссоциации молекул в газодинамически охлажденных молекулярных пучках и струях, по сравнению с селективностью диссоциации молекул при комнатной температуре газа в кювете, связано, главным образом, с сильным уменьшением ширины полос ИК-поглощения молекул в результате уменьшения их колебательной и вращательной температур [1, 22]. Сравнительно высокая селективность ИК-диссоциации молекул в скачке уплотнения является следствием того, что колебательная температура молекул в нем довольно низкая. В работе [15] на примере молекул SF<sub>6</sub> было показано, что именно колебательная, а не вращательная температура молекул является определяющим фактором при формировании изотопической селективности процесса их диссоциации.

# 4.2. Взаимное увеличение эффективности диссоциации молекул ${\rm CF_2HCl}$ и ${\rm CF_3Br}$ в скачке уплотнения при облучении в бимолекулярной смеси

В ходе проводимых исследований по диссоциации молекул CF<sub>2</sub>HCl и CF<sub>3</sub>Br в скачке уплотнения нами было обнаружено взаимное сильное увеличение эффективности их диссоциации в случае облучения в бимолекулярной смеси, в отличие от таковой при их облучении в отдельности. Отметим, что многоатомные молекулы (SF<sub>6</sub>, CF<sub>3</sub>Cl, CF<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и др.), сильно поглощающие излучение мощных СО2-лазеров, использовались в ряде работ как сенсибилизаторы для колебательного возбуждения и диссоциации молекул, которые не поглощают излучение CO<sub>2</sub>-лазера, в том числе молекул UF<sub>6</sub> (см., например, работу [54] и приведенные в ней ссылки). В указанных исследованиях установлено, что передача поглощенной молекулами сенсибилизатора энергии лазерного излучения акцепторным молекулам приводит к уменьшению колебательной энергии и выхода диссоциации молекул сенсибилизатора [54]. В отличие от этих работ, наши исследования проводились со смесью молекул, каждая из которых резонансно поглощала излучение лазера и поэтому являлась сенсибилизатором для другого типа молекул в смеси.



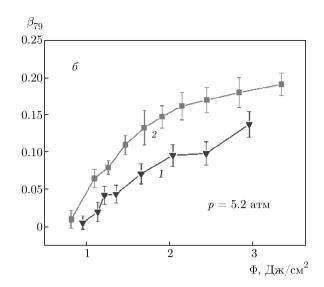


Рис. 6. a) Зависимости выхода диссоциации молекул  ${\rm CF_2H^{35}Cl}$  от плотности энергии возбуждающего лазерного излучения при облучении молекул в скачке уплотнения в случае использования молекулярного потока  ${\rm CF_2HCl}$  (I) и молекулярного потока смеси газов  ${\rm CF_2HCl}/{\rm CF_3Br}=1/1$  (I). I0 Зависимости выхода диссоциации молекул I3 СI4 от плотности энергии лазерного излучения в случае облучения чистого газа I5 в ударной волне (I1) и в случае облучения смеси молекул I6 СI7 Вг I7 (I8). В обоих случаях (I8 и I9 молекулы возбуждались на линии I8 линеи I9 мазера. Давление газа над соплом I8 атм (I8) и 5.2 атм (I8). Длительность импульса открывания сопла I80 мкс (I8) и 390 мкс (I8)

Полученные нами результаты представлены на рис. 6. На рис. 6а показаны измеренные по ионному молекулярному сигналу CF<sub>2</sub>H<sup>35</sup>Cl<sup>+</sup> зависимости выхода диссоциации  $\beta_{35}$  молекул  ${\rm CF_2H^{35}Cl}$  от плотности энергии Ф возбуждающего лазерного излучения при облучении молекул в скачке уплотнения в случаях использования молекулярного потока СF<sub>2</sub>HCl и молекулярного потока смеси газов  $CF_2HCl/CF_3Br = 1/1$ . Суммарное давление газа над соплом в обоих случаях составляло 4.0 атм. Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера. Видно, что в широком диапазоне плотностей энергии  $(\Phi \approx 0.2 - 3.0 \; \text{Дж/см}^2)$  выход диссоциации молекул CF<sub>2</sub>HCl в случае возбуждения в смеси с молекулами CF<sub>3</sub>Br существенно (в 4–7 раз) больше, чем в случае возбуждения без CF<sub>3</sub>Br. Так, например, при плотности энергии возбуждения  $\Phi \approx 1.5~\mathrm{Дж/cm^2}$  выход диссоциации молекул CF<sub>2</sub>HCl в первом случае примерно в 5 раз больше, чем во втором. Это различие еще больше при меньших плотностях энергии возбуждения. При  $\Phi \leq 1.0~\mathrm{Дж/cm^2}$  в чистом газе CF<sub>2</sub>HCl выход диссоциации молекул практически не наблюдается, а при облучении в смеси с молекулами  $CF_3Br$  выход диссоциации составляет  $\beta_{35} \ge 0.15$ .

На рис. 6 $\delta$  показаны измеренные по ионному сигналу  ${\rm CF_2}^{79}{\rm Br}^+$  зависимости выхода диссоциации  $\beta_{79}$  молекул  ${\rm CF_3}^{79}{\rm Br}$  от плотности энергии возбуж-

дающего лазерного излучения в случае использования молекулярного потока CF<sub>3</sub>Br и молекулярного потока смеси газов  $CF_2HCl/CF_3Br = 1/1$ . Суммарное давление газа над соплом составляло 5.2 атм. Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера. Видно, что в исследуемом диапазоне плотностей энергии ( $\Phi \approx 0.75$ –3.0 Дж/см<sup>2</sup>) выход диссоциации молекул CF<sub>3</sub>Br в случае возбуждения в смеси с молекулами CF<sub>2</sub>HCl значительно (в 1.5-2 раза) больше, чем в случае возбуждения без CF<sub>2</sub>HCl. Так, например, при плотности энергии возбуждения  $\Phi \approx 1.5~\mathrm{Дж/cm^2}$  выход диссоциации молекул  $\mathrm{CF_3Br}$ в смеси с молекулами СF<sub>2</sub>HCl примерно в 2 раза больше, чем в потоке без CF<sub>2</sub>HCl, и это различие еще больше при плотностях энергии возбуждения менее 1.2 Дж/см<sup>2</sup>. При  $\Phi \leq 1.0$  Дж/см<sup>2</sup> диссоциация молекул CF<sub>3</sub>Br в беспримесном потоке практически не наблюдается, в то время как в смеси с CF<sub>2</sub>HCl их диссоциация происходит.

Отметим, что результаты, приведенные на рис. 6 для смеси молекул, не нормированы на парциальное содержание молекул  $\mathrm{CF_2HCl}$  и  $\mathrm{CF_3Br}$  в потоке. Содержание обоих типов молекул в случае их облучения в смеси примерно в два раза меньше, чем в случае их облучения в отдельности. Поэтому, в расчете на молекулу, выходы их диссоциации в смеси по сравнению с выходами диссоциации в беспримес-

ных газах различаются еще больше, чем это следует из представленных на этих рисунках данных.

Как следует из рис. 6, в случае использования смеси CF<sub>2</sub>HCl/CF<sub>3</sub>Br значительно уменьшаются пороги ИК-диссоциации как молекул CF<sub>2</sub>HCl, так и молекул CF<sub>3</sub>Br по сравнению со случаем их облучения в отдельности. Это особенно сильно проявляется в случае диссоциации молекул СF<sub>2</sub>HCl, имеющих значительно меньшую, чем молекулы CF<sub>3</sub>Br, энергию диссоциации, Так, в случае облучения чистого газа CF<sub>2</sub>HCl порог диссоциации молекул (плотность энергии, при которой выход диссоциации составляет примерно 1%) находится в области около 1.0~Дж/см $^2$ , в то время как при облучении CF<sub>2</sub>HCl в смеси с CF<sub>3</sub>Br — в области 0.15– $0.2 \, \text{Дж/см}^2$ . Различие в пороговых значениях энергии диссоциации заметно меньше в случае молекул  $CF_3Br$ , имеющихся более высокую, чем  $CF_2HCl$ , энергию диссоциации. Так, при облучении чистого газа CF<sub>3</sub>Br порог диссоциации молекул находится в области  $1.0-1.2 \, \text{Дж/cm}^2$ , в то время как при облучении  $CF_3Br$  в смеси с  $CF_2HCl-$  в области около  $0.75~\rm Дж/cm^2$ .

Следует отметить, что в случае облучения молекул в скачке уплотнения весьма большой вклад в суммарный выход диссоциации вносят процессы возбуждения и диссоциации молекул за счет столкновений и обмена энергией в результате колебательно-колебательной V-V-релаксации, которые происходят в условиях сравнительно высокой плотности газа (давление 1.5-2.5 Topp) [17,32,33].

По нашему мнению, именно быстрые 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 облучении молекул в смеси по сравнению со случаем их облучения в отдельности. Роль колебательно-колебательного обмена энергией между молекулами, в том числе разного типа, особенно велика в условиях наличия почти резонансных колебательных уровней молекул [55], что и реализовывалось в наших экспериментах. Отметим, что вероятность перехода из состояния 1 в состояние 2, индуцированная зависящим от времени возмущением V(t), в первом порядке приближения Борна – Оппенгеймера дается [56] выражением

$$P_{12}(t) = \hbar^{-2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{12}(t) e^{i\Delta\omega t} dt \right|^{2},$$
 (8)

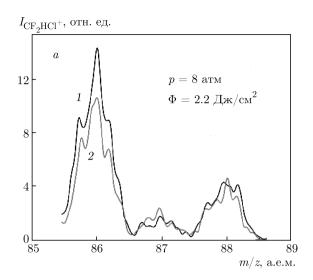
где  $V_{12}(t) = \langle 1|V(t)|2\rangle$ .

В отличие от процессов колебательно-поступательной V-T-релаксации, когда разность частот  $\Delta\omega$  между состояниями 1 и 2 велика (релаксация колебательной энергии молекулы в поступательные степени свободы происходит через низкочастотные моды молекулы), в процессах колебательно-колебательного V-V-обмена энергией разность частот  $\Delta\omega$  переходов между состояниями может быть незначительной или даже равной нулю для резонансных переходов. Такие дальнодействующие дипольно-дипольные взаимодействия могут индуцировать почти резонансные процессы колебательноколебательного V-V-обмена энергией [55]. Это приводит к эффективной передаче энергии между сталкивающимися молекулами (см., например, работу [54] и приведенные в ней ссылки).

Быстрые процессы почти резонансного колебательно-колебательного V-V-обмена энергией между молекулами в результате дальнодействующего дипольно-дипольного взаимодействия [54] уже в течение возбуждающего лазерного импульса как бы создают очень плотную «сетку» заселенных колебательно-вращательных уровней, состоящую из энергетических уровней обоих типов молекул. В результате возникают дополнительные резонансные каналы для возбуждения молекул через последовательность колебательно-вращательных переходов обоих типов молекул, что приводит к более эффективному их возбуждению вплоть до границы диссоциации. Кроме этого, сравнительно большая концентрация молекул в скачке уплотнения и их высокая поступательная и вращательная температуры [32,33] способствуют более эффективному процессу образования конечных продуктов.

## 4.3. Изотопно-селективная диссоциация молекул CF<sub>2</sub>HCl

Использование неравновесных термодинамических условий скачка уплотнения и эффекта взаимного увеличения эффективности диссоциации молекул в смеси позволили нам реализовать изотопно-селективную лазерную ИК-диссоциацию исследуемых молекул  $CF_2HCl$  и  $CF_3Br$  при умеренных плотностях энергии возбуждения. На рис. 7a показан масс-спектр молекул  $CF_2HCl$  в области m/z=86,~87,~88 (ионные сигналы соответствен-



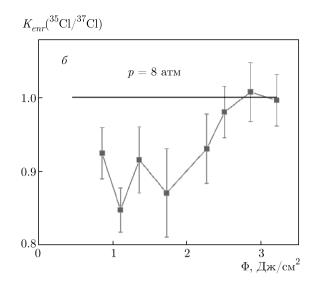


Рис. 7. a) Масс-спектры молекул  ${\rm CF_2HCl}$  (m/z=86,87,88) до облучения (1) и после облучения смеси  ${\rm CF_2HCl/CF_3Br}=1/1$  в ударной волне (2). Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера (на частоте  $1084.635~{\rm cm}^{-1}$ ) при плотности энергии  $2.2~{\rm Дж/cm}^2$ . b0) Зависимость коэффициента обогащения  $K_{enr}(^{35}{\rm Cl/}^{37}{\rm Cl})$  в остаточном газе  ${\rm CF_2HCl}$  при облучении смеси молекул  ${\rm CF_2HCl/CF_3Br}=1/1$  на линии 9R(30) лазера. В обоих случаях (a и b0) давление газа над соплом 8 атм, длительность импульса открывания сопла  $475~{\rm mkc}$ 

но CF<sub>2</sub>H<sup>35</sup>Cl<sup>+</sup>, CF<sub>2</sub><sup>37</sup>Cl<sup>+</sup>, CF<sub>2</sub>H<sup>37</sup>Cl<sup>+</sup>) без облучения смеси CF<sub>2</sub>HCl/CF<sub>3</sub>Br = 1/1 и при ее облучении лазером. Молекулы возбуждались в скачке уплотнения на частоте линии 9R(30) лазера ( $1084.635 \, \mathrm{cm}^{-1}$ ) при плотности энергии  $\Phi = 2.2 \, \mathrm{Дж/cm}^2$ . На рис. 7a видно, что имеет место преимущественная диссоциация молекул CF<sub>2</sub>H<sup>35</sup>Cl по сравнению с диссоциацией молекул CF<sub>2</sub>H<sup>37</sup>Cl.

На рис. 76 приведена зависимость коэффициента обогащения  $K_{enr}(^{35}\mathrm{Cl}/^{37}\mathrm{Cl})$  в остаточном газе  $\mathrm{CF_2HCl}$  при облучении смеси молекул  $\mathrm{CF_2HCl}/\mathrm{CF_3Br} = 1/1$  от плотности энергии возбуждающего излучения. Молекулы облучались на линии 9R(30) лазера. Видно, что при сравнительно высоких плотностях энергии возбуждения ( $\Phi \geq 2.5~\mathrm{Дж/cm^2}$ ) диссоциация молекул  $\mathrm{CF_2HCl}$  происходит не селективно. Селективная диссоциация молекул наблюдается только при низких плотностях энергии возбуждения ( $\Phi \leq 1.5$ –2.0  $\mathrm{Дж/cm^2}$ ). При  $\Phi \approx 1.3~\mathrm{Дж/cm^2}$  получен коэффициент обогащения  $K_{enr}(^{35}\mathrm{Cl}/^{37}\mathrm{Cl}) = 0.90 \pm 0.05$ .

Из рис. 76 следует также, что селективная диссоциация молекул  $\mathrm{CF_2HCl}$  в скачке уплотнения возможна только в смеси с молекулами  $\mathrm{CF_3Br}$ , поскольку при низких плотностях энергии возбуждения диссоциация молекул  $\mathrm{CF_2HCl}$  в чистом газе практически не происходит (см. рис. 6a).

Одной из причин сравнительно небольших коэффициентов обогащения, полученных нами при диссоциации молекул  $CF_2HCl$ , по сравнению с полученными при диссоциации молекул  $CF_3Br$ , является очень маленький изотопический сдвиг в ИК-спектре поглощения возбуждаемого лазером колебания  $\nu_3$  молекулы  $CF_2HCl$ .

Отметим, что именно молекулы СF<sub>2</sub>HCl используются на практике для лазерного разделения изотопов углерода [23-25]. Они имеют сравнительно большой изотопический сдвиг в спектрах ИК-поглощения по отношению к изотопам углерода ( $\Delta \nu_{is} \approx$  $\approx 24$  см<sup>-1</sup> [57]), и поэтому в процессе многофотонной ИК-диссоциации молекул была реализована довольно высокая селективность ( $\alpha \ge 10^2$  [58]). Однако эффективная ИК-диссоциация молекул CF<sub>2</sub>HCl в условиях комнатной температуры газа в кювете происходит также лишь при довольно высоких плотностях энергии возбуждения ( $\Phi > 3$ –4 Дж/см<sup>2</sup>) [58, 59]. Это связано с особенностями энергетического спектра колебательных состояний молекул CF<sub>2</sub>HCl [59] и со сравнительно большим ангармонизмом возбуждаемого колебания  $\nu_3$  молекулы (константа ангармонизма  $X_{33}$  составляет примерно  $-5 \text{ см}^{-1}$  [57]). При многофотонном ИК-возбуждении CF<sub>2</sub>HCl происходит накопление («застревание») молекул на нижних колебательных уровнях [59]. Это существенно ограничивает выход диссоциации молекул при умеренных плотностях энергии возбуждения. Эффект застревания преодолевается либо в результате возбуждения молекул двух- или многочастотным лазерным ИК-излучением, либо за счет использования относительно высоких давлений собственного газа  $CF_2HCl$  или буферного газа [59]. В данной работе нами показано, что эффективность многофотонной ИК-диссоциации молекул  $CF_2HCl$  в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения можно существенно увеличить за счет использования резонансно-поглощающих излучение лазера на частоте возбуждения  $CF_2HCl$  молекул  $CF_3Br$ , что позволило наблюдать также изотопно-селективную диссоциацию молекул  $CF_2HCl$  по отношению к изотопам хлора  $^{35}Cl$  и  $^{37}Cl$ .

Отметим, что в работе [30] (см. также обзор [1]) выполнены оценки эффективности (производительности) для ряда методов МЛРИ в плане получения обогащенных продуктов. На основе приведенных оценок можно сравнить эффективности различных методов МЛРИ. Вместе с тем следует заметить, что сделать оценки эффективности различных методов на основе объективных критериев представляется довольно сложным. Это связано главным образом с недостатком необходимых для этого экспериментальных данных об основных параметрах разделения, в частности, одновременно о селективности и выходе продуктов, а также о геометрии облучения и параметрах лазерного излучения. Оценки сделаны, в частности, для метода изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул в неравновесных условиях скачка уплотнения, а также в падающем на поверхность потоке, для методов изотопно-селективного подавления кластеризации молекул и селективной диссоциации кластеров ИК-излучением лазеров, а также для метода изотопно-селективной многофотонной ИК-диссоциации молекул UF<sub>6</sub> в газодинамически охлажденных струях и потоках. На примере ИК-диссоциации молекул SF<sub>6</sub> в скачке уплотнения и получения обогащенного изотопом <sup>34</sup>S продукта  $^{34}{
m SF}_4$  показано [1, 30], что метод лазерной изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул в неравновесных условиях скачка уплотнения (а также в падающем на поверхность потоке) является наиболее эффективным из рассмотренных методов МЛРИ.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучена лазерная изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул (на примере  ${\rm CF_3Br}$  и  ${\rm CF_2HCl}$ ), характеризующихся небольшим (не более

 $0.25~{\rm cm}^{-1}$ ) изотопическим сдвигом в спектрах ИК-поглощения, в неравновесных термодинамических условиях, которые формируются при взаимодействии интенсивного импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока с твердой поверхностью.

Установлено (на примере CF<sub>3</sub>Br), что при возбуждении молекул в скачке уплотнения и в падающем на поверхность потоке сильно (в 5–10 раз) увеличивается выход диссоциации молекул по сравнению с выходом диссоциации в невозмущенном потоке, а также значительно (в 3–5 раз) уменьшается порог диссоциации. Это позволяет эффективную изотопно-селективную ИК-диссоциацию молекул при сравнительно низких плотностях энергии возбуждающего лазерного импульса ( $\Phi < 1.5-2.0 \, \text{Дж/cm}^2$ ) и тем увеличить селективность процесса диссоциации. Измерены коэффициенты обогащения в продукте Вг<sub>2</sub>. Получены их зависимости от плотности энергии. При  $\Phi \approx 1.5$ – $1.75~{\rm Дж/cm^2}$  получены величины  $K_{enr}(^{79}{\rm Br/^{81}Br}) = 0.85 \pm 0.07$  и  $K_{enr}(^{79}{\rm Br/^{81}Br}) =$ = 1.20 ± 0.09 в случаях соответственно облучения молекул в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения.

Полученные результаты четко показывают, что за счет совместного действия радиационного столкновительного механизмов возбуждения молекул, которое реализуется в случае облучения молекул в потоке, падающем на поверхность, и в скачке уплотнения, можно существенно увеличить выход диссоциации и образование продуктов при лазерном ИК-возбуждении молекул, а также значительно понизить порог диссоциации. Это особенно важно при разделении изотопов в молекулах, характеризующихся небольшим изотопным сдвигом в спектрах ИК-поглощения, поскольку в этом случае из-за динамического полевого уширения колебательных переходов молекул селективность диссоциации можно наблюдать лишь при небольших плотностях энергии возбуждающего лазерного импульса.

Изучена изотопно-селективная лазерная ИК-диссоциация молекул CF<sub>2</sub>HCl и CF<sub>3</sub>Br в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения при их облучении резонансным лазерным ИК-излучением в бимолекулярной смеси. Обнаружено взаимное сильное (в 2–5 раз) увеличение выходов диссоциации молекул и значительное (в 1.5–3 раза) уменьшение порогов диссоциации при их облучении в смеси по сравнению со случаем облучения в отдельности.

Использование неравновесных термодинамических условий скачка уплотнения и эффекта взаимного увеличения эффективности диссоциации молекул в смеси открывает возможность проводить эффективную лазерную ИК-диссоциацию молекул при умеренных плотностях энергии возбуждения ( $\Phi \leq 1.0-1.5~\text{Дж/cm}^2$ ) и тем самым увеличить селективность диссоциации. Это продемонстрировано на примере селективной по изотопам хлора и брома диссоциации молекул CF<sub>2</sub>HCl и CF<sub>3</sub>Br. При сравнительно низкой плотности энергии возбуждения  $\Phi \approx 1.3~\text{Дж/cm}^2$  получен коэффициент обогащения  $K_{enr}(^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}) = 0.90 \pm 0.05$  при облучении смеси молекул CF<sub>2</sub>HCl/CF<sub>3</sub>Br = 1/1 CO<sub>2</sub>-лазером на линии 9R(30) (на частоте  $1084.635~\text{сm}^{-1}$ ).

Полученные результаты дают основание полагать, что наблюдаемый эффект распространяется также и на другие молекулы. Мы имеем в виду прежде всего молекулы, содержащие изотопы тяжелых элементов, которые имеют небольшой изотопический сдвиг в спектрах ИК-поглощения и для которых желательно (из-за небольшого изотопического сдвига в спектрах ИК-поглощения) проводить диссоциацию при низких плотностях энергии возбуждения. Так, например, при изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул UF<sub>6</sub> (лазером возбуждается колебание  $\nu_3$ , частота 627 см<sup>-1</sup> [42]) в качестве сенсибилизатора можно использовать молекулы SF<sub>6</sub>, которые поглощают излучение также в области 16 мкм (колебание  $\nu_4$ , частота 625 см<sup>-1</sup> [37]). Отметим, что изотопно-селективная многофотонная ИК-диссоциация молекул UF<sub>6</sub> с коэффициентом обогащения в продуктах  $\alpha \approx 4-5$  была реализована в Институте физических и химических исследований (RIKEN, Япония) [60,61].

Результаты исследований демонстрируют, что эффективность лазерной изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул можно существенно увеличить, если их облучать в смеси с резонансно-поглощающим излучение 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 диссоциации.

Полученные результаты по наблюдению сильного увеличения эффективности лазерной изотопно-селективной ИК-диссоциации молекул  $CF_2HCl$  в смеси с молекулами  $CF_3Br$  актуальны и важны, на наш взгляд, как в научном, так и в практическом

плане, поскольку именно молекулы  $\mathrm{CF}_2\mathrm{HCl}$  используются в технологии лазерного разделения изотопов углерода на практике [23–25].

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность Д. Г. Пойдашеву и Е. А. Рябову за содействие и полезные обсуждения.

**Финансирование.** Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-02-00242).

#### ЛИТЕРАТУРА

- **1**. Г. Н. Макаров, УФН **185**, 717 (2015).
- 2. J. W. Eerkens and J. Kim, AIChE J. 56, 2331 (2010).
- **3**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **93**, 123 (2011).
- Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ 97, 82 (2013).
- K. A. Lyakhov, H. J. Lee, and A. N. Pechen, Separation and Purification Technol. 176, 402 (2017).
- K. A. Lyakhov, A. N. Pechen, and H. J. Lee, AIP Adv. 8, 095325 (2018).
- **7**. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **152**, 627 (2017).
- 8. Г. Н. Макаров, УФН 188, 689 (2018).
- **9**. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, КЭ **48**, 157 (2018).
- В. М. Апатин, Г. Н Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, ЖЭТФ 154, 287 (2018).
- V. N. Lokhman, G. N. Makarov, A. L. Malinovskii, A. N. Petin, D. G. Poydashev, and E. A. Ryabov, Laser Phys. 28, 105703 (2018).
- **12**. Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, КЭ **48**, 667 (2018).
- **13**. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Д. Г. Пойдашев, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **155**, 216 (2019).
- 14. А. Н. Петин, Г. Н. Макаров, КЭ 49, 593 (2019).
- **15**. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Л. Малиновский, А. Н. Петин, Н.-Д. Д. Огурок, Д. Г. Пойдашев, Е. А. Рябов, Опт. и спектр. **127**, 66 (2019).
- **16**. Г. Н. Макаров, УФН **190**, 264 (2020).

- Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ 111, 361 (2020).
- **18**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **112**, 226 (2020).
- 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).
- Multiple-Photon Excitation and Dissociation of Polyatomic Molecules, Topics in Current Physics, Vol. 35, ed. by C. D. Cantrell, Springer-Verlag, Berlin (1986).
- 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.
- 22. Г. Н. Макаров, УФН 175, 41 (2005).
- 23. В. С. Летохов, Е. А. Рябов, в сб. *Изотопы: свойства, получение, применение,* под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, Москва (2005), т. I, с. 445.
- 24. В. Ю. Баранов, А. П. Дядькин, В. С. Летохов, Е. А. Рябов, в сб. Изотопы: свойства, получение, применение, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, Москва (2005), т. І, с. 460.
- 25. 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 CO<sub>2</sub>-lasers) 4165, 314 (2000).
- 26. http://www.silex.com.au.
- SILEX Process, www.chemeurope.com/en/encyclopedia/ Silex Process.html.
- 28. SILEX Uranium Enrichment, SILEX Annual Report 2019, http://www.silex.com.au.
- J. L. Lyman, Report LA-UR-05-3786, Los Alamos Nat. Lab. (2005).
- **30**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, КЭ **46**, 248 (2016).
- **31**. G. N. Makarov and A. N. Petin, Chem. Phys. Lett. **323**, 345 (2000).
- **32**. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **119**, 5 (2001).
- G. N. Makarov and A. N. Petin, Chem. Phys. 266, 125 (2001).
- **34**. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Опт. и спектр. **91**, 910 (2001).

- **35**. Г. Н. Макаров, С. А. Мочалов, А. Н. Петин, КЭ **31**, 263 (2001).
- **36**. Г. Н. Макаров, УФН **173**, 913 (2003).
- 37. R. S. McDowell, B. J. Krohn, H. Flicker, and M. C. Vasquez, Spectrochim. Acta A 42, 351 (1986).
- **38**. G. Baldacchini, S. Marchetti, and V. Montelatici, J. Mol. Spectr. **91**, 80 (1982).
- **39**. W. Fuss, Spectrochim. Acta A **38**, 829 (1982).
- 40. A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, P. Toninello, A. Baldacci, and S. Giorgiani, Phys. Chem. Chem. Phys. 8, 2491 (2006).
- **41**. M. Snels and G. D'Amico, J. Mol. Spectr. **209**, 1 (2001).
- 42. D. M. Cox and J. Elliot, Spectr. Lett. 12, 275 (1979).
- 43. В. Ю. Баранов, Е. И. Козлова, Ю. А. Колесников, А. А. Котов, в сб. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, Москва (2005), т. І, с. 474.
- **44.** J. B. Anderson, in *Gasdynamics, Molecular Beams and Low Density Gasdynamics*, ed. by P. P. Wegener, Marcel Dekker, New York (1974).
- **45**. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Наука, Москва (1966).
- **46**. Г. Н. Абрамович, *Прикладная газовая динамика*, ч. 1, Наука, Москва (1991).
- **47**. Е. В. Ступоченко, С. А. Лосев, А. И. Осипов, *Релаксационные процессы в ударных волнах*, Наука, Москва (1965).
- **48**. R. Kadibelban, R. Ahrens-Botzong, and P. Hess, Z. Naturforsch. **37a**, 271 (1982).
- V. Tosa, R. Bruzzese, C. De Listo, and D. Tescione, Laser Chem. 15, 47 (1994).
- M. Drouin, M. Gauthier, R. Pilon, P. A. Hackett, and C. Willis, Chem. Phys. Lett. 60, 16 (1978).
- D. S. King and J. C. Stephenson, Chem. Phys. Lett. 66, 33 (1979).
- **52**. Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону, под ред. В. Н. Кондратьева, Наука, Москва (1974).
- 53. K. Narahari Rao, In Molecular Spectroscopy: Modern Research, Vol. 3, Acad. Press, New York (1985), Ch. 3.
- 54. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, Appl. Phys. B 53, 108 (1991).

- 55. B. H. Mahan, J. Chem. Phys. 46, 98 (1967).
- J. T. Yardley, in Introduction to Molecular Energy Transfer, Acad. Press, New York (1980), p. 130.
- J. G. McLaughlin, M. Poliakoff, and J. J. Turner, J. Mol. Struct. 82, 51 (1982).
- **58**. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, М. В. Сотников, КЭ **23**, 81 (1996).
- **59**. А. В. Евсеев, А. А. Пурецкий, В. В. Тяхт, ЖЭТФ **88**, 60 (1985).
- 60. S. Kato, S. Satooka, T. Oyama et al., in Proc. Intern. Symp. Advanced Nuclear Energy Recearch. Near-Future Chemistry in Nuclear Energy Field, February 15–16, 1989, Ibaraki, Japan the Institute, Tokyo (1989) p. 53.
- **61**. K. Takeuchi, H. Tashiro, S. Kato et al., J. Nucl. Sci. Technol. **26**, 301 (1989).

#### ПОЛУКЛАССИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОНДУЛЯТОРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. А. Шишмарев  $^{a,b^*}$ , А. Д. Левин  $^{c^{**}}$ , В. Г. Багров  $^{b,a^{***}}$ , Д. М. Гитман  $^{c,d^{****}}$ 

<sup>а</sup> Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук 634055, Томск, Россия

<sup>b</sup> Физический факультет, Томский государственный университет 634050, Томск, Россия

<sup>c</sup> Институт физики, Университет Сан-Паулу 05508-090, Сан-Паулу, СП, Бразилия

 $^d$  Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук 119991, Москва, Россия

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

Представлено полуклассическое приближение для вычисления излучения от классических токов. В частности, использованы точные квантовые состояния квантованного электромагнитного поля, взаимодействующего с классическими токами, для вычисления вероятности многофотонного излучения в том случае, когда начальное состояние электромагнитного поля было вакуумом. Мы изучаем характеристики электромагнитного излучения плоского ондулятора, находим полную излученную энергию и ее спектральноугловое распределение, а также сравниваем наши результаты с результатами, полученными в рамках классической электродинамики, обсуждаем различия, появляющиеся в результате точного учета квантовой природы электромагнитного излучения, и приводим некоторые численные вычисления, подтверждающие это обсуждение. В Приложении приведено вычисление излученной энергии, выполненное с помощью альтернативной параметризации траектории электронов, движущихся в планарном ондуляторе.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020097

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

В общем случае, заряженные частицы, движущиеся с ускорением, испускают электромагнитное излучение. К примеру, синхротронное излучение (СИ) сопровождает движение заряженных частиц по круговым траекториям, которое может быть вызвано наличием внешнего магнитного поля [1]. СИ имеет множество важных применений в физике, медицине и промышленности (см., к примеру, [2]). Гинзбург в работе [3] впервые предложил применение быстро движущихся заряженных частиц в качестве источника излучения, см. также [4]. Другим

источником излучения, тесно связанным с СИ, являются периодические магнитные структуры, которые называются ондуляторами или вигглерами. Оригинальное название «ондулятор» было предложено Мотцем [5], предложившим несколько применений для таких источников излучения, а именно: генерацию энергии в конкретных диапазонах спектра (от миллиметрового до инфракрасного излучения), контроль скорости электронных пучков в ускорителях, измерение скорости быстро движущихся электронов или других частиц, таких как мезоны или протоны.

В рамках классической электродинамики формула для углового распределения мощности СИ была впервые получена Шоттом [6]. Альтернативный способ получения этого выражения и его глубокий анализ, в особенности для высокоэнергетических релятивистских электронов, был представлен Швин-

<sup>\*</sup> E-mail: a.a.shishmarev@mail.ru

<sup>\*\*</sup> E-mail: alexander.d.levin@gmail.com

<sup>\*\*\*</sup> E-mail: bagrov@phys.tsu.ru

<sup>\*\*\*\*</sup> E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

гером [7]. Квантовые поправки к классическому результату и обсуждение их значимости были впервые приведены в работе [8]. Последовательный расчет таких поправок впервые появился в работах [9], где использовалась картина Фарри [10] (иными словами, точные решения уравнения Дирака с магнитным полем). Используя собственную теорию источников [11], Швингер позже представил оригинальный способ получения схожих результатов [12]. Новый промежуточный подход для описания СИ, в котором ток электронов рассматривается классически, тогда как квантовая природа излучения учитывается точно, был представлен в работе [13].

До сих пор большая часть работ по излучению электронов, движущихся в ондуляторах, проводилась с применением методов классической электродинамики. В этих подходах ондуляторное излучение (ОИ) вычисляется с помощью потенциалов Лиенара – Вихерта для высокоэнергетического электрона. Эти потенциалы позволяют найти электрическое и магнитное поля, которые, в свою очередь, используются для вычисления потока энергии, интенсивности или мошности при помощи вектора Умова – Пойнтинга. В 1951 году Мотц [5] предложил схему планарного ондулятора и исследовал излучение электронов, движущихся в таком устройстве. Важный вклад в изучение проблемы ОИ внесли авторы работ [14]. В частности, было вычислено излучение электронов в спиральном ондуляторе и представлены спектрально-угловые распределения интенсивности излучения в различных приближениях. Излучение релятивистских электронов, движущихся в планарном ондуляторе, в частности, в устройстве конечной длины, изучалась в работах [15, 16]. Полученные результаты часто интерпретировались в терминах излученных фотонов, например, в работах [5,14]. В работах Байера и др. [17] использовался метод Швингера и некоторые подходящие приближения для вычисления спектрально-углового распределения интенсивности излучения электронов, движущихся в периодических магнитных структурах.

Аргументы, приведенные Швингером [8] в пользу того факта, что при описании СИ квантовые поправки могут в определенных условиях вносить в излучение существенный вклад, остаются справедливыми и для ОИ. Здесь возникает следующая проблема. Как правило, последовательное квантовое описание процессов излучения заряженных частиц в сильных внешних полях (в рамках квантовой электродинамики) формулируется в так называемой картине Фарри [10] и основывается на знании точных решений уравнений Дирака или Клей-

на-Гордона в таких полях. Другие известные методы, например, метод Швингера, связаны с использованием дополнительных приближений. Если для описания СИ точные решения таких волновых уравнений с постоянными и однородными магнитными полями известны и хорошо изучены, то для случая описания ОИ точные решения в периодических магнитных структурах до сих пор не найдены. В связи с этим в работе [13] мы предложили подход к описанию квантовых свойств излучения тока заряженных частиц, который не требует использования картины Фарри, а именно сложной техники работы с точными решениями. В этом подходе электрические токи, генерирующие излучение, рассматриваются классическим образом, тогда как квантовая природа электромагнитного поля учитывается точно. Здесь и далее в статье мы называем такой способ вычисления излучения полуклассическим приближением. Естественно, что полуклассическое приближение имеет свою область применимости; в частности, в нем не учитывается эффект обратного влияния поля излучения на заряженные частицы. Однако, оно может быть полезно в некоторых случаях. Например, оно позволяет вычислять одно- и многофотонное излучение без необходимости усложнять расчеты использованием соответствующих решений уравнения Дирака. Эффективность полуклассического приближения была показана на примере вычисления СИ.

Данная статья организована следующим образом. В разд. 2 мы приводим полуклассическое приближение для описания излучения от классических токов. В частности, мы используем точные квантовые состояния квантованного электромагнитного поля, взаимодействующие с классическими токами. Эти состояния используются для вычисления вероятности многофотонного излучения из вакуумного начального состояния электромагнитного поля. Таким образом, в разд. 3 мы изучаем характеристики электромагнитного излучения в планарном ондуляторе в полуклассическом приближении. Мы находим полную излученную энергию и ее спектрально-угловое распределение. В разд. 4 мы сравниваем наши результаты с теми, которые были получены в рамках классической электродинамики, обсуждаем отличия, появляющиеся в результате точного учета квантовой природы электромагнитного излучения, и приводим некоторые численные вычисления, подтверждающие это обсуждение. В Приложении для вычисления излученной энергии мы используем альтернативную параметризацию траектории электронов, движущихся в планарном ондуляторе.

#### 2. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОГО ТОКА В ПОЛУКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Полуклассическое приближение, рассмотренное в работе [13], основывается на возможности построить точные квантовые состояния электромагнитного поля, взаимодействующего с классическими токами. С помощью таких состояний можно вычислять вероятность излучения фотона и выводить спектрально-угловое распределение энергии, испускаемой в процессе однофотонного или многофотонного излучения. Ниже мы приводим эти формулы, детальный вывод которых читатель может найти в упомянутой работе [13].

В общем случае классический ток  $j^{\mu}(x) = (j^0(x), j^i(x), i = 1, 2, 3)$ , взаимодействующий с электромагнитным полем, влияет на его квантовые состояния. Дифференциальная вероятность  $P(\mathbf{k}_1\lambda_1, \ldots, \mathbf{k}_N\lambda_N; t)$  излучения из вакуумного состояния N фотонов, каждый из которых характеризуется волновым вектором  $\mathbf{k}_a$  и поляризацией  $\lambda_a, a = 1, 2, \ldots, N$ , за временной интервал t, имеет вид

$$P(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t) =$$

$$= p(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t) P(0;t),$$

$$P(0;t) = \exp\left(-\sum_{\lambda=1}^{2} \int d\mathbf{k} |y_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2}\right), \qquad (1)$$

$$p(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t) = (N!)^{-1} \prod_{k=1}^{N} |y_{\mathbf{k}_{k}\lambda_{k}}(t)|^{2}.$$

Здесь  $P\left(0;t\right)$  — вероятность перехода из вакуума в вакуум (вероятность перехода без излучения фотонов), а величина  $p\left(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\ldots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t\right)$  может интерпретироваться как относительная вероятность излучения N фотонов. Функции  $y_{\mathbf{k}\lambda}\left(t\right)$  определяются как

$$y_{\mathbf{k}\lambda}(t) = i\sqrt{\frac{4\pi}{\hbar c}} \int_{0}^{t} dt' \int j^{i}(x') f_{\mathbf{k}\lambda}^{i*}(x') d\mathbf{r}',$$

$$f_{\mathbf{k}\lambda}^{i}(x) = \frac{\exp\left[-i\left(k_{0}ct - \mathbf{k}\mathbf{r}\right)\right]}{\sqrt{2k_{0}\left(2\pi\right)^{3}}} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{i}, \quad k_{0} = |\mathbf{k}|,$$
(2)

где  $\epsilon^i_{{\bf k}\lambda}$  — это векторы поляризации фотонов с квантовыми числами  ${\bf k},\,\lambda^1).$  Они перпендикулярны волновому вектору  ${\bf k}$  и обладают свойствами

$$\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}\epsilon_{\mathbf{k}\sigma}^* = \delta_{\lambda\sigma}, \ \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{k} = 0,$$

$$\sum_{\lambda=1}^{2} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{i}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{j*} = \delta^{ij} - k^{i}k^{j}|\mathbf{k}|^{-2}.$$
(3)

В нашем рассмотрении эти векторы выбираются в следующем виде:

$$\mathbf{k} = (k_0 \sin \theta \cos \varphi, k_0 \sin \theta \sin \varphi, k_0 \cos \theta),$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}1} = (\cos \varphi \cos \theta, \sin \varphi \cos \theta, -\sin \theta),$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}2} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0),$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}1} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}1} = \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}2} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}2} = 1,$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}1} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}2} = \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}1} \cdot \mathbf{k} = \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}2} \cdot \mathbf{k} = 0.$$
(4)

Энергия N фотонов с заданными квантовыми числами  $\mathbf{k}_a\lambda_a$  зависит только от их импульсов  $\mathbf{k}_a$  и не зависит от их поляризаций; она равна

$$W(\mathbf{k}_1\lambda_1,\dots,\mathbf{k}_N\lambda_N) = \hbar c \sum_{a=1}^{N} |\mathbf{k}_a|.$$
 (5)

Таким образом, энергия, излученная в процессе, имеет вид

$$W(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t) =$$

$$= W(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N}) P(\mathbf{k}_{1}\lambda_{1},\dots,\mathbf{k}_{N}\lambda_{N};t). \quad (6)$$

Для того чтобы найти энергию  $W\left(N;t\right)$ , излученную всеми N-фотонными процессами, мы суммируем (6) по всем возможным квантовым числам  $\mathbf{k}_{a},\,\lambda_{a}$ :

$$W(N;t) = \hbar c (N!)^{-1} P(0;t) \times$$

$$\times \sum_{\lambda_1=1}^{2} \sum_{\lambda_2=1}^{2} \dots \sum_{\lambda_N=1}^{2} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \dots d\mathbf{k}_N \times$$

$$\times \left[ \sum_{b=1}^{N} |\mathbf{k}_b| \right] \prod_{a=1}^{N} |y_{\mathbf{k}_a \lambda_a}(t)|^2.$$
 (7)

Правая часть уравнения (7) может быть представлена как

$$W(N;t) = \frac{A}{(N-1)!} \times \left(\sum_{\lambda=1}^{2} \int d\mathbf{k} |y_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2}\right)^{N-1}, \qquad (8)$$
$$A = \hbar c \sum_{\lambda=1}^{2} \int d\mathbf{k} k_{0} |y_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2}.$$

Суммируя эту величину по N, найдем полную энергию  $W\left(t\right)$  всех излученных фотонов:

$$W(t) = \sum_{N=1}^{\infty} W(N;t) = \hbar c \sum_{\lambda=1}^{2} \int d\mathbf{k} \, k_0 p_{\mathbf{k}\lambda}(t),$$
$$p_{\mathbf{k}\lambda}(t) = |y_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2.$$
 (9)

 $<sup>^{1)}</sup>$  Здесь и далее мы используем соглашение о суммировании по немым индексам, т.е.  $a^ib^i=\sum_i a^ib^i,$  если прямо не сказано обратное.

#### 3. ИЗЛУЧЕНИЕ В ПЛАНАРНОМ ОНДУЛЯТОРЕ В ПОЛУКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Рассмотрим электрон, который движется в планарном ондуляторе вдоль оси z в плоскости xz (y=0), совершая поперечные колебания вдоль оси x с частотой  $\omega_p$ . Динамика и излучение электронов, движущихся в таком устройстве, впервые были рассмотрены в работе [5] и позднее более детально в работах [14,18], см. также [19]. Электронный ток в этом случае принимает вид

$$j^{i}(x) = ev^{i}(t) \, \delta(x - x(t)) \, \delta(y - y(t)) \, \delta(z - z(t)) \,,$$

$$v^{i}(t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)) \,,$$

$$x(t) = \frac{K}{\gamma} \frac{\lambda_{p}}{2\pi} \cos(\omega_{p}t) \,, \quad y(t) = 0,$$

$$z(t) = c\beta_{0}t + \frac{K^{2}}{\gamma^{2}} \frac{\lambda_{p}}{16\pi} \sin(2\omega_{p}t) \,,$$

$$\dot{x}(t) = -c\beta_{0} \frac{K}{\gamma} \sin(\omega_{p}t) \,, \quad \dot{y}(t) = 0,$$

$$\dot{z}(t) = c\beta_{0} \left[ 1 + \frac{K^{2}}{4\gamma^{2}} \cos(2\omega_{p}t) \right] \,,$$

$$\omega_{p} = 2\pi c\beta_{0} \lambda_{p}^{-1}, \quad K = \frac{eH\lambda_{p}}{2\pi m_{0}c^{2}},$$

$$\beta_{0} = \beta \left( 1 - \frac{K^{2}}{4\gamma^{2}} \right), \quad \beta = \frac{v}{c},$$

$$(10)$$

где параметр K — это так называемый параметр силы ондулятора,  $\lambda_p$  — длина одного периода ондулятора,  $\gamma$  — лоренц-фактор, v — скорость частицы,  $\beta_0$  — средняя скорость смещения частицы вдоль оси  $z, m_0$  — масса покоя электрона, а H — напряженность магнитного поля в ондуляторе. В большинстве случаев, представляющих интерес, параметр K удовлетворяет неравенству  $K \leq 1$  (слабые ондуляторы). Однако для любого реалистичного значения K отношение  $K/\gamma$  весьма мало для релятивистского электрона,  $K/\gamma \ll 1$ , и  $\beta_0 \approx \beta$ .

Вычислим излучение, генерируемое током (10), используя формулы, приведенные в разд. 2. Подставляя ток  $j^i(x)$  в (2) и используя представление (4) для волнового вектора  $\mathbf{k}$  и векторов поляризации  $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ , запишем функции  $y_{\mathbf{k}\lambda}(t)$  для случая планарного ондулятора как

$$y_{\mathbf{k}\lambda}(t) = iec\beta_0 \left[ \hbar c k_0 \left( 2\pi \right)^2 \right]^{-1/2} \times \left[ \lambda_0 \left( t \right) + \lambda_0 \left( t \right) \right] \times \left[ \lambda_0 \left( t \right)$$

и функции  $p_{\mathbf{k}\lambda}\left(t\right)$  как

$$p_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \frac{e^{2}c^{2}\beta_{0}^{2}}{\hbar c k_{0} (2\pi)^{2}} \times \left| \int_{0}^{t} dt' A_{\lambda}(\theta, \varphi, t') \exp\left[i\kappa(t')\right] \right|^{2}. \quad (12)$$

Далее, мы преобразуем экспоненту в уравнении (12), используя следующие разложения тригонометрических функций в терминах функций Бесселя [20]:

$$\exp(-iu\cos\omega_p t) =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n J_n(u) \exp(-in\omega_p t),$$

$$\exp(-is\sin 2\omega_p t) =$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(s) \exp(-i2m\omega_p t),$$
(13)

чтобы получить

$$p_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \frac{e^{2}c^{2}\beta_{0}^{2}}{\hbar ck_{0}(2\pi)^{2}} \times \left| \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} J_{n}(u) J_{m}(s) e^{-in\pi/2} \times \right| \times \int_{0}^{t} dt' A_{\lambda}(\theta,\varphi,t') \exp\left[i\omega_{p}t'R_{nm}\right]^{2},$$

$$R_{nm} = ck_{0}\omega_{n}^{-1} (1 - \beta_{0}\cos\theta) - n - 2m.$$
(14)

Интегрирование по dt' можно выполнить явно. Для этого введем функции  $B_{1,2,3}\left(R_{nm},t\right)$ :

$$B_{1}(R_{nm},t) = \int_{0}^{t} dt' \exp\left[i\omega_{p}t'R_{nm}\right] =$$

$$= t \exp\left(\frac{iR_{nm}\omega_{p}t}{2}\right) \operatorname{sinc}\left(\frac{R_{nm}\omega_{p}t}{2}\right),$$

$$\operatorname{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x},$$

$$B_{2}(R_{nm},t) = \int_{0}^{t} dt' \sin\left(\omega_{p}t'\right) \exp\left[i\omega_{p}t'R_{nm}\right]$$

$$= -2^{-1}it \left\{ \exp\left[\frac{i\left(R_{nm}+1\right)\omega_{p}t}{2}\right] \times \right\}$$

$$\times \operatorname{sinc}\left[\frac{(R_{nm}+1)\omega_{p}t}{2}\right] - \left(15\right)$$

$$- \exp\left[\frac{i\left(R_{nm}-1\right)\omega_{p}t}{2}\right] \operatorname{sinc}\left[\frac{(R_{nm}-1)\omega_{p}t}{2}\right],$$

$$B_{3}(R_{nm},t) = \int_{0}^{t} dt' \cos\left(2\omega_{p}t'\right) \exp\left[i\omega_{p}t'R_{nm}\right] =$$

$$= 2^{-1}t \left\{ \exp\left[\frac{i\left(R_{nm}+2\right)\omega_{p}t}{2}\right] \times \right\}$$

$$\times \operatorname{sinc}\left[\frac{(R_{nm}+2)\omega_{p}t}{2}\right] +$$

$$+ \exp\left[\frac{i\left(R_{nm}-2\right)\omega_{p}t}{2}\right] \operatorname{sinc}\left[\frac{(R_{nm}-2)\omega_{p}t}{2}\right].$$

Подставляя (14) в (9) и принимая во внимание (15), получаем выражение для полной энергии W(t):

$$W(t) = \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^\infty k_0^2 dk_0 \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \times$$

$$\times \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \left| \sum_{n,m=-\infty}^\infty J_n(u) J_m(s) e^{-in\pi/2} \right| \times \right)$$

$$\times \left\{ \left[ \frac{K^2}{4\gamma^2} B_1(R_{nm},t) + B_3(R_{nm},t) \right] \sin\theta + \right.$$

$$\left. + \left. B_2(R_{nm},t) \frac{K}{\gamma} \cos\varphi \cos\theta \right\} \right|^2 +$$

$$\left. + \left| \sum_{n,m=-\infty}^\infty J_n(u) J_m(s) e^{-in\pi/2} \right| \times$$

$$\times \left. B_2(R_{nm},t) \frac{K}{\gamma} \sin\varphi \right|^2 \right).$$
 (16)

### 4. СРАВНЕНИЕ С КЛАССИЧЕСКИМ ПОДХОДОМ

Сравнивая выражение (16), полученное в полуклассическом приближении, со спектрально-угловым распределением излучаемой энергии, полученным в раках классической электродинамики (см., например, [19]), можно видеть, что угловое распределение фотонов с поляризациями  $\lambda=1$  и  $\lambda=2$  в полуклассическом приближении отличается от классического, тогда как спектральные распределения одинаковы (величина  $ck_0$  соответствует частоте фотона). Отметим, что в основном направлении излучения  $\theta=0, \varphi=0$  (излучение на оси) полуклассическое приближение и классический подход дают одинаковые результаты.

Для достаточно долгого периода времени t, т. е. для ондулятора с большим числом секций, спектр излучения определяется подынтегральным выражением (16) и вырождается в набор узких пиков на значениях  $k_0$ , которые определяются набором условий

$$R_{nm} = 0, \quad R_{nm} + 1 = 0, \quad R_{nm} - 1 = 0,$$
  
 $R_{nm} + 2 = 0, \quad R_{nm} - 2 = 0.$  (17)

В частности, случай  $t \to \infty$  формально соответствует бесконечному ондулятору. В этом случае можно использовать соотношение

$$\lim_{t \to \infty} \frac{\sin xt}{x} \to \pi \delta(x). \tag{18}$$

Это означает, что для бесконечного ондулятора энергетический спектр сконцентрирован в точках, которые определяются условиями (17).

Сравним полученные в полуклассическом приближении спектрально-угловые распределения энергии с теми, которые были получены в рамках классической электродинамики. Из (16) следует, что

$$\frac{d^{2}W(t)}{d(ck_{0})d\Omega} = c^{-1} \left(\frac{eck_{0}\beta_{0}}{2\pi}\right)^{2} \times \left\{ \left| \sin\theta \left[ C_{1}(t) + \frac{K^{2}}{4\gamma^{2}}C_{3}(t) \right] + \cos\varphi\cos\theta \frac{K}{\gamma}C_{2}(t) \right|^{2} + \left| \sin\varphi \frac{K}{\gamma}C_{2}(t) \right|^{2} \right\}, \tag{19}$$

 $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$ ,

где функции  $C_{1,2,3}(t)$  заданы как

$$C_{1}(t) = \int_{0}^{t} dt' e^{i\kappa(t')},$$

$$C_{2}(t) = \int_{0}^{t} dt' \sin(\omega_{p}t') e^{i\kappa(t')},$$

$$C_{3}(t) = \int_{0}^{t} dt' \cos(2\omega_{p}t') e^{i\kappa(t')}.$$
(20)

В то же время, спектрально-угловое распределение излученной энергии, полученное классическим методом, имеет вид

$$\frac{d^{2}W(t)}{d(ck_{0})d\Omega} = c^{-1} \left(\frac{eck_{0}\beta_{0}}{2\pi}\right)^{2} \times \left|D_{1}\mathbf{x} + D_{2}\mathbf{y} + D_{3}\mathbf{z}\right|^{2}, 
\times \left|D_{1}\mathbf{x} + D_{2}\mathbf{y} + D_{3}\mathbf{z}\right|^{2}, 
D_{1} = \frac{K}{\gamma}\tilde{C}_{2} - \frac{K}{\gamma}\tilde{C}_{4}\cos^{2}\varphi\sin^{2}\theta + 
+ \cos\varphi\sin\theta\cos\theta \left[\tilde{C}_{1} + \frac{K^{2}}{4\gamma}\tilde{C}_{3}\right], 
D_{2} = -\frac{K}{\gamma}\tilde{C}_{2}\sin\varphi\cos\varphi\sin^{2}\theta + 
+ \cos\varphi\sin\theta\cos\theta \left[\tilde{C}_{1} + \frac{K^{2}}{4\gamma}\tilde{C}_{3}\right], 
D_{3} = -\frac{K}{\gamma}\tilde{C}_{4}\cos\varphi\sin\theta\cos\theta + 
+ \left(\cos^{2}\theta - 1\right)\left[\tilde{C}_{1} + \frac{K^{2}}{4\gamma}\tilde{C}_{3}\right],$$
(21)

где  ${\bf x},\ {\bf y}$  и  ${\bf z}$  — единичные векторы в направлении соответствующих координатных осей, а функции  $\tilde{C}_{1,2,3,4}$  имеют вид

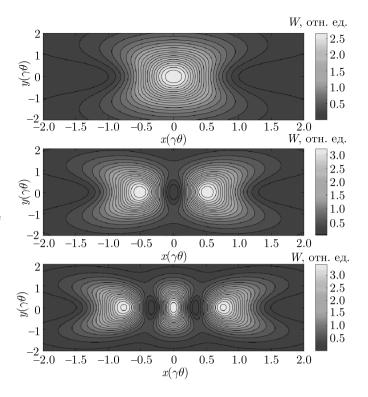
$$\tilde{C}_{1} = \int_{-t/2}^{t/2} dt' e^{-i\kappa(t')},$$

$$\tilde{C}_{2} = \int_{-t/2}^{t/2} dt' \sin(\omega_{p}t') e^{-i\kappa(t')},$$

$$\tilde{C}_{3} = \int_{-t/2}^{t/2} dt' \cos(2\omega_{p}t') e^{-i\kappa(t')},$$

$$\tilde{C}_{4} = \int_{-t/2}^{t/2} dt' \cos(\omega_{p}t') e^{-i\kappa(t')}.$$
(22)

Можно видеть, что распределения (19) и (21), полученные соответственно полуклассическим и клас-



**Рис. 1.** Полное пространственное угловое распределение полной излученной энергии для первых трех гармоник, вычисленное в полуклассическом приближении

сическим методами, существенно различаются в общем случае. Тем не менее, оба выражения могут быть сведены к одному и тому же виду:

$$\frac{d^2W(t)}{d(ck_0)d\Omega} \approx c^{-1} \left(\frac{e\beta_0 ck_0}{2\pi}\right)^2 \times \left[\theta^2 \cos^2 \varphi \left|C_1\right|^2 + \theta^2 \sin^2 \varphi \left|C_1\right|^2 + \frac{K^2}{\gamma^2} \left|C_2\right|^2 + \frac{K}{\gamma} \theta \cos \varphi \left(C_1 C_2^* + C_1^* C_2\right)\right] \tag{23}$$

для планарных ондуляторов, в которых  $K/\gamma \ll 1$  и в приближении  $\theta \ll 1$ , если учесть, что время пролета электрона через ондулятор составляет  $t=2\pi N\omega_p^{-1}$ . Численный анализ обеих формул подтверждает эти выводы. Соответствующие результаты представлены на рис. 1.

Отметим, что часто при описании поляризационных свойств излученной энергии W(t) используются так называемые  $\sigma$ - и  $\pi$ -моды излучения. Напомним, что  $\sigma$ -мода характеризует излучение, перпендикулярное направлению внешнего магнитного поля, тогда как  $\pi$ -мода — параллельное. Для планарного ондулятора  $\sigma$ -мода формируется компонентами электрического поля в направлениях осей x и

z, а  $\pi$ -мода формируется компонентами электрического поля в направлении оси y (см., например, [19]).

Выделим вклады, соответствующие  $\sigma$ - и  $\pi$ -модам в выражении (16). Это можно сделать следующим образом. Отметим, что скалярное произведение электрического тока  $j^i(x)$  на векторы  $\epsilon^i_{\mathbf{k}\lambda}$  можно интерпретировать как проекцию вектора тока на направления, определяемые векторами поляризации  $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{i}$ :

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}\lambda}(x) = \left[j^{j}(x)\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{j}\right] \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda},$$

$$|\mathbf{j}_{\mathbf{k}\lambda}(x)| = \left[j^{j}(x)\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{j}\right].$$
(24)

Векторы  $j_{\mathbf{k}\lambda}^i(x) = \mathbf{j}_{\mathbf{k}1}(x)$  могут быть разложены на компоненты, направленные по осям x, y и z; напомним также, что вектор  $\epsilon_{\mathbf{k}2}$  содержится в плоскости xy,

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}1}(x) = \left[ j^{j}(x) \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{j} \right] \times \\ \times \left( \mathbf{x} \cos \varphi \cos \theta + \mathbf{y} \sin \varphi \cos \theta - \mathbf{z} \sin \theta \right), \qquad (25)$$

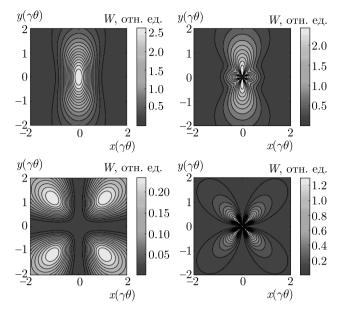
$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}2}(x) = \left[ j^{j}(x) \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^{j} \right] \left( -\mathbf{x} \sin \varphi + \mathbf{y} \cos \varphi \right).$$

Из (2) следует, что функции  $\left|y_{\mathbf{k}\lambda}(t)\right|^2$  могут быть представлены в виде

$$|y_{\mathbf{k}1}(t)|^{2} = |y_{\mathbf{k}1}(t)|^{2} \times \times \left(\mathbf{x}^{2} \cos^{2} \varphi \cos^{2} \theta + \mathbf{y}^{2} \sin^{2} \varphi \cos^{2} \theta + \mathbf{z}^{2} \sin^{2} \theta\right), \quad (26)$$
$$|y_{\mathbf{k}2}(t)|^{2} = |y_{\mathbf{k}2}(t)|^{2} \left(\mathbf{x}^{2} \sin^{2} \varphi + \mathbf{y}^{2} \cos^{2} \varphi\right),$$

где мы сохранили квадраты единичных векторов х, у, z для того, чтобы отслеживать направления поляризации. Поскольку магнитное поле в планарном ондуляторе направлено по оси у, вклады от слагаемых, умноженных на  $\mathbf{x}^2$  и  $\mathbf{z}^2$ , соответствуют  $\sigma$ -моде, а вклады от слагаемых, умноженных на  $y^2$ , соответствуют  $\pi$ -моде.

Таким образом, выражения для энергии, излученной в  $\sigma$ - и  $\pi$ -модах, принимают вид



**Рис. 2.** Пространственное угловое распределение мод  $\sigma$ (сверху) и  $\pi$  (снизу) для первой гармоники, вычисленное классически (слева) и в полуклассическом приближении (справа)

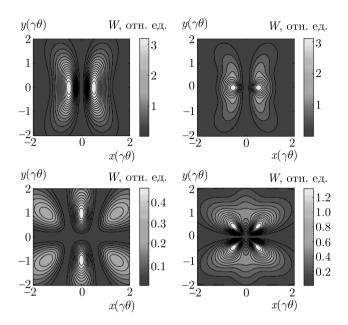
$$W_{\sigma}(t) = \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \times \left(\frac{ec\beta_0}{2\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} k_0^2 dk_0 \int_0$$

$$p_{\mathbf{k}\pi}(t) = |y_{\mathbf{k}1}(t)|^2 \sin^2 \varphi \cos^2 \theta + |y_{\mathbf{k}2}(t)|^2 \cos^2 \varphi.$$

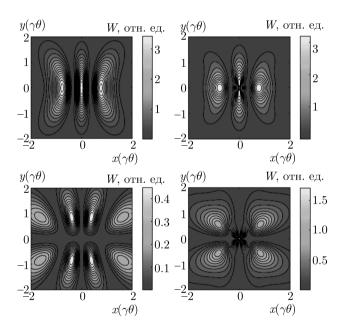
Легко проверить, что выполняются соотношения

$$p_{\mathbf{k}1}(t) + p_{\mathbf{k}2}(t) = p_{\mathbf{k}\sigma}(t) + p_{\mathbf{k}\pi}(t),$$
  
 $W(t) = W_{\sigma}(t) + W_{\pi}(t).$  (28)

Мы приводим результаты численного анализа распределений энергии для первых трех гармоник на рис. 2, 3, 4. Мы также отмечаем, что хотя распределение полной излученной энергии в основном совпадает с классическим результатом, полуклассический подход демонстрирует отличающееся и более детальное распределение излученной энергии в  $\pi$ - и  $\sigma$ -модах.



**Рис. 3.** Пространственное угловое распределение мод  $\sigma$  (сверху) и  $\pi$  (снизу) для второй гармоники, вычисленное классически (слева) и в полуклассическом приближении (справа)



**Рис. 4.** Пространственное угловое распределение мод  $\sigma$  (сверху) и  $\pi$  (снизу) для третьей гармоники, вычисленное классически (слева) и в полуклассическом приближении (справа)

В заключение отметим, что выражения для характеристик излучения, полученные в полуклассическом приближении, даже в тех случаях, когда они не отличаются количественно от соответствую-

щих классических выражений, имеют более простой аналитический вид, а их вывод существенно более прост с технической точки зрения.

Финансирование. Работа А. А. III. поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 19-32-60010), работа В. Г. Б. выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности Томского государственного университета. Работа Д. М. Г. поддержана Фондом поддержки исследований штата Сан-Паулу (FAPESP) (грант № 2016/03319-6). Работа Д. М. Г. и А. Д. Л. выполнена при поддержке Национального совета по научному и технологическому развитию (CNPq).

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

# Вычисление излучения в планарном ондуляторе в полуклассическом приближении при использовании альтернативной параметризации траектории

В работе [15] для вычисления излучения было использовано специальное представление траектории электронов, движущихся в планарном ондуляторе. Предполагается, что траектория электронов плоская и симметричная относительно оси x и состоит из круговых дуг длины l и радиуса R. Это представление дает альтернативную параметризацию траектории электронов, движущихся в планарном ондуляторе. Здесь мы применяем полуклассическое приближение, для того чтобы рассчитать излучение электронов, движущихся по такой траектории.

Рассмотрим электроны, движущиеся в периодическом магнитном поле, параллельном оси z, где для каждого периода магнитное поле однородно и постоянно. Длина ондулятора считается бесконечной. Длина l каждой из дуг связана с эффективным радиусом кривизны R через так называемый угол влета,  $\alpha=l/R,\ 0<\alpha<\pi$ . Скорость электронов равна  $v=c\beta=\omega R$ , где  $\omega$  — угловая скорость. Электроны движутся вдоль оси x со средней скоростью  $v_0=c\bar{\beta}$  и совершают периодические колебания вдоль осей x и y. Это предполагает, что

$$\bar{\beta} = \beta \operatorname{sinc}(\alpha/2), \quad T = 2\pi\omega_0^{-1} = 2\alpha\omega^{-1},$$

$$\omega_0 = \pi\omega\alpha^{-1} = \pi\beta c l^{-1}.$$
(29)

Траектория электронов на временном промежутке (0,T) может быть представлена в виде [15]

$$x(t) = \begin{cases} R\left[\sin\left(\alpha/2\right) + \sin\left(\omega t - \alpha/2\right)\right], & t \in T_{1}, \\ R\left[3\sin\left(\alpha/2\right) + \sin\left(\omega t - \alpha/2\right)\right], & t \in T_{2}, \end{cases}$$

$$y(t) = \begin{cases} R\left[\cos\left(\omega t - \alpha/2\right) - \cos\left(\alpha/2\right)\right], & t \in T_{1}, \\ R\left[\cos\left(\alpha/2\right) - \cos\left(\omega t - 3\alpha/2\right)\right], & t \in T_{2}, \end{cases}$$

$$(30)$$

где временные интервалы  $T_1$  и  $T_2$  определены как

$$T_1 = [0, T/2]; \quad T_2 = [T/2, T].$$
 (31)

Ток  $j^{i}(x)$ , формирующийся электронами, которые движутся по траектории (30), имеет вид

$$j^{i}(x) = ev^{i}(t) \delta(x-x(t)) \delta(y-y(t)) \delta(z-z(t)),$$

$$v^{i}(t) = \dot{r}^{i}(t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), 0),$$

$$\dot{x}(t) = \begin{cases} \omega R \cos[\alpha/2 - \omega t], & t \in T_{1}, \\ \omega R \cos[3\alpha/2 - \omega t], & t \in T_{2}, \end{cases}$$

$$\dot{y}(t) = \begin{cases} \omega R \sin[\alpha/2 - \omega t], & t \in T_{1}, \\ -\omega R \sin[3\alpha/2 - \omega t], & t \in T_{2}. \end{cases}$$
(32)

Вычислим энергию, излучаемую за один период колебаний T. Функции  $y_{\mathbf{k}\lambda}(t)$  на временном промежутке t=T могут быть вычислены в виде

$$y_{\mathbf{k}\lambda}(T) = y_{\mathbf{k}\lambda}(T_1) + y_{\mathbf{k}\lambda}(T_2).$$
 (33)

Используя определения (4) для волнового вектора  ${\bf k}$  и векторов поляризации  ${m \epsilon}_{{\bf k}\lambda},$  получаем

$$y_{\mathbf{k}1}(T_{j}) = z_{j}e^{i\phi_{j}}\cos\theta \int_{\tau_{j}^{in}}^{\sigma^{out}} \omega^{-1}d\tau_{j} \times \left[c\bar{\beta}\cos\varphi + \omega R\cos\tau_{j}\right]\exp\left[i\varkappa(\tau_{j})\right],$$

$$y_{\mathbf{k}2}(T_{j}) = -z_{j}e^{i\phi_{j}}\int_{\tau_{j}^{out}}^{\sigma^{out}} \omega^{-1}d\tau_{j} \times \left[c\bar{\beta}\sin\varphi + (-1)^{j-1}\omega R\sin\tau_{j}\right]\exp\left[i\varkappa(\tau_{j})\right],$$
(34)

гле были использованы обозначения

$$\varkappa(\tau_{j}) = ck_{0}\omega^{-1}\tau_{j} - \xi\sin\tau_{j}, \quad \xi = Rk_{0}\sin\theta,$$

$$z_{j} = ie\exp\left[-i\xi f_{j}(\varphi,\alpha)\right] \left[\hbar ck_{0}\left(2\pi\right)^{2}\right]^{-1/2},$$

$$j = 1, 2,$$

$$f_{1}(\varphi,\alpha) = \sin\left(\alpha/2\right)\cos\varphi - \cos\left(\alpha/2\right)\sin\varphi,$$

$$f_{2}(\varphi,\alpha) = \cos\left(\alpha/2\right)\sin\varphi + 3\sin\left(\alpha/2\right)\cos\varphi,$$

$$\tau_{1} = \omega t - \alpha/2 + \varphi, \quad \tau_{2} = \omega t - 3\alpha/2 - \varphi,$$

$$\tau_{1}^{in} = \varphi - \alpha/2, \quad \tau_{1}^{out} = \varphi + \alpha/2,$$

$$\tau_{1}^{in} = \varphi - \alpha/2, \quad \tau_{2}^{out} = \alpha/2 - \varphi,$$

$$\phi_{1} = \omega^{-1}\kappa\left(\alpha/2 - \varphi\right), \quad \phi_{2} = \omega^{-1}\kappa\left(\varphi + 3\alpha/2\right).$$
(35)

Применяя известные разложения тригонометрических функций по функциям Бесселя,

$$\exp(-i\xi\sin\tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(\xi) \exp(-in\tau),$$

$$\sin\tau \exp(-i\xi\sin\tau) = i\sum_{n=-\infty}^{+\infty} J'_n(\xi) \exp(-in\tau),$$

$$\cos\tau \exp(-i\xi\sin\tau) =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{n}{\xi} J_n(\xi) \exp(-in\tau),$$
(36)

перепишем (34) как

$$y_{\mathbf{k}1}(T_j) = z_j e^{i\phi_j} \times$$

$$\times \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \cos \theta \left[ n \left( k_0 \sin \theta \right)^{-1} + \omega^{-1} c \bar{\beta} \cos \varphi \right] \times$$

$$\times J_n(\xi) K_n(T_j), \qquad (37)$$

$$y_{\mathbf{k}2}(T_j) = -z_j e^{i\phi_j} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \omega^{-1} c \bar{\beta} \sin \varphi J_n(\xi) +$$

$$+ (-1)^{j-1} i R J'_n(\xi) \right] K_n(T_j),$$

где функции  $K_n(T_j)$  имеют вид

$$K_{n}(T_{j}) = \int_{\tau_{j}^{in}}^{\sigma_{j}^{out}} d\tau_{j} \exp\left[i\left(\omega^{-1}ck_{0} - n\right)\tau_{j}\right] =$$

$$= \exp\left[\left(-1\right)^{j} i\left(\omega^{-1}ck_{0} - n\right)\varphi\right] \times$$

$$\times \frac{\sin\left[\alpha\left(\omega^{-1}ck_{0} - n\right)/2\right]}{\left(\omega^{-1}ck_{0} - n\right)/2}. \quad (38)$$

Функции  $p_{\mathbf{k}\lambda}(T)$  на интервале T имеют вид

$$p_{\mathbf{k}\lambda}(T) = |y_{\mathbf{k}\lambda}(T)|^2 = |y_{\mathbf{k}\lambda}(T_1) + y_{\mathbf{k}\lambda}(T_2)|^2.$$
 (39)

Подставляя выражения (37) в (39), получим

$$p_{\mathbf{k}1}(T) = \left| \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ n \left( k_0 \sin \theta \right)^{-1} + \omega^{-1} c \bar{\beta} \cos \varphi \right] \right. \times \left. \cos \theta J_n \left( \xi \right) S_1 \right|^2,$$

$$p_{\mathbf{k}2}(T) = \left| \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \omega^{-1} c \bar{\beta} \sin \varphi J_n(\xi) S_1 + \right] \right|$$
 (40)

$$+iRJ'_n(\xi)S_2]|^2$$

$$S_1 = z_1 e^{i\phi_1} K_n(T_1) + z_2 e^{i\phi_2} K_n(T_2),$$
  

$$S_2 = z_1 e^{i\phi_1} K_n(T_1) - z_2 e^{i\phi_2} K_n(T_2).$$

Полная излученная энергия  $W\left(T\right)$ , таким образом, равна

$$W(T) = \int_{0}^{\infty} k_0^2 dk_0 \int_{0}^{\pi} \sin \theta d\theta \times \int_{0}^{2\pi} d\varphi \left[ p_{\mathbf{k}1}(T) + p_{\mathbf{k}2}(T) \right], \quad (41)$$

где  $p_{\mathbf{k}_1}(T)$  и  $p_{\mathbf{k}_2}(T)$  заданы выражениями (40).

### ЛИТЕРАТУРА

- F. R. Elder, A. M. Gurevitch, R. V. Langmuir et al., Phys. Rev. 71, 829 (1947).
- H. E. Huxley, A. R. Faruqi, J. Bordas et al., Nature 284, 140 (1980); L. Chen, K. L. Durr, and E. Gouaux, Science 345, 1021 (2014); S. Kneip, C. McGuffey, F. Dollar et al., Appl. Phys. Lett. 99, 093701 (2011); G. N. Afanasiev, Vavilov-Cherenkov and Synchrotron Radiation: Foundations and Applications, Springer-Verlag, New York (2004); H. Saisho and Y. Gohshi, Applications of Synchrotron Radiation to Materials Analysis, Elsevier, Amsterdam (1996); M. Kono, Medical Applications of Synchrotron Radiation, ed. by M. Ando and C. Uyama, Springer, Tokyo (1998).
- V. L. Ginsburg, Izv. Akad. Nauk. SSSR, Ser. Fiz. 11, 165 (1947).
- 4. N. A. Korkhmazyan and S. S. Elbakyan, Dokl. Akad. Nauk SSSR 203, 791 (1972).
- 5. H. Motz, J. Appl. Phys. 22, 527 (1951).

- 6. G. A. Schott, Phil. Mag. 13, 657 (1907); Ann. Phys. 329, 635 (1907); Electromagnetic Radiation, Cambrige University Press, Cambrige (1912).
- 7. J. Schwinger, Phys. Rev. 75, 1912 (1949).
- 8. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. 40, 132 (1954).
- A. A. Sokolov and I. M. Ternov, Sov. Phys. JETP 4, 396 (1957); Synchrotron Radiation, Academic Verlag, Berlin (1968); Radiation from Relativistic Electrons, American Institute of Physics, New York (1986).
- W. H. Furry, Phys. Rev. 81, 115 (1951); R. P. Feynman, Phys. Rev. 76, 749 (1949); D. M. Gitman, Izv. Vuzov Fizika 19, 81 (1976); Izv. Vuzov Fizika 19, 86 (1976); J. Phys. A 10, 2007 (1977); in Quantum Electrodynamics with External Fields, ed. by D. M. Gitman, Izd. TGU, Tomsk (1977), p. 132.
- J. Schwinger, Particles, Sources and Fields, Addison-Wesley, Massachusetts (1970) Vol. 1; (1973) Vol. 2.
- 12. J. Schwinger, Phys. Rev. D 7, 1696 (1973).
- V. G. Bagrov, D. M. Gitman, A. A. Shishmarev et al., J. Synchrotron Rad. 27, 902 (2020).
- D. F. Alferov, Y. A. Bashmakov, K. A. Belovintsev et al., Particle Accelerators 9, 223 (1979); D. F. Alferov, Y. A. Bashmakov, and P. A. Cherenkov, Sov. Phys. Usp. 32, 200 (1989); D. F. Alferov, Y. A. Bashmakov, and E. G. Bessonov, Preprint FIAN 23, 1 (1972); Preprint FIAN 118, 1 (1975); Zh. Tekh. Fiz. 46, 2392 (1976); Sov. Phys.-Tech. Phys. 18, 1336 (1974).
- V. G. Bagrov, V. R. Khalilov, A. A. Sokolov et al., Annalen der Physik 30, 1 (1973).
- V. G. Bagrov, D. M. Gitman, A. A. Sokolov et al., J. Technic. Fiz. XLV 9, 1948 (1975).
- V. N. Baier and V. M. Katkov, Zh. Eksp. Teor. Fiz.
   1478 (1968); V. N. Baier, V. M. Katkov, and V. M. Strakhovenko, Zh. Eksp. Teor. Phys. 63, 2121 (1973).
- 18. S. Krinsky, IEEE Trans. Nucl. Sci. 307, 3078 (1983).
- **19**. H. Wiedemann, *Synchrotron Radiation*, Springer-Verlag, Berlin (2003).
- **20**. I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals*, *Series, and Products*, 7 ed., Academic Press, New York (2007).

## ФЕРРОМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС И УПРУГИЕ КОЛЕБАНИЯ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ ФЕРРИТ-ГРАНАТА ИТТРИЯ

С. Н. Полулях <sup>а\*</sup>, В. Н. Бержанский <sup>а</sup>, Е. Ю. Семук <sup>а</sup>, В. И. Белотелов <sup>а,b,c</sup>, П. М. Ветошко <sup>а,b,d</sup>, В. В. Попов <sup>а</sup>, А. Н. Шапошников <sup>а</sup>, А. Г. Шумилов <sup>а</sup>, А. И. Чернов <sup>а,b</sup>

<sup>а</sup> Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского 295007, Симферополь, Россия

<sup>b</sup> Российский квантовый центр 121205, Москва, Россия

<sup>c</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия

 $^d$  Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук 125009, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 июня 2020 г., после переработки 11 сентября 2020 г. Принята к публикации 19 сентября 2020 г.

Экспериментально исследованы спектры ферромагнитного резонанса в эпитаксиальных пленках иттриевых феррит-гранатов. Полевые зависимости частоты ФМР позволили определить эффективные поля, обусловленные первой и второй константами анизотропии, а также эффективное поле одноосной анизотропии. В полях ниже 8 Э в плоскости висмут-содержащей пленки, экспериментально обнаружено увеличение частоты и ширины линии ФМР, связанное с формированием неоднородного распределения намагниченности, что подтверждается прямым магнитооптическим наблюдением. Экспериментально обнаружена модуляция спектров ФМР набором узких линий, амплитуда которых пропорциональна интенсивности сигнала ФМР, а их частотное положение не зависит от величины и направления постоянного магнитного поля. Показано, что подобная модуляция связана с резонансным возбуждением поперечных мод упругих колебаний. Проведена оценка эффективного параметра магнитоупругой связи и ширины линии возбуждаемых резонансной накачкой упругих колебаний.

### **DOI:** 10.31857/S0044451021020103

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Эпитаксиальные пленки феррит-гранатов (ЭПФГ) имеют широкий спектр практических применений, среди которых можно отметить их использование в перестраиваемых фильтрах и генераторах СВЧ-колебаний, датчиках слабых магнитных полей [1]. В каждом из этих случаев представляется важным уменьшение поля насыщения и увеличение таким образом магнитной восприимчивости, поскольку этими параметрами определяется диапазон и скорость перестройки

ЖИГ-резонатора и чувствительность магнитного сенсора. Уменьшение поля насыщения может быть достигнуто, в частности, путем планарного расположения намагниченности и уменьшением значений констант кристаллографической анизотропии материала [2]. Синтез ЭПФГ с заданными свойствами осуществляется путем вариации химического состава, что оказывается возможным благодаря устойчивости кристаллической структуры граната к катионным замещениям. Для анализа качества образцов широко используется метод ферромагнитного резонанса (ФМР), позволяющий оценить качество образца по ширине линии ФМР [3–5].

Кроме того, за счет магнитоупругих взаимодействий переменная намагниченность может приво-

<sup>\*</sup> E-mail: sergey.polulyakh@cfuv.ru

дить к генерации волн Лэмба и сдвиговых мод упругих колебаний [6, 7], резонатором для которых является система пленка-подложка. Возрождение интереса к таким процессам в настоящее время обусловлено, в частности, наличием ненулевого углового момента упругих мод колебаний, что позволяет рассматривать акустические возбуждения как фононную накачку, влияющую на ФМР пленки [8].

В настоящей работе сообщается о результатах исследований спектров ФМР в ЭПФГ  $Y_{3-x}R_xFe_{5-y}Me_yO_{12}$ , где R-Bi, Me-Sc, In. Как правило, исследование спектров ФМР проводится на частотах X-диапазона сверхвысокочастотных (СВЧ) электромагнитных волн [3, 4]. Этот частотный диапазон ограничивает минимально возможное постоянное магнитное поле. В настоящей работе ставилась задача наблюдать ФМР в как можно более слабом поле, в результате чего удалось обнаружить переход пленки в полидоменное состояние. Так, при намагничивании ЭПФГ в плоскости пленки полями до 40 Э ФМР наблюдался в диапазоне частот 50–600 МГп.

По полевым зависимостям частоты ФМР определены эффективные поля одноосной и кубической анизотропии. При этом показано, что при намагничивании ЭПФГ в плоскости пленки недостаточно ограничиться вкладом первой константы кубической анизотропии, как это обычно принято [4,5], а следует учесть и вклад второй константы.

В полях меньше 8 Э экспериментально зарегистрированы спектры ФМР в полидоменном состоянии. Сигналы ФМР в пленках типа железо-иттриевого граната толщиной 0.1 мкм, содержащих доменную структуру, наблюдались экспериментально [9]. В отличие от работы [9], в настоящей работе появление и характер доменной структуры контролировались визуально в линейно-поляризованном свете благодаря использованию обладающей значительной магнитооптической эффективностью содержащей висмут феррит-гранатовой пленки толщиной 10.5 мкм.

В настоящей работе экспериментально обнаружена амплитудная модуляция спектральной линии ФМР, подобная осцилляциям в спектре магнитостатических волн [6, 10]. В условиях ФМР переменная намагниченность за счет магнитоупругих взаимодействий генерирует фононы, что вносит вклад в уширение линии ФМР [8]. Однако переменная намагниченность в условиях ФМР генерирует так же и упругие колебания в немагнитной подложке [6, 10–12]. Для упругих колебаний система пленка-подложка выступает в качестве резонатора, в ре-

зультате чего спектр ФМР оказывается модулирован набором узких, равноотстоящих друг от друга линий, амплитуда которых пропорциональна сигналу ФМР, а частотное положение не зависит от величины и направления постоянного магнитного поля в плоскости пленки. В настоящей работе, в отличие от работ [6,10–12], поперечные упругие моды наблюдаются при намагничивании в плоскости пленки, а не вдоль нормали к плоскости.

Упругий характер осцилляций спектра ФМР, по аналогии с работами [6, 10–12], предполагается на основе оценок длины волны сдвиговых мод при известной скорости поперечных колебаний. Однако, в отличие от известных ранее работ, проведены не только теоретические оценки, но и экспериментально продемонстрировано сокращение частотного интервала между модами упругих колебаний при изменении толщины гадолиний-галлиевой подложки, выступающей в качестве акустического резонатора.

### 2. ЭКСПЕРИМЕНТ

В работе исследованы образцы ЭПФГ составов  $BiY_2Fe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}$  и  $Y_3Fe_{4.3}In_{0.7}O_{12}$ . Пленки синтезированы методом жидкофазной эпитаксии. В качестве подложек использованы монокристаллические пластины гадолиний-галлиевого граната, ориентированные в кристаллографической плоскости (111).

Регистрация низкополевых спектров ФМР осуществлялась путем измерения частотной зависимости S-параметров измерительной ячейки с помощью векторного анализатора цепей R&S ZNB-20 (рис. 1). Для низкополевых экспериментов оказалось возможным ограничиться одной измерительной ячейкой, в отличие от известных экспериментов в сильных полях, когда для перекрытия частотного диапазона используются несколько измерительных ячеек.

Измерительная ячейка представляла собой две плоскопараллельные металлические пластины, расположенные одна над другой. Пластина 1 (рис. 1) имела длину 20 мм и ширину 10 мм, а ширина пластины 2 была примерно на 5 мм больше. Образец в форме пластины размером  $5\times 5$  мм² помещался в зазор между металлическими пластинами. В измерительной ячейке распространяются электромагнитные волны квази T-типа так, что переменное магнитное поле направлено в плоскости пленки. Кроме того, к образцу прикладывалось постоянное магнитное поле H, ориентированное в плоскости пленки, перпендикулярно переменному. Для создания посто-

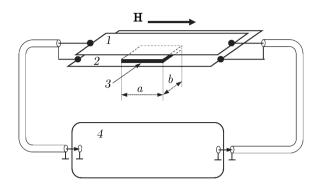


Рис. 1. Схема измерительной ячейки. В зазор между плоскопараллельными пластинами  $1,\ 2$  из фольгированного стеклотекстолита помещается образец 3. Постоянное магнитное поле H направлено вдоль стороны a образца и лежит в плоскости пленки. Переменное магнитное поле перпендикулярно постоянному и также лежит в плоскости пленки. С помощью коаксиальных высокочастотных кабелей измерительная ячейка подключена к векторному анализатору цепей 4 (модель R&S ZNB-20), работающему в режиме измерения коэффициента пропускания S21

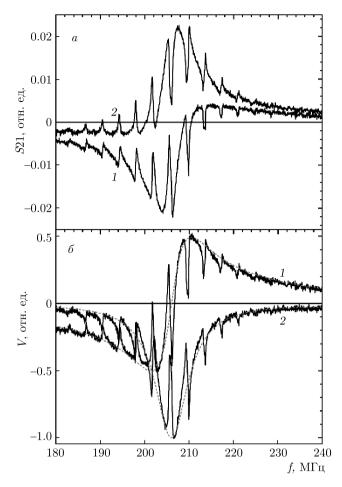
янного поля использовались катушки Гельмгольца, позволяющие изменять поле в диапазоне 0–40 Э.

Предварительно регистрировалась «базовая» характеристика измерительной ячейки путем измерения частотной зависимости коэффициента пропускания S21 измерительной ячейки с образцом в отсутствие постоянного магнитного поля. Затем регистрировалась аналогичная зависимость во внешнем магнитном поле H и из полученной частотной зависимости S21 вычиталась «базовая» характеристика. Вычитание проводилось раздельно для действительной и мнимой компонент сигнала. В качестве примера на рис. 2a приведена частотная зависимость коэффициента пропускания S21 для пленки  $Y_2$ Ві $Fe_{4.4}$ Sc $_{0.6}$ O $_{12}$  при направлении постоянного магнитного поля величиной H=9 Э вдоль одной из сторон (стороны a) образца в плоскости пленки.

Зарегистрированный сигнал приводился к виду  $V=V_x+iV_y$  (где i — мнимая единица) путем корректировки зависимости S21=S21(f) с помощью выражения

$$\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(S21) \\ \operatorname{Im}(S21) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Выражение (1) обеспечивает корректировку фазы и имеет смысл перехода в систему координат, повернутую на угол  $\phi$  вокруг оси z. Угол  $\phi$  подбирался так, чтобы обеспечить минимально возможное по абсолютной величине значение  $V_y$  компоненты сигнала.



**Рис. 2.** Коэффициент пропускания S21 (a) и  $V=V_x+iV_y$  (b) измерительной ячейки с образцом  ${\rm BiY_2Fe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}}$  в постоянном магнитном поле H=9 Э, направленном вдоль одной из сторон (стороны a) образца в плоскости пленки: 1 — действительная, 2 — мнимая части коэффициента пропускания. Пунктирные линии — результат аппроксимации функциями (a) и (a)

Результат корректировки (1) при  $\phi=0.23\pi$  приведен сплошными линиями на рис. 26. Каждая из зависимостей нормирована на максимум модуля  $V_y(f)$ . Необходимость корректировки результатов с помощью выражения (1) обусловлена неоптимальным согласованием использованной полосковой линии и векторного анализатора цепей по волновому сопротивлению.

В наблюдаемых спектрах можно выделить широкую спектральную линию, частотное положение которой зависит от постоянного магнитного поля и набор узких эквидистантных спектральных линий, частотное положение которых не зависит ни от величины, ни от направления магнитного поля, а максимум амплитуды наблюдается на частотах, соответствующих максимуму поглощения (минимум  $V_y$ ) широкой линии.

По аналогии с работами [6,11,12] и приводимыми в этих работах ссылками будем полагать, что широкая спектральная линия соответствует ферромагнитному резонансу ЭПФГ, а набор узких линий — резонансу поперечных упругих колебаний в системе пленка-подложка. Появление этих мод обусловлено тем, что намагниченность в условиях ФМР за счет магнитоупругих взаимодействий вызывает акустические колебания в структуре пленка-подложке, которая выступает в качестве акустического резонатора.

Зависимость  $V_y$  компоненты сигнала ФМР от частоты f хорошо аппроксимируется функцией Лоренца

$$V_y(f) = -\frac{\gamma^2}{(f - f_0)^2 + \gamma^2}. (2)$$

При этом x-компонента аппроксимируется выражением

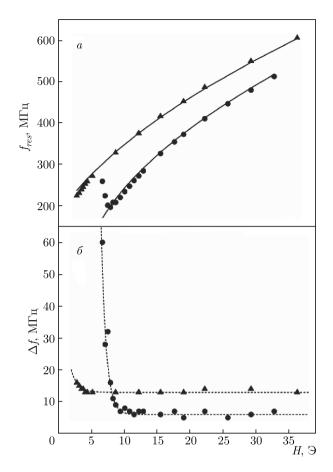
$$V_x(f) = (f - f_0) \frac{\gamma^2}{(f - f_0)^2 + \gamma^2}.$$
 (3)

Здесь  $f_0$  — центральная частота,  $\gamma$  — ширина линии. Пунктирные линии на рис.  $2 \sigma$  построены с помощью выражений (2) и (3) при  $f_0=206$  МГц и  $\gamma=4.5$  МГц. Если под шириной линии  $\Delta f$  понимать расстояние по частоте между минимумом и максимумом кривой дисперсии, то для использованного лоренциана хорошо выполняется соотношение  $\Delta f \approx 2 \gamma$ .

### 3. ФЕРРОМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

Регистрация спектров ФМР проводилась при взаимно ортогональных направлениях постоянного и переменного магнитных полей в плоскости пленки. На рис. 3a приведены экспериментально зарегистрированные зависимости частоты ФМР от величины постоянного магнитного поля при его направлениях вдоль двух взаимно ортогональных сторон содержащего висмут образца. Оказалось, что для одной и той же частоты резонансное поле вдоль стороны a (круги на рис. 3a) больше, чем резонансное поле при намагничивании вдоль другой стороны b (треугольники на рис. 3a).

Кроме того, с помощью спектрометра SPINSCAN X зарегистрированы спектры ФМР на частоте 9.4 ГГц при использовании образца той же пленки, но меньших размеров. Экспериментально получены резонансные поля как при нормальном намагничивании пленки, так и в ее плоскости.



**Рис. 3.** Зависимость частоты  $f_{res}$  (a) и ширины линии ( $\delta$ ) ФМР от постоянного магнитного поля, направленного вдоль стороны a (круги) и стороны b (треугольники) квадратного образца в плоскости пленки  ${
m BiY}_2{
m Fe}_{4.4}{
m Sc}_{0.6}{
m O}_{12}.$  Сплошные линии — результат аппроксимации выражением (5). Пунктирные линии приведены для удобства зрительного восприятия

Анизотропия частоты низкополевого ФМР (рис. 3a) в кристаллографической плоскости (111) указывает на то, что при теоретическом анализе, наряду с вкладом первой константы кубической анизотропии [4,5], необходимо учесть вклад второй константы. Используя стандартный подход [4,5], в случае намагничивания пленки перпендикулярно плоскости для резонансной частоты  $f_{res}$  получаем выражение

$$\frac{f_{res}}{\gamma} = H + H_u^* - \frac{4}{3}H_{a1} - \frac{4}{9}H_{a2}.\tag{4}$$

А при намагничивании пленки в плоскости для резонансной частоты с учетом второй константы имеем

$$\frac{f_{res}}{\gamma} = \sqrt{H - \frac{1}{3}H_{a2}\cos 6\varphi} 
\times \sqrt{H - H_u^* - H_{a1} + \frac{1}{6}H_{a2} - \frac{1}{9}H_{a2}\cos^2 3\varphi}.$$
(5)

Здесь  $\gamma$  — гиромагнитное отношение (полагалось равным  $\gamma=2.88~{\rm MF}{\rm n}/{\rm H}_{a1}=K_1/M_s$  и  $H_{a2}=K_2/M_s$  — вклады в эффективное поле анизотропии, обусловленные первой  $K_1$  и второй  $K_2$  константами кубической анизотропии,  $H_u^*=2K_u/M_s$  —  $-4\pi M_s$  — эффективное поле одноосной анизотропии, включающее кристаллографический вклад  $H_u$  и вклад формы образца  $4\pi M_s$ ,  $M_s$  — намагниченность насыщения,  $\varphi$  — азимутальный угол, задающий направление намагниченности в плоскости пленки.

При анализе СВЧ-экспериментов полем  $H_{a2}$  в первом приближении можно пренебречь, что позволяет из системы двух уравнений определить эффективные поля  $H_u^* = -1098 \pm 50$  Э и  $H_{a1} = 30.4 \pm 0.5$  Э. Отрицательное значение для эффективного поля одноосной анизотропии свидетельствует о планарном расположении намагниченности.

Для двух полевых зависимостей резонансной частоты в низких полях (рис. 3a) из (5) получаются два уравнения, отличающихся друг от друга неизвестным азимутальным углом на  $\pi/2$ , а вторая неизвестная величина — поле  $H_{a2}$ . Однако ввиду произвольной ориентации образца в плоскости (111) из этих уравнений можно получить лишь оценку минимального значения модуля  $|H_{a2}| \geq 10.4$  Э. Разность резонансных полей для двух взаимно ортогональных направлений в плоскости примерно равна полученному минимальному значению  $|H_{a2}|$ .

С целью проиллюстрировать применимость уравнения (5) для описания экспериментально наблюдаемой зависимости резонансной частоты от поля на рис. 3a сплошными линиями приведены зависимости, рассчитанные для  $H_{a2} = 10.4$  Э, а угол  $\varphi = 0$  соответствует направлению поля вдоль стороны а образца. Ожидаемый в соответствии с (5) рост  $f_{res}$  при увеличении поля, направленного вдоль стороны a образца, наблюдается в полях выше 8 Э. В меньших полях резонансная частота растет при уменьшении поля. При направлении поля вдоль стороны b отклонение экспериментальной зависимости  $f_{res}(H)$  от теоретической наблюдается в полях меньше 5 Э и состоит в более быстром, по сравнению с теоретически ожидаемым из (5), убывании частоты при уменьшении поля.

Экспериментально зарегистрированные зависимости ширины линии  $\Delta f$  от поля H при намагни-

чивании в плоскости пленки вдоль двух взаимно ортогональных сторон образца приведены на рис. 36. При направлении поля вдоль стороны а в полях, выше 8 Э ширина линии в пределах точности эксперимента не зависит от поля. В полях от 8 Э до 5 Э уменьшение магнитного поля приводит к росту резонансной частоты и резкому увеличению ширины линии. Такая ситуация возникает в случае ФМР в образцах с доменной структурой [3,4].

Большой эффект Фарадея в содержащих висмут ЭПФГ позволил наблюдать в них доменную структуру благодаря частичному выходу намагниченности доменов из плоскости пленки, обусловленному вкладом кубической анизотропии. Так, в полях ниже 8 Э, приложенных вдоль стороны а в плоскости, в линейно поляризованном свете экспериментально наблюдается доменная структура в виде светлых и темных полос примерно одинаковой ширины с периодом от 30 мкм до 40 мкм и расположенных перпендикулярно полю. Размер доменов неоднороден, а средний размер (период полосовой структуры) растет при уменьшении поля. В полях меньших 5 Э происходит перестройка доменной структуры, состоящая в повороте направления слабоконтрастных полос примерно на 60°. При этом сигнал ФМР уже не регистрируется. Визуально наблюдаемая неоднородность ширины доменов проявляется в виде неоднородного уширения спектральной линии ФМР, состоящего в увеличении ширины линии при уменьшении поля.

Для направления поля вдоль стороны b пленка выглядит однородной в поляризованном свете, а доменная структура, связанная с выходом намагниченности из плоскости пленки, существует в интервале полей 0–3 9. Тем не менее отклонение полевой зависимости резонансной частоты от теоретически ожидаемой и увеличение ширины спектральной линии может свидетельствовать об образовании доменной структуры, в которой намагниченность в доменах ориентирована в плоскости пленки.

### 4. УПРУГИЕ КОЛЕБАНИЯ

В исследованных образцах содержащего висмут граната экспериментально наблюдается модуляция ФМР-спектров набором узких, шириной порядка 0.1 МГц, равноотстоящих друг от друга на расстоянии  $\Delta f=3.81$  МГц линий. Ширина и частотное положение этих линий не зависят от величины и направления постоянного магнитного поля в плоскости пленки. Амплитуда модулирующих ли-

ний пропорциональна величине сигнала ФМР, достигает максимума при совпадении частоты линии с частотой ФМР и является заметной в пределах ширины линии ФМР.

Наблюдаемая частота 3.81 МГц при скорости поперечных упругих волн в гадолиний-галлиевом гранате 3750 м/с [7] соответствует длине волны 984 мкм. Поскольку полная толщина образца, включая пленку (10.5 мкм) и подложку, равна  $455 \pm$  $\pm 1$  мкм, то можно предположить, что длина возбуждаемой упругой волны примерно равна удвоенной толщине подложки. Соответственно, экспериментально наблюдаемый механизм модуляции спектров ФМР состоит в следующем. Резонансные колебания намагниченности за счет магнитоупругой связи в ЭПФГ приводят к появлению упругих колебаний в структуре пленка-подложка. Максимум амплитуды упругих колебаний достигается при условии размерного резонанса, а именно, по толщине образца укладывается целое число длин полуволн поперечных упругих колебаний. При этом упругие колебания наблюдаются экспериментально при ФМР как в моно-, так и в полидоменном состояниях.

Будем рассматривать упругие моды как независимые друг от друга осцилляторы, каждый из которых связан с магнитным осциллятором. Тогда, по аналогии с работой [12], запишем систему уравнений

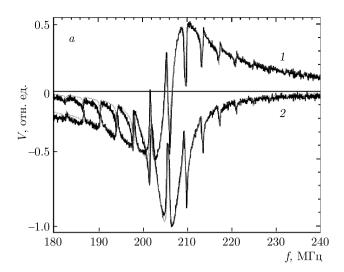
$$(\omega - \omega_M + i\eta_M) m^+ = \frac{\Omega}{2} \sum_k u_k^+ + \chi h^+,$$

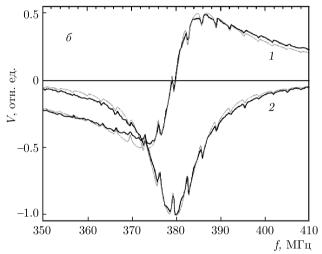
$$\sum_k \delta_{1k} (\omega - \omega_k + i\eta_A) u_1^+ = \frac{\Omega m_+}{2},$$

$$\dots$$

$$\sum_k \delta_{Nk} (\omega - \omega_k + i\eta_A) u_N^+ = \frac{\Omega m_+}{2}.$$
(6)

В этих уравнениях переменная  $m^+ = m_x + i m_y$  описывает амплитуду колебаний намагниченности, i — мнимая единица,  $h^+$  — амплитуда переменного магнитного поля,  $\chi$  — магнитная восприимчивость. Магнитный осциллятор характеризуется резонансной частотой  $\omega_M$  и параметром затухания  $\eta_M$ . Колебания k-го упругого резонатора описываются комплексной амплитудой  $u_k^+$ , резонансной частотой  $\omega_k$  и одинаковым для всех осцилляторов параметром затухания  $\eta_A$ . Каждый из упругих осцилляторов связан с магнитным осциллятором, и степень связи определяется эффективным коэффициентом магнитоупругой связи  $\Omega$ . При переходе к действительной и мнимой частям переменных движения из системы (6) получаем систему 2N+2 линейных алгебраиче-





**Рис. 4.** Экспериментально наблюдаемые сигналы  $V_x$  (сплошная линия 1) и  $-V_y$  (сплошная линия 2) в ЭПФГ  $\mathrm{BiY_2Fe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}}$  (a) и  $\mathrm{Y_3Fe_{4.3}In_{0.7}O_{12}}$  (b). Пунктирные линии — действительная (1) и мнимая (2) части амплитуды переменной намагниченности, рассчитанные согласно системы уравнений (b)

ских уравнений, где N — число упругих осцилляторов.

Результат численного решения системы уравнений (6) для амплитуды колебаний намагниченности при N=19 упругих осцилляторов приведен на рис. 4a. Расчеты проведены при  $\omega_M/2\pi=206.0$  МГц,  $\eta_M/2\pi=4.5$  МГц,  $\eta_A/2\pi=0.1$  МГц,  $\Omega/2\pi=1.6$  МГц. Резонансная частота k-го резонатора задавалась соотношением  $\omega_k=2\pi(n+k)\Delta f$  при  $n=47,\ k=1,2,\ldots,19$  и  $\Delta f=3.81$  МГц.

Сравнивая результаты численного расчета с результатами эксперимента (рис. 4), получаем не только качественное, но и количественное согласие. В

результате специально проведенных расчетов получено, что увеличение коэффициента магнитоупругой связи  $\Omega$  приводит к росту глубины модуляции. Кроме того, глубина модуляции обратно пропорциональна ширине акустической линии. Удовлетворительное согласие теории и эксперимента достигается при ширине линии упругих колебаний, равной  $0.1~\mathrm{MT}$ ц, и значении эффективного коэффициента магнитоупругой связи  $1.6~\mathrm{MT}$ ц.

Интересно заметить, что при учете только одного упругого осциллятора сближение частот упругого резонанса и ФМР приводит к характерному для связанных колебаний сдвигу резонансных частот. Однако этот эффект в расчетных результатах исчезает при учете большого числа упругих резонаторов, расположенных по обе стороны относительно частоты ФМР в пределах ширины линии.

Модуляция спектров ФМР модами упругих колебаний системы пленка-подложка не является уникальным свойством только ЭПФГ состава  $Y_2$ Ві $Fe_{4.4}$ Sc $_{0.6}$ О $_{12}$ . В качестве примера на рис. 46 жирными линиями приведены экспериментально зарегистрированные сигналы ФМР в ЭПФГ состава  $Y_3$ Fe $_{4.3}$ In $_{0.7}$ О $_{12}$ . Процедура коррекции фазы с помощью выражения (1) проведена при  $\phi = 0.015\pi$ . По всей видимости, различия в углах корректировки фазы  $\phi$  обусловлено различными магнитными и размерными характеристиками образцов.

Пунктирными линиями на рис. 46 приведены зависимости, рассчитанные с помощью системы уравнений (6), и в этом случае также наблюдается хорошее согласие теории с экспериментом. Расчеты проведены при  $\omega_M/2\pi=379.5$  МГц,  $\eta_M/2\pi=6.25$  МГц,  $\eta_A/2\pi=0.25$  МГц,  $\Omega/2\pi=1.2$  МГц,  $\omega_k/2\pi$  — кратно 3.205 МГц. При этом также использовано 19 акустических линий.

Полная толщина образца, включая и пленку, и подложку, равна  $550\pm1$  мкм при толщине  $\Theta\Pi\Phi\Gamma$  2.8 мкм. Частотный интервал между линиями 3.205 МГц оказался меньше, чем для более тонкого образца. При этом отношение частот равно примерно 1.19 при обратном отношении толщин 1.21. С учетом разных  $\Theta\Pi\Phi\Gamma$  и разных партий гадолиний-галлиевых подложек можно считать, что наблюдаемые соотношения дополнительно свидетельствуют в пользу возникновения и в этом случае размерного резонанса по толщине образца.

Для индий-замещенной ЭПФГ глубина модуляции ФМР-спектра меньше, чем для скандий-замещенного граната, что обусловлено как меньшей величиной параметра магнитоупругой связи, так и большей шириной линии акустических резонансов. Вопрос о влиянии химического состава и толщины  $\Theta\Pi\Phi\Gamma$  на резонансные частоты упругих колебаний является темой отдельного исследования.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ЭПФГ с планарным расположением намагниченности экспериментально исследованы спектры ФМР как по полевой зависимости сигнала поглощения на частоте 9.4 ГГц, так и по частотной зависимости комплексного коэффициента поглощения в слабых полях от 5 до 40 Э. Низкополевой ФМР при ориентации магнитного поля в плоскости пленки наблюдается в диапазоне частот ниже 600 МГц.

Показано, что форма линии поглощения в монодоменном состоянии имеет лоренцев вид, а зависимость резонансной частоты от магнитного поля определяется как отрицательной одноосной анизотропией, укладывающей намагниченность в плоскость пленки, так и кубической анизотропией. Для кубической анизотропии в низкополевом ФМР наряду с вкладом первой константы необходимо учитывать вклад второй константы, определяющей анизотропию резонансной частоты в плоскости (111). Вообще говоря, возможны и другие вклады, обусловленные, например, отклонением кристаллографического направления (111) от нормали к плоскости образца. Однако учет этого вклада в первом приближении не потребовался, что, по-видимому, обусловлено его малостью.

ЭПФГ При намагничивании состава  $Y_2BiFe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}$  в плоскости пленки наряду с анизотропией резонансной частоты также наблюдается и анизотропия поля насыщения. Сигналы ФМР наблюдаются и в монодоменном, и в полидоменном состояниях, что подтверждается непосредственной регистрацией полосовой доменной структуры в линейно поляризованном свете. Низкополевой ФМР, связанный с доменной структурой, при намагничивании вдоль одной из сторон образца в кристаллографической плоскости (111) возникает в полях ниже 8 Э. В этих полях наблюдается рост резонансной частоты и резкий рост ширины линии ФМР с уменьшением поля. При намагничивании вдоль ортогонального направления также наблюдается рост ширины линии при незначительном отклонении полевой зависимости резонансной частоты от теоретической.

Экспериментально обнаружена модуляция сигнала ФМР, обусловленная резонансном упругих

поперечных колебаний по толщине структуры пленка-подложка. Из оценок длины волны по скорости поперечного звука не только установлен резонанс упругих колебаний, но и экспериментально продемонстрировано уменьшение интервала между гармониками колебаний при переходе к более толстой подложке. Возбуждение упругих колебаний в структуре пленка-подложка происходит за счет магнитоупругого взаимодействия. Коэффициент магнитоупругой связи в более толстых пленках  $Y_2BiFe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}$  оказался выше, чем для более тонких пленок  $Y_3$  Fe<sub>4.3</sub>In<sub>0.7</sub>O<sub>12</sub>, в то время как ширина линии упругих колебания имеет обратную зависимость. В результате таких различий глубина модуляции спектра ФМР упругими колебаниями для образца  $Y_2BiFe_{4.4}Sc_{0.6}O_{12}$  оказалась выше, чем для  $Y_3$ Fe<sub>4.3</sub>In<sub>0.7</sub>O<sub>12</sub>.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта Мегагрант № 075-15-2019-1934 в части синтеза магнитных пленок и теоретического анализа экспериментальных данных, а также Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-29-02120 в части проведения экспериментальных исследований.

### ЛИТЕРАТУРА

 П. М. Ветошко, А. К. Звездин, В.А. Скиданов и др., Письма в ЖТФ 41, 103 (2015).

- A. R. Prokopov, P. M. Vetoshko, A. G. Shumilov et al., J. Alloys Comp. 671, 403 (2016).
- 3. А. Г. Гуревич, Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках, Наука, Москва (1973).
- 4. В. Г. Шавров, В. И. Щеглов, Ферромагнитный резонанс в условиях ориентационного перехода, Физматлит, Москва (2018).
- H. Makino and Y. Hidaka, Mat. Res. Bull 16, 957 (1981).
- **6**. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, Г. Т. Казаков и др., Письма в ЖЭТФ **34**, 500 (1981).
- 7. V. L. Preobrazhensky, V. V. Aleshin, and P. Pernod, Wave Motion 81, 15 (2018).
- 8. S. Streib, H. Keshtgar, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. 121, 027202 (2018).
- В. Ф. Шкарь, Е. И. Николаев, В. Н. Саяпин и др., ФТТ 46, 1043 (2004).
- Ю. В. Хивинцев, В. К. Сахаров, С. Л. Высоцкий и др., ЖТФ 88, 1060 (2018).
- **11**. В. В. Тихонов, А. Н. Литвиненко, А. В. Садовников и др., Известия РАН, Серия Физическая **80**, 1389 (2016).
- K. An, A. N. Litvinenko, R Kohno et al., Phys. Rev. B 101, 060407 (2020).

## ЭФФЕКТ ТРЕНИРОВКИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ОБМЕННО-СМЕЩЕННОМ КОБАЛЬТИТЕ ${ m GdBaCo_2O_{5.5}}$

*Н. И. Солин*\*, *С. В. Наумов* 

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук 620108, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 12 августа 2020 г., после переработки 26 августа 2020 г. Принята к публикации 27 августа 2020 г.

Исследуется природа эффекта тренировки в соединениях с обменным смещением, заключающегося в уменьшении поля обменного смещения  $H_{EB}$  при циклическом изменении магнитного поля. Показано, что в кобальтите  $\mathrm{GdBaCo_2O_{5+\delta}}$  ( $\delta\approx0.5$ ) эффекты тренировки электросопротивления — изменения электросопротивления при циклическом изменении магнитного поля,  $\rho_{cycl}(N)$ , и вращении образца,  $\rho_{rot}(N)$ , где N — номер цикла, — являются аналогом эффекта тренировки  $H_{EB}$ . Электросопротивление, как и  $H_{EB}$ , резко изменяется после первого цикла (N>1(2)) и медленнее при последующих циклах, что связано с уменьшением намагниченности ферромагнитных частиц. Результаты объясняются влиянием двух механизмов: в первом намагниченность уменьшается быстро, во втором — медленно. Предполагается, что неравновесное состояние и эффект тренировки взаимосвязаны и обусловлены существованием однодоменных ферромагнитных частиц разного объема V и зависимостью времени релаксации их намагниченности от объема однодоменных (суперпарамагнитных) частиц,  $\tau \propto \exp(K_{an}V/kT)$ , где  $K_{an}$  — плотность энергии магнитной анизотропии. Природа резкого изменения  $H_{EB}$  и электросопротивления после первых циклов обусловлена близостью энергии  $K_{an}V$  мелких однодоменных частиц к тепловой энергии kT. В этой модели обменное смещение исчезнет при бесконечном циклическом перемагничивании,  $H_{EB}=0$ .

### **DOI:** 10.31857/S0044451021020000

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из удивительных и необычных явлений в физике магнитных материалов является эффект обменного смещения, или однонаправленной анизотропии. Необычность проявляется в том, что физические свойства зависят не только от величины, но и от знака напряженности магнитного поля. Эффект может быть описан как однонаправленная анизотропия, которая нарушает симметрию обращения времени. Однонаправленная анизотропия зарождается в гетерогенной среде, содержащей мелкие ферромагнитные (FM) частицы в антиферромагнитной (АҒМ) матрице при охлаждении в магнитном поле  $H_{cool}$  при температуры выше температуры Нееля  $T_N$ , причем FM-частицы должны иметь более высокую температуру магнитного упорядочения,  $T_C > T_N$  [1–8]. Хотя были предприняты значительные усилия [3–7,9–13], чтобы понять необычные явления, связанные с эффектом обменного смещения, лежащий в основе его механизм все еще находится в стадии интенсивных дискуссий. Выяснение фундаментальной роли обменного смещения в устройствах спинового клапана и в туннельных устройствах вызвало взрывной рост исследований в системах FM/AFM [7].

Обменное смещение впервые наблюдали Майклджон и Бин в 50-х годах прошлого века по смещению петли гистерезиса намагниченности в мелких FM-частицах кобальта с AFM-оболочкой из оксида кобальта, осажденных в диамагнитную ртуть [1,2]. Полученные результаты авторы объяснили обменным взаимодействием, возникающим на поверхности раздела между однодоменной FM-частицей Со и AFM-оболочкой CoO. Хотя в этой модели требуется обменное поле на два порядка больше, чем экспериментальное, и природа эффекта пока теоретически не обоснована, само явление обменного смещения широко используется в устройствах спинового кла-

 $<sup>^{\</sup>ast}$ E-mail: solin@imp.uran.ru

пана и туннельных системах, в современных системах записи и хранения информации (см. ссылки в работах [3,8]).

Одной из нерешенных проблем для соединений с обменным смещением является природа эффекта тренировки [4,7]. Этот эффект проявляется в уменьшении поля обменного смещения  $H_{EB}$  и установлении его равновесного значения при бесконечном циклическом изменении магнитного поля [4–8]. Существуют два типа тренировочного эффекта: один между первым и вторым циклами, а другой — с большим числом циклов N [4]. Изменение  $H_{EB}$  после первого цикла происходит очень резко, а последующие шиклы производят более медленные изменения  $H_{EB}$ . Для второго типа тренировочного эффекта уменьшение  $H_{EB}(N)$  описывается эмпирическим выражением  $\Delta H_{EB} \propto N^{-1/2}$  при N>1 или N > 2, предложенным в работе [14]. Первый цикл не соответствует степенному соотношению, природа его, как и самого эмпирического выражения, до сих пор не известна [4,6-8].

Широко распространено мнение, что тренировочный эффект связан с нестабильностью AFM-слоя или интерфейса FM/AFM, созданного в процессе охлаждения в магнитном поле [7, 9, 10, 13]. В модели спиновой релаксации получена рекурсивная формула, связывающая сдвиг первой петли с остальными через некоторые постоянные [10]. Считается, что тренировочный эффект связан с перестройкой спиновой структуры АҒМ к состоянию равновесия и отражает переориентацию доменов AFM на границе раздела AFM/FM и не имеет отношения к нестабильности FM-структуры [9,10]. Предполагается, что симметрия анизотропии антиферромагнетика имеет решающее значение для понимания эффектов тренировки первого типа [11]. Ожидается, что эффект тренировки увеличивается в поликристаллах, он мал или отсутствует в монокристаллах (см. ссылки в работе [4]).

Мы предполагали [15], что неравновесное состояние и связанные с ним эффекты тренировки являются естественными явлениями, так как замороженное в магнитном поле состояние структуры FM/AFM отделено от термодинамического равновесного состояния потенциальным барьером [16]. В случае нестационарного состояния циклические изменения магнитного поля проявляются как эффект старения или тренировки  $H_{EB}$ . Установлено, что в кобальтите  $GdBaCo_2O_{5+\delta}$  эффект тренировки  $H_{EB}$  вызван уменьшением намагниченности FM-частиц при циклическом изменении магнитного поля. В зависимости от времени намагниченность M(t) умень-

шается резко после первого цикла и медленно при последующих циклах N [15].

Результаты анализировались под влиянием двух механизмов. В первом намагниченность уменьшается быстро в зависимости от времени,  $M({\rm fast}) \propto (1-\exp(-t/\tau))$  при  $\tau \approx 600$  с, во втором — медленно,  $M({\rm slow}) \propto t$ , что может соответствовать экспоненциальной зависимости  $1-\exp(-t/\tau)$  при  $t/\tau \ll 1$ . Была установлена пропорциональность между уменьшениями намагниченности M(t) FM-частиц и поля обменного смещения  $H_{EB}(t)$ . Временные зависимости  $H_{EB}(t)$  описываются теми же выражениями, что и намагниченность. Результаты объяснены на основе феноменологической модели Майклджона и Бина [1-3], где предсказана линейная зависимость обменного смещения FM-намагниченности гетероструктуры FM/AFM.

Предполагалось, что среда неоднородна и имеются мелкие (однодоменные) и крупные (многодоменные) FM-частицы. Размагничиванием крупных FM-частиц при циклическом изменении магнитного поля объяснялось резкое уменьшение M(t) и  $H_{EB}(t)$  и отклонение  $H_{EB}(N)$  от известного степенного соотношения  $H_{EB} \propto N^{-1/2}$  при N > 1.

Данная работа является продолжением исследований природы обменного смещения в слоистых кобальтитах [15, 17]. Известна связь между электросопротивлением и обменным смещением в слоистом кобальтите EuBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub> [17]. В связи с проблемой эффекта тренировки  $H_{EB}$  определенную ясность могли бы внести исследования влияния обменного смещения на электросопротивление при циклических изменениях магнитного состояния. Были изучены электросопротивления при циклическом изменении магнитного поля,  $\rho_{cycl}$ , и при циклическом вращении образца,  $\rho_{rot}$  (отклонении магнитного поля от направления охлаждения), в обменно-смещенном поликристалле GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5+ $\delta$ </sub> с  $\delta \approx 0.5$ .

Установлена аналогия между эффектом тренировки  $\Delta H_{EB}$  и эффектом тренировки электросопротивления при циклическом изменении магнитного поля,  $\Delta \rho_{cycl}$ , и при вращении образца,  $\Delta \rho_{rot}$ . Значения  $\Delta \rho_{cycl}$  и  $\Delta \rho_{rot}$  резко увеличиваются после первых циклов за характерные времена  $\tau \sim 500$  с и медление при последующих циклах  $(t>3\cdot 10^3~{\rm c})$ . Поведение электросопротивления, как и поля обменного смещения, хорошо описываются эмпирическим выражением  $\Delta \rho_{cycl}$ ,  $\Delta \rho_{rot}(t) \propto N^{-1/2}$  при N>1(2). Их поведение в зависимости от времени соответствует уменьшению намагниченности FM-кластеров,  $\Delta \rho_{cycl} \sim \Delta \rho_{rot} \sim \Delta M_{FM}(t)$ . Временные зависимости  $\rho(t)$  описываются теми же выражениями,

что и намагниченность:  $\rho({\rm fast}) \propto [1-\exp(-t/\tau)]$  при  $\tau \approx 500$  с,  $\rho({\rm slow}) \propto t$ . После длительных изменений магнитного поля  $(N \geq 5, \, t > 10^4$  с) изменение электросопротивление оставалось постоянным как при H=0, так и при H=00, так и при H=01, так и при H=03, так и при H=04 ч.

Показано, что многодоменные FM-частицы не ответственны за природу тренировочного эффекта первого типа. Неравновесное состояние и эффекты тренировки взаимосвязаны и объясняются существованием в образце однодоменных FM-частиц разного объема, в которых в зависимости от объема и энергии однодоменных частиц время релаксации  $au_{st}$  намагниченности однодоменных частиц в стационарное состояние может меняться от долей секунды до десятка лет [18]. Оценки времен релаксации согласуются с экспериментом при разумных значениях плотности энергии магнитной анизотропии  $K_{an}$ . Анизотропия поперечного  $\mathrm{AMR}^{\perp}(\theta)$  и продольного  $\mathrm{AMR}^{\parallel}(\theta)$  магнитосопротивления определяется энергией однонаправленной (обменной) анизотропии  $E \propto -K \cos \theta$  [1,2]:

$$AMR(\theta) \propto 1 \pm \cos \theta$$
,

где  $\theta$  — угол отклонения магнитного поля от направления поля обменного смещения, знаки «+» или «-» соответствуют продольному или поперечному магнитосопротивлению.

### 2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЙ

Слоистые кобальтиты привлекают большое внимание из-за их необычных магнитных, электрических свойств и фазовых переходов. В них обнаружен ряд последовательных переходов: металл-изолятор, парамагнитный (РМ), FM- и АFМ-переходы. Они имеют слоистую кристаллическую структуру перовскита, состоящую из слоев, расположенных вдоль *с*-оси, в которой слои RO (R — редкоземельный ион) и ВаО перемежаются слоями СоО<sub>2</sub> [19, 20]. Вследствие слоистости они являются сильноанизотропными [20]. В зависимости от содержания кислорода  $(0 \le \delta \le 1)$  валентное состояние кобальта в  $RBaCo_2O_{5+\delta}$  меняется от  $Co^{2+}$  до  $Co^{4+}$ . В  $RBaCo_2O_{5.5}$  присутствуют только ионы  $Co^{3+}$ , которые расположены в кристаллической решетке из равного числа октаэдров СоО<sub>6</sub> и квадратных пирамид  $CoO_5$  [19, 20].

Поликристаллические образцы  $GdBaCo_2O_{5+\delta}$  были синтезированы методом Печини [21]. В качестве исходных компонентов были использованы

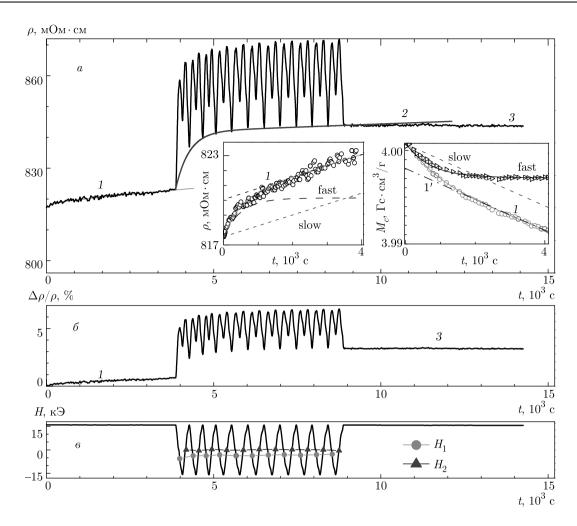
Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, BaCO<sub>3</sub>, Co. Реагенты были предварительно прокалены (Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 900°C), высушены (BaCO<sub>3</sub>, 500°C) и восстановлены в токе водорода (Со, 600 °С). Определение содержания кислорода  $\delta$ проводилось методом восстановления образца в атмосфере водорода. Приготовленный образец был однофазным с  $\delta = 0.52 \pm 0.02$ , имел орторомбическую структуру (пространственная группа Рттт, № 47) с параметрами элементарной ячейки a = 3.874(3) Å, b = 7.821(6) Å, c = 7.531(3) Å [15].Определены основные физические параметры обменного смещения поликристалла GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub>: температура блокировки, ниже которой возникает обменное смещение,  $T_B \approx 200$  K, температура Кюри  $T_C = 277 \pm 2$  K, которая выше температуры AFM-упорядочения  $T_N = 230 \pm 10$  K. Оценены размеры и плотность FM-кластеров: образец при  $T < T_N$  представляет AFM-среду с вкраплениями FM-кластеров с размерами d=3-4 нм с расстояниями между ними около 20 нм [22].

Исследования электросопротивления проведены стандартным четырехконтактным методом на образце в виде параллелепипеда размерами  $5 \times 1.4 \times 1.2$  мм<sup>3</sup>, ток направлен вдоль длинной оси образца и перпендикулярно направлению магнитного поля. Магнитные исследования проведены в центре коллективного пользования ИФМ УрО РАН с использованием магнитометра MPMS-5XL (QUANTUM DESIGN).

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведены временные зависимосэлектросопротивления поликристалла GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub> при циклическом изменении магнитного поля. Исследования проведены по схеме, примененной при исследовании эффекта тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}$  в работе [15]. Образец охлаждался в магнитном поле  $H=15\ {\rm k}$ Э от T = 300 K до T = 77 K и вначале выдерживался в таком состоянии в течение  $t \approx 4 \cdot 10^3$  с. Электросопротивление не остается постоянным в магнитном поле  $H = \mathrm{const.}$  После резкого увеличения за время  $t \sim 10^3$  с электросопротивление монотонно увеличивается примерно на 1% за время около  $4 \cdot 10^3$  с (символы 1 на левой вставке к рис. 1a и на рис. 16).

Аналогичные результаты были обнаружены при исследовании намагниченности  $GdBaCo_2O_{5.52}$  [15]: (правая вставка на рис. 1a). Временная зависимость намагниченности M(t) при H = const = 15 к $\Theta$  была



**Рис. 1.** (В цвете онлайн) Временные зависимости: a — электросопротивления  $\rho(t)$ ;  $\delta$  — относительного изменения электросопротивления  $\Delta \rho/\rho(t) = [\rho(t)-\rho(t=0)]/\rho(t=0)$ ;  $\epsilon$  — напряженности магнитного поля H(t). Левая вставка на рис. 1a: временная зависимость электросопротивления при H=15 к $\ni$  (1); быстро (fast) и медленно (slow) меняющиеся части электросопротивления; символы — эксперимент; линии — расчет. Правая вставка на рис. 1a: временная зависимость намагниченности  $M_c$  при H=15 к $\ni$  (1); быстро (fast), медленно (slow) меняющиеся части намагниченности  $M_c$ ; символы — эксперимент, линии — расчет. Поликристалл  $\mathrm{GdBaCo_2O_{5.52}}$  охлажден от T=300 К до T=77 К при H=15 кH=15 кH=16 символами показаны значения  $H_1$  и  $H_2$  из рис. H=16 (см. текст)

объяснена влиянием двух механизмов: в первом намагниченность  $M_c({\rm fast})$  быстро уменьшается за время порядка  $10^3$  с (символы 1), во втором — намагниченность далее уменьшается линейно в зависимости от времени (штрихпунктирная линия 1'). После вычитания линейной части M(t) можно выделить вклады намагниченности, меняющиеся быстро (fast) и медленно (slow) от времени. Экспериментальные данные для M(t) при  $H={\rm const}$  (символы 1) хорошо описываются (сплошные линии) выражением

$$M_c(\text{fast}) \approx m_c(\text{fast})[1 - \exp(-t/\tau_1)],$$
  
 $M_c(\text{slow}) \propto m_c(\text{slow})t$  (1)

при  $\tau_1 \approx 600$  с, где  $m_c({\rm fast}) = -3.7~{\rm M\Gamma c\cdot cm^3/r}$ ,  $m_c({\rm slow}) \approx -1.5\cdot 10^3~{\rm M\Gamma c\cdot cm^3/r\cdot c}$  — соответственно амплитуда и скорость изменения намагниченности от времени при  $H={\rm const.}$  Вклад  $M_c({\rm slow}) \propto t$  может соответствовать экспоненциальной зависимости  $1-{\rm exp}(-t/\tau)$  при  $t/\tau \ll 1$  [15].

Видно, что в целом вид зависимостей электросопротивления  $\rho(t)$  и намагниченности M(t) совпадает: уменьшение намагниченности приводит к увеличению электросопротивления. Временную зависимость электросопротивления  $\rho(t)$  при  $H_c=15~\mathrm{k}\Theta=$  сопят также можно представить как суперпозицию двух механизмов, вклад которых быстро,

 $ho_c({
m fast})$ , и медленно,  $ho_c({
m slow})$ , изменяется в зависимости от времени. Экспериментальные результаты для ho(t) при  $H={
m const}$  можно довольно хорошо описать (символы  $1-{
m эксперимент}$ , линии — расчет на левой вставке к рис. 1a) выражением

$$\rho_c(\text{fast}) \approx R_c(\text{fast})[1 - \exp(-t/\tau_2)],$$

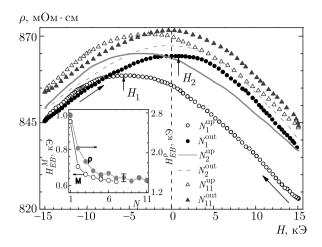
$$\rho_c(\text{slow}) \propto R_c(\text{slow})t$$
(2)

при  $\tau_2 \approx 500$  с,  $R_c({\rm fast}) = 2.6$  мОм·см,  $R_c({\rm slow}) \approx 7.3 \cdot 10^{-4}$  мОм·см/с, где  $R_c({\rm fast})$  и  $R_c({\rm slow})$  — соответственно амплитуда и скорость изменения электросопротивления от времени при H=15 кЭ. Из вставок к рис. 1 можно оценить, что изменение намагниченностей  $M_c({\rm fast})$  и  $M_c({\rm slow})$  на 1 мГс·см<sup>3</sup>/г вызывает изменения электросопротивлений  $\rho_c({\rm fast})$  и  $\rho_c({\rm slow})$  соответственно на 1 и 0.5 мОм·см.

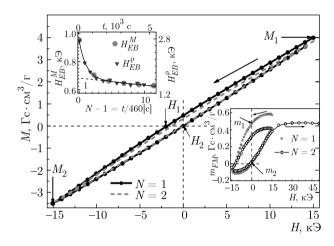
Далее проведены измерения электрического сопротивления при 11 циклах изменения магнитного поля от +15 к $\Theta$  до -15 к $\Theta$  (время одного цикла  $t_{cucl} \approx 460$  c). Видно (рис. 1a), что электросопротивление резко (почти на 4%) увеличивается после первого цикла (рис. 16), значения его не возвращаются в первоначальное состояние и увеличиваются после каждого цикла. Минимальные значения электросопротивления,  $\rho_{min1}(t)$ , достигаются в поле, при котором образец был охлажден, H = 15 к9. Значение электросопротивления  $\rho_{min1}(t, H = 15 \text{ к}\Theta)$  резко возрастает после первого цикла, а после четвертого цикла происходит практически линейный рост  $\rho_{min1}(t)$  в зависимости от времени (см. кривую 2 рис. 1а). За время 11 циклов изменения магнитного поля электросопротивление  $\rho_{min1}(t)$  увеличилось примерно на 2.5 %. Оно остается постоянным (в пределах точности измерений около 0.05%) после прекращения циклических изменений магнитного поля за время измерений  $t \approx 5 \cdot 10^3$  с при  $H = \mathrm{const} =$ = 15 кЭ (символы 3 на рис. 1a и 16).

Отметим, что после 11 циклов изменений магнитного поля на  $\pm 15$  к $\Theta$  сопротивление  $\rho(t)$  также оставалось постоянным в течение времени измерений  $t_{meas} \approx 1.2 \cdot 10^4$  с и при H=0 (данные не показаны). «Анизотропия» электросопротивления  $\Delta \rho_{an}^{cycl}(N) = \rho_{max} - \rho_{min}$ , где  $\rho_{max}$  и  $\rho_{min}$  — минимальное и максимальное значения электросопротивления для каждого цикла, резко уменьшается (от 42 до 28 мОм · см) за первые 3–5 циклов. При N>5  $(t>3\cdot 10^3$  с) она остается постоянной.

На рис. 2 приведены зависимости электросопротивления от напряженности магнитного поля для первых двух (N=1 и N=2) и последнего (N=1) циклов. Петля гистерезиса электросопротив-



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Влияние циклического изменения магнитного поля на электросопротивление поликристалла  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$ , охлажденного в магнитном поле  $15~{\rm k}$  от  $300~{\rm до}$  77 К. Приведены результаты для N=1,~2,~11 для восходящей (от  $15~{\rm дo}$   $-15~{\rm k}$ ) и исходящей (от  $-15~{\rm дo}$   $15~{\rm k}$ ) ветвей электросопротивления. Вставка: поля обменного смещения в зависимости от номера цикла, определенные из измерений намагниченности ( $H_{EB}^{\rho}$ ) и электросопротивления ( $H_{EB}^{M}$ )



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Эффект тренировки намагниченности поликристалла  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$  для двух циклов изменения магнитного поля от +15 до -15 к $extstyle{3}$ . Верхняя вставка — зависимости  $H_{EB}^{M}$  и  $H_{EB}^{\rho}$  от номера цикла N; символы — эксперимент, сплошная линия — расчет из выражения (4). Нижняя вставка — полевая зависимость намагниченности FM-частиц для двух циклов намагничивания при вычете AFM- и PM-вкладов

ления  $\rho(H)$ , как и петля гистерезиса намагниченности (рис. 3), смещена относительно H=0 и имеет асимметричный вид кривой «бабочки» с максимумами  $\rho(H)$  при  $H_1$  и  $H_2$ . Особенностью поведения электросопротивления в магнитном поле яв-

ляется однонаправленность: значение электросопротивления зависит не только от величины, но и от знака напряженности магнитного поля. В направлении магнитного поля, при котором образец был охлажден, значение электросопротивления меньше, чем при противоположном направлении магнитного поля.

Циклические изменения магнитного поля приводят к необычному поведению электросопротивления  $\rho(H)$ : оно с существенным запаздыванием по времени следует значениям напряженности магнитного поля. На первой восходящей ветви  $(N_1^{up})$  электросопротивление увеличивается от минимального значения  $\rho_{min1}$  при H=15 к $\Theta$  до максимального значения  $\rho_{max1}$  при  $H_1 \approx -5.8$  к $\Theta$ , далее уменьшается до минимального значения  $ho_{min2} > 
ho_{min1}$  при H = -15 кЭ. На исходящей  $(N_1^{out})$  ветви  $\rho(H)$  достигает максимального значения  $ho_{max2} > 
ho_{max1}$  при  $H_2 \approx 0.5 \text{ k}$  и минимального значения, существенно отличающегося от исходного значения  $ho_{min1}$  при H = -15 к $\Theta$  (рис. 2). На второй ветви и до N = 11последующих циклов значения  $\rho_{max1}$ ,  $\rho_{max2}$ ,  $\rho_{min1}$ ,  $ho_{min2}$  плавно увеличиваются после каждого цикла намагничивания, а значения  $H_1$  и  $H_2$  уменьшаются до  $H_1 \approx -2.6$  к $\ni$  и  $H_2 \approx 0$  при N=11. Изменения  $H_1$  и  $H_2$  при циклическом изменении магнитного поля показаны символами на рис. 1е.

Обменное смещение обычно характеризуется обменным полем  $H_{EB}$  [3–8]:

$$H_{EB} = (H_1 + H_2)/2,$$
 (3)

где  $H_1$  и  $H_2$  соответствуют значениям магнитного поля, при которых намагниченность петли гистерезиса меняет знак при уменьшении и увеличении напряженности магнитного поля (рис. 3). Полагаем, что поведение электросопротивления  $\rho(H)$ охлажденного в поле H=15 к $\ni$  поликристалла GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub> определяется намагниченностью образца M(H) и достигает максимальных значений при минимальных значениях намагниченности, M = 0. В этом предположении значения  $H_1$  и  $H_2$ на рис. 2 являются аналогами определения  $H_{EB}$ из измерений электросопротивления. На вставке к рис. 2 приведены значения поля обменного смещения  $H_{EB}$ , определенные из магнитных [22]  $(H_{EB}^{M})$ и электрических  $(H_{EB}^{\rho})$  измерений в зависимости от номера цикла. Видно, что значения  $H_{EB}$ , определенные из магнитных и электрических измерений, различаются почти в 2-3 раза. Такое же различие между  $H_{EB}^{\rho}$  и  $H_{EB}^{M}$  обнаружено в кобальтитах  $\mathrm{Nd}_{0.84}\mathrm{Sr}_{0.16}\mathrm{CoO}_3$  и  $\mathrm{La}_{0.88}\mathrm{Sr}_{0.12}\mathrm{CoO}_3$  [23,24]. Двукратное различие между  $H_{EB}^{
ho}$  и  $H_{EB}^{M}$  отмечено в пленочной структуре Co/CoO [25]. В некоторых работах большое различие не обнаружено [26, 27].

Полагаем, что объяснение этого казуса лежит в природе намагниченности слоистых кобальтитов и методике определения  $H_{EB}$ . При низких температурах намагниченность слоистых кобальтитов определяется в основном (более 90%) РМ-вкладом редкоземельного иона R<sup>3+</sup> и AFM-вкладом ионов Со [20,28], а намагниченность FM-частиц, вызывающая обменное смещение, мала [15]. В выражении (3) для определения  $H_{EB}$  предполагается противоположная ситуация: намагниченность FM-частиц должна быть значительно больше намагниченности матрицы [3–8]. Вследствие этого значения  $H_1$  и  $H_2$  на рис. З не соответствуют значениям магнитного поля, при которых намагниченность FM-частиц меняет знак. Малой намагниченностью FM-частиц по сравнению с намагниченностью матрицы объясняется различие между значениями  $H_{EB}^{
ho}$  и  $H_{EB}^{M}$  (см. вставку на рис. 2).

В большинстве работ по другим кобальтитам (см. ссылки в работе [8]) при определении значения  $H_{EB}$  из магнитных измерений не учитывается AFM-вклад ионов Со. Можно предположить, что из электрических измерений определяются истинные значения  $H_{EB}$ , так как намагниченность матрицы кобальтитов не влияет на положения  $H_1$  и  $H_2$ . Для исключения влияния намагниченности матрицы обменное смещение рекомендуется характеризовать асимметрией намагниченности:  $m_{EB} = (m_1 + m_2)/2$ , где  $m_1$  и  $m_2$  значения намагниченности при H = 0, как показано на нижней вставке к рис. 3 [29].

Зная временные зависимости  $H_1(t_1)$  и  $H_2(t_2)$ , см. рис. 2 и 3, можно с помощью выражения (3) определить временные зависимости  $H_{EB}^{\rho}[t=(t_1+t_2)/2]$ и  $H_{EB}^{M}[t=(t_1+t_2)/2]$  из измерений электросопротивления и намагниченности. Результаты для временных зависимостей  $H_{EB}^{\rho}$  и  $H_{EB}^{M}$  от номера цикла N, приведенные на вставке к рис. 2 и на верхней вставке к рис. 3, изображены символами. Время на нижней оси приведено в единицах длительности цикла измерения электросопротивления для сопоставления времени с номером цикла  $N = t/\tau_{cucle}$ ,  $au_{cycle} = 460$  с. Видно, что как  $H_{EB}^M$ , так и  $H_{EB}^{
ho}$  сначала резко убывают и при  $t > 3 \cdot 10^3$  с обе величины уменьшаются линейно в зависимости от времени (штриховая линия 1). В пределах точности измерений временные зависимости  $H_{EB}^{M}$  и  $H_{EB}^{\rho}$  практически совмещены (длительность цикла измерений  $H_{EB}^{M}$  была равна  $au_{cycle} = 1050$  с [15]). Этот результат показывает, что за изменения  $H_{EB}$  ответственно не число циклов, а суммарное время действия циклов. Вычитая линейные части  $H_{EB}(t)$ , мы выделим вклады, меняющиеся быстро,  $H_{EB}({\rm fast})$ , и медленно,  $H_{EB}({\rm slow})$ , — зависящие от времени части полей обменного смещения. Экспериментальные результаты для  $H_{EB}^{\rho}(t)$  (сплошная линия на верхней вставке к рис. 3) удовлетворительно описываются выражениями

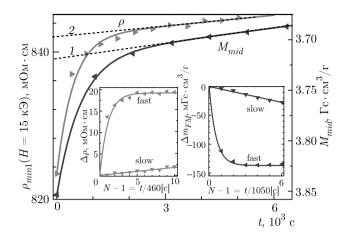
$$H_{EB}^{\rho}(\mathrm{fast}) \approx h_{EB}(\mathrm{fast})[1 - \exp(-t/\tau_2)],$$
  
 $H_{EB}^{\rho}(\mathrm{slow}) \propto h_{EB}(\mathrm{slow})t$  (4)

при  $\tau_2 \approx 500$  с,  $h_{EB}({\rm fast}) = -1.12$  кЭ,  $h_{EB}({\rm slow}) \approx -4.23 \cdot 10^{-5}$  кЭ/с, где  $h_{EB}({\rm fast})$  и  $h_{EB}({\rm slow})$  — соответственно амплитуда и скорость изменения  $H_{EB}^{\rho}$  от времени [15].

На рис. 3 приведен эффект тренировки намагниченности поликристалла GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5,52</sub> для двух циклов изменения магнитного поля от +15 до -15 к $\ni$  из семи проведенных [15]. Видно большое сходство между петлями гистерезиса электросопротивления  $\rho(H)$  на рис. 2 и намагниченности M(H)на рис. 3. Петля гистерезиса M(H) несимметрична относительно H=0 и M=0: она сдвинута вверх по намагниченности и влево по напряженности магнитного поля. Намагниченность уменьшается и не возвращается в исходное состояние, однако изменения ее малы (см. значения  $M_1$  и  $M_2$ на рис. 3) по сравнению с изменениями электросопротивления (см. рис. 2). Причина та же: намагниченность FM-кластеров мала относительно вклада AFM-ионов Со и РМ-ионов Gd<sup>3+</sup> [15]. На нижней вставке к рис. 3 показана полевая зависимость намагниченности FM-кластеров,  $m_{FM}$ , при вычете AFM-вклада ионов Co<sup>3+</sup> и PM-подсистемы ионов Gd<sup>3+</sup> [15]. Видно, что после первого цикла намагниченность  $m_{FM}$  при  $H=15~{\rm k}$  не возвращается в исходное состояние, она уменьшается на  $0.2 \, \Gamma c \cdot cm^3/\Gamma$ (более 30%) по сравнению с намагниченностью первого цикла и практически не зависит от H до 50 к $\Theta$ . Намагниченность при H = -15 к $\Theta$  также уменьшается, но гораздо меньше. Этот эксперимент показывает, что намагниченность FM-кластеров уменьшается при циклическом перемагничивании. Временные зависимости намагниченности FM-кластеров были определены [15] из измерений средней намагниченности (рис. 3):

$$M_{mid}(t) =$$
  
=  $[M_1(H = +15 \text{ K}\Theta) - M_2(H = -15 \text{ K}\Theta)]/2.$  (5

На рис. 4 приведена (символы — эксперимент, сплошная линия — расчет из (6)) временная зависимость намагниченности  $M_{mid}(t)$  для семи циклов



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Временные зависимости намагниченности  $M_{mid}$  и электросопротивления  $\rho$  при циклическом изменении магнитного поля от +15 до -15 к $\Theta$ . Символы — экспериментальные значения M(t) и  $\rho(t)$  при H=15 к $\Theta$ , линии — расчет (см. текст). Вставки — медленно (slow) и быстро (fast) зависящие от времени части электросопротивления  $\Delta\rho$  и намагниченности FM-кластеров,  $\Delta m_{FM}$ . Поликристалл  $\mathrm{GdBaCo_2O_{5.52}}$ , охлажден в магнитном поле 15 к $\Theta$  от T=300 K до T=77 K

намагничивания [15]. Значение  $M_{mid}(t)$  после первого цикла резко убывает, далее почти линейно уменьшается со временем. Поведение  $M_{mid}(t)$  обусловлено изменениями намагниченности FM-кластеров  $m_{FM}(t)$  на фоне AFM-вклада ионов Со и PM-подсистемы  $\mathrm{Gd}^{3+}$ . Нет никаких оснований полагать, что AFM- или PM-подсистема  $\mathrm{Gd}^{3+}$  зависит от циклических намагничиваний. После вычитания линейной части  $M_{mid}(t)$  (штриховая линия 1 на рис. 4) в работе [15] выделены вклады в намагниченность FM-частиц, меняющиеся быстро (fast) и медленю (slow) в зависимости от времени. Эти вклады удовлетворительно описываются (символы — эксперимент, линии — расчет на правой вставке к рис. 4) выражениями

$$M_{cycl}(\text{fast}) \equiv m_{FM}(\text{fast}) =$$
  
=  $m_{cycl}(\text{fast})[1 - \exp(-t/\tau_1)],$  (6)

$$M_{cycl}({\rm slow}) \equiv m_{FM}({\rm slow}) \propto m_{cycl}({\rm slow})t$$

при  $\tau_1 \approx 575 \pm 25$  с,  $m_{cycl}({\rm fast}) = -137\,{\rm MFc}\cdot{\rm cm}^3/{\rm r}$ , где  $m_{cycl}({\rm fast})$  и  $m_{cycl}({\rm slow})$ — соответственно амплитуда и скорость изменения намагниченности FM-кластеров от времени [15].

На рис. 4 приведена временная зависимость электросопротивления  $\rho_{min1}$  ( $H=15~{\rm k}$ Э) для 11 циклов перемагничивания (символы — эксперимент, сплошная линия — расчет из выраже-

ния (7)) по данным рис. 1. Видно, что зависимости  $M_{mid}(t)$  и  $\rho(t)$  имеют одинаковый характер. За время  $t \approx (2-3) \cdot 10^3$  с намагниченность резко уменьшается, а электросопротивление резко увеличивается, далее  $M_{mid}(t)$  и  $\rho(t)$  медленно меняются в зависимости от времени (штриховые линии 1 и 2). Временную зависимость электросопротивления  $\rho(t)$  при циклическом перемагничивании также можно представить как суперпозицию двух механизмов, вклад которых быстро (fast), медленно (slow) и линейно изменяется в зависимости от времени. Вычитая линейную часть  $\rho(t)$  (штриховая линия 2 на рис. 4), можно выделить вклады электросопротивления, меняющиеся быстро,  $\rho_{cucl}(\text{fast})$ , и медленно,  $\rho_{cucl}(\text{slow})$ , в зависимости от времени. На вставке к рис. 4 эти вклады показаны символами. Экспериментальные результаты для  $\rho(t)$  удовлетворительно описываются (сплошные линии 2 на рис. 1а и на левой вставке к рис. 4) выражениями

$$\rho_{cycl}({\rm fast}) \approx R_{cycl}({\rm fast})[1 - \exp(-t/\tau_2)],$$

$$\rho_{cycl}({\rm slow}) \propto R_{cycl}({\rm slow})t$$
(7)

при  $\tau_2 \approx 500$  с,  $R_{cycl}({\rm fast}) = 18.9$  мОм·см,  $R_{cycl}({\rm slow}) \approx 3.1 \cdot 10^{-4}$  мОм·см/с, где  $R_{cycl}({\rm fast})$  и  $R_{cycl}({\rm slow})$  — соответственно амплитуда и скорость изменения электросопротивления от времени.

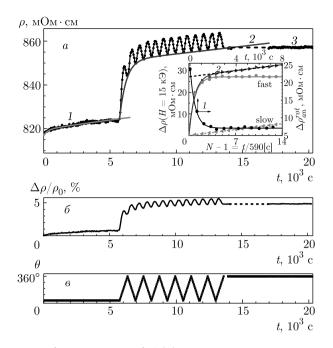
Видно также, за изменения M(t) и  $\rho(t)$ , повидимому, ответственно не число циклов, а суммарное время действия циклов. За время  $t\approx 3\cdot 10^3$  с происходят основные изменения намагниченности за 2–3 цикла ( $\tau_{cycl}=1050$  с), в то время как для достижения таких же изменений электросопротивления нужно проделать 5–6 циклических изменений магнитного поля ( $\tau_{cycl}=460$  с). Для сопоставления значений  $\Delta\rho$  и  $\Delta m_{FM}$  с номером цикла N время на вставках приведено в единицах длительности цикла.

Быстро меняющиеся от времени вклады в намагниченность,  $M_{cyc}({\rm fast})$ , и в электросопротивление,  $\rho_{cycl}({\rm fast})$ , описываются выражениями (2), (6) и (7) с немного различающимися (около 15%) временами затухания  $\tau$ . Результаты можно объяснить тем, что электросопротивление не прямо пропорционально зависит от намагниченности, а определяется некоторой функциональной зависимостью от намагниченности. Из сравнения выражений (2) и (6) видно, что при циклическом перемагничивании амплитуда быстро меняющейся части электросопротивления увеличивается примерно в 7 раз по сравнению с той же амплитудой при  $H={\rm const}, R_{cycl}({\rm fast})/R_{cycl}({\rm fast}) \approx 7$ , а амплитуда медленно меняющейся части электросопротивления даже умень-

шается,  $R_{cycl}(\mathrm{slow})/R_{cycl}(\mathrm{slow})\approx 0.5$ . Из вставок на рис. 4 можно оценить, что уменьшение намагниченности  $\Delta m_{FM}$  на 10 м $\Gamma c \cdot \mathrm{cm}^3/\Gamma$  вызывает увеличение электросопротивлений  $\rho_{cycl}(\mathrm{fast})$  и  $\rho_{cycl}(\mathrm{slow})$  примерно на соответственно 1.4 и 0.8 м $\mathrm{Om}$ . Эти оценки подтверждают, что за быстрое (fast) и медленное (slow) изменения свойств поликристалла  $\mathrm{GdBaCo_2O_{5.52}}$  ответственны разные механизмы.

Следующим этапом было изучение влияния на электросопротивление отклонения магнитного поля от направления, в котором образец был охлажден, т. е. от направления поля обменного смещения. Ток был направлен вдоль длинной оси и перпендикулярно направлению магнитного поля, т.е. исследовалось поперечное магнитосопротивление. Исследования проведены по аналогичной схеме. Образец сначала охлаждался в магнитном поле  $H=15~{\rm k}$ 9 от  $T = 300 \; {\rm K}$  до  $T = 77 \; {\rm K}$  и выдерживался в таком состоянии в течение  $t \approx 6 \cdot 10^3$  с. После этого измерения электросопротивления проведены при повороте образца на  $\theta = 30^{\circ}$  примерно через 50 с. После достижения  $\theta = 360^{\circ}$  вращение образца совершалось в противоположном направлении. Проведено 13 циклов  $(t_{cucl} = 590-600 \text{ c})$  таких измерений за время около 8000 с.

Временная зависимость электросопротивления  $\rho_{rot}(t)$  при 77 К и  $\theta = 0$  и H = const = 15 кЭ (символы 1 на рис. 5) такая же, как и на рис. 1: после резкого начального роста электросопротивление далее монотонно увеличивается за время измерений  $t \approx 6 \cdot 10^3$  с (символы и линия 1) и описывается также выражением (2). Удивительно (см. рис. 5), что качественно эффект тренировки вращения при  $H=15 \text{ к} \ni = \text{const}$  очень похож на эффект тренировки электросопротивления при циклическом перемагничивании (см. рис. 1). Видно (рис. 5a), что электросопротивление также резко (примерно на 3%) растет после первого цикла (рис. 56), значения его увеличиваются и не возвращаются в первоначальное состояние после каждого цикла. Минимальные значения электросопротивления  $\rho_{min}(t)$  достигаются в направлении поля, при котором образец был охлажден,  $\theta = 0 \ (360^{\circ})$ . Максимальное значение  $\rho_{max}$  электросопротивление принимает при  $\theta \approx 180^\circ$ после 5-6 полных оборотов вращения образца. Значения  $\rho_{min}$  и  $\rho_{max}$  резко возрастают после первого цикла, а после четвертого цикла происходит практически линейный рост  $\rho_{min}$  в зависимости от времени (см. кривую 2 на рис. 5а). Электросопротивление  $\rho_{min}$  увеличивается на 5% от своего начального состояния после прекращения вращения образца, и оно остается неизменным за время измерения до



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Эффект тренировки электросопротивления для 13 циклов вращения образца. a) Зависимость электросопротивления от времени; вставка (левая и нижняя оси) — медленно (slow) и быстро (fast) зависящие от времени части электросопротивления  $\Delta \rho(H=15~{\rm K})$ ,  $\theta=0(360^\circ)$ ) от номера N цикла вращения, символы 2 — эксперимент, линии — расчет из выражения (8), а также (правая и верхняя оси) — временная зависимость анизотропии вращения  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t)=\rho_{max}-\rho_{min}$ , символы — эксперимент, линия 1 — расчет из выражения (9).  $\delta$ ) Относительное изменение электросопротивления  $\Delta \rho(t)=\rho(t)-\rho(t=0)$ .  $\epsilon$ ) Временная зависимость угла отклонения магнитного поля от направления охлаждения. Поликристалл  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$ , охлажден в магнитном поле  $15~{\rm K}$ 9 от  $T=300~{\rm K}$  до  $T=77~{\rm K}$ 

 $t \ge 6 \cdot 10^3$  с (штриховая линия и символы 3 на рис. 5a) в пределах точности измерений  $\pm 0.05\,\%$ .

На вставке к рис. 5a символами 2 приведена временная зависимость изменения электросопротивления  $\Delta \rho$  при H=15 к $\Theta$  и  $\theta=0$  ( $360^\circ$ ) при циклическом вращении. Время приведено в единицах длительности цикла для сопоставления времени с номером цикла  $N=t/\tau_{cycl}$ . Электросопротивление  $\Delta \rho(t)$  резко растет за первые три цикла. При N>5–6 ( $t>3\cdot 10^3$  с) происходит медленное, линейное от времени, увеличение значений  $\Delta \rho$ . Временную зависимость электросопротивления  $\Delta \rho$  при циклическом вращении образца также можно представить как суперпозицию двух механизмов, вклад которых быстро (fast) и медленно (slow) изменяется в зависимости от времени. Вычитая линейную часть  $\Delta \rho(t)$  (штри-

ховая линия), мы выделили вклады электросопротивления, меняющиеся быстро,  $\rho_{cycl}({\rm fast})$ , и медленно  $\rho_{cycl}({\rm slow})$ , в зависимости от времени. На вставке к рис. 5a символами показаны эти вклады в  $\Delta \rho$  при циклическом вращении образца и  $\theta=0$  ( $360^{\circ}$ ). Экспериментальные результаты для  $\rho(t)$  довольно хорошо описываются (сплошная линия 2 на рис. 5 и сплошные линии на вставке к рис. 5) выражениями

$$\rho_{rot}(\text{fast}) \approx R_{rot}(\text{fast})[1 - \exp(-t/\tau_2)],$$

$$\rho_{rot}(\text{slow}) \approx R_{rot}(\text{slow})t$$
(8)

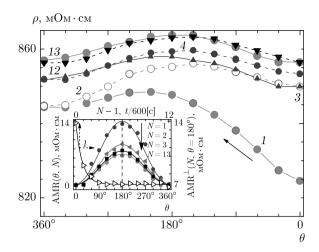
при  $\tau_2 \approx 500$  с,  $R_{rot}({\rm fast}) = 27.4$  мОм·см,  $R_{rot}({\rm slow}) \approx 6.47 \cdot 10^{-4}$  мОм·см/с, где  $R_{rot}({\rm fast})$  и  $R_{rot}({\rm slow})$  — соответственно амплитуда и скорость изменения электросопротивления от времени при циклическом вращении образца. Вклады  $R_{rot}({\rm slow}) \propto t$  в (8), как и  $R_{cycl}({\rm slow})t$  в (7), могут соответствовать экспоненциальной зависимости  $1 - \exp(-t/\tau)$  при  $t/\tau \ll 1$ .

Из выражений (2) и (8) следует, что скорости изменения электросопротивления от времени при вращении образца при постоянных значениях H= = const = 15 к $\ni$  примерно одинаковы,  $R_{rot}(\mathrm{slow}) \approx R_{cycl}(\mathrm{slow})$ . Та же самая скорость (см. выражение (7)) при циклическом перемагничивании примерно в 2 раза меньше. Амплитуда изменения электросопротивления при циклическом перемагничивании  $R_{cycl}(\mathrm{fast})$  в 1.5 раза меньше, чем амплитуда  $R_{rot}(\mathrm{fast})$  при вращении образца. Можно предположить, что эти особенности связаны с изменениями намагниченности FM-частиц при циклическом перемагничивании (возможно, связанные с потерями на гистерезис).

На вставке к рис. 5 символами 1 приведена временная зависимость «анизотропии» вращения электросопротивления  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t) = \rho_{max} - \rho_{min}$ , где  $\rho_{min}$  и  $\rho_{max}$  — минимальное и максимальное значения электросопротивления на каждом цикле вращения. Анизотропия резко уменьшается за первые 3–4 цикла вращения и принимает постоянное значение  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t) \approx 7.0 \pm 0.2 \ \text{мОм} \cdot \text{см/c}$  при N > 5–6 ( $t > > 5 \cdot 10^3$  с) в пределах точности наших измерений. Зависимость анизотропии вращения магнитосопротивления от времени (и от номера цикла) хорошо описывается выражением (время приведено в единицах длительности цикла для сопоставления времени с номером цикла  $N = t/\tau_{cycl}$ )

$$\Delta \rho_{an}^{rot}(t, N) = 23.9 - 16.9[1 - \exp(-t/\tau_2)]$$
 (9)

при  $\tau_2 \approx 500$  с (сплошная линия 1 на вставке к рис. 5).



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Угловая зависимость электросопротивления  $\rho(\theta,H=15\,\,\Im)$ , где  $\theta$  — угол отклонения магнитного поля от направления поля охлаждения (символы — эксперимент, линии — для наглядности) при циклическом вращении образца для N=1-4 и  $N=12,\,13.$  Вставка: угловая зависимость анизотропии магнитосопротивления при H=15 к $\Im$  для N=1-3, 13, символы — эксперимент, линии — расчет из (10), а также временная зависимость анизотропии поперечного магнитосопротивления  $\mathrm{AMR}^\perp(\theta)$  при  $\theta=180^\circ$ , символы — эксперимент, линии — расчет из (12). Поликристалл  $\mathrm{GdBaCo_2O_{5.52}}$  охлажден в магнитном поле 15 к $\Im$  от T=300 K до T=77 K

На рис. 6 приведена угловая зависимость электросопротивления  $\rho(\theta, 15 \text{ k}\Theta)$  при отклонении образца от направления поля, в котором он был охлажден, для N = 1-4, и N = 12, 13 по данным рис. 5. Как и следовало ожидать, на анизотропию магнитосопротивления накладывается зависимость электросопротивления от времени (см. рис. 5). Видно, что при каждом повороте на 360° электросопротивление увеличивается, значения его не возвращаются в исходное состояние, а наибольшие изменения его происходят после первых двух циклов: N = 1, 2. После вычитания из  $\rho(\theta)$  (рис. 6) зависящего от времени электросопротивления  $\Delta \rho(t)$  при H=15 к $\Theta$  и  $\theta=0$  $(360^{\circ})$  (кривая 2 на вставке к рис. 5) выделена угловая зависимость анизотропии поперечного магнитосопротивления  $AMR^{\perp}(\theta)$  в зависимости от номера цикла. На вставке к рис. 6 (левая ось) символами приведены угловые зависимости  $AMR^{\perp}(\theta)$  для первых трех (N = 1-3) и последнего (N = 13) циклов. Видно резкое уменьшение  $\mathrm{AMR}^{\perp}(N)$  после первого цикла и слабое изменение этой величины при N>3. Угловая зависимость  $AMR^{\perp}(\theta)$  удовлетворительно описывается (сплошные линии на вставке к рис. 6) энергией обменной анизотропии  $E \propto -K \cos \theta$  [1,2]:

$$AMR^{\perp}(\theta) = AMR^{\perp}(N, \theta = 180^{\circ})(1 - \cos \theta) =$$

$$= 2AMR^{\perp}(N, \theta = 180^{\circ})\sin^{2}(\theta/2), \quad (10)$$

где  $\mathrm{AMR}^\perp(N,\theta=180^\circ)$  — поперечная анизотропия магнитосопротивления при  $\theta=180^\circ$  и значении N,  $\theta$  — угол отклонения магнитного поля от направления поля обменного смещения.

В данной работе изучено поперечное магнитосопротивление, когда направления тока и магнитного поля были взаимно перпендикулярны. В этом случае величина  $\mathrm{AMR}^\perp(\theta)$  имеет минимальное значение при  $\theta=0$ , максимальное — при  $\theta=180^\circ$ . В работе [25] приведены экспериментальные данные угловой зависимости продольного магнитосопротивления (ток и поле направлены в плоскости пленки) для слоистой структуры  $\mathrm{Co/CoO}$ . Данные работы [25] для продольной анизотропии магнитосопротивления хорошо описываются выражением

$$AMR^{\parallel}(\theta) = [AMR^{\parallel}(\theta = 0)](1 + \cos \theta) =$$
$$= 2[AMR^{\parallel}(\theta = 0)]\cos^{2}(\theta/2). \quad (11)$$

В этом случае продольная анизотропия магнитосопротивления  $\mathrm{AMR}_{an}^{\parallel}(\theta)$  имеет минимальное значение при  $\theta=180^{\circ},$  а максимальное — при  $\theta=0.$ 

Анизотропия поперечного магнитосопротивления  $\mathrm{AMR}^\perp(\theta=180^\circ)$  убывает (символы 1 на вставке к рис. 6) с увеличением циклических изменений и при N>5 ( $t>3\cdot10^3$  с) в пределах точности наших измерений остается постоянной. Временная зависимость  $\mathrm{AMR}^\perp(t,\theta=180^\circ)$  удовлетворительно описывается выражением

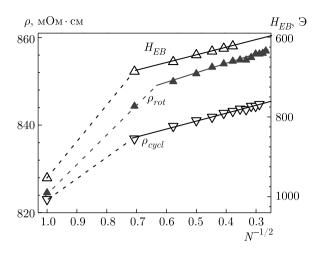
$$AMR^{\perp}(t, \theta = 180^{\circ}) = 13.8 - 7.0[1 - \exp(-t/\tau_2)]$$
 (12)

при  $\tau_2 \approx 500$  с (символы — эксперимент, линия 1 — расчет, см. вставку к рис. 6). Время приведено в единицах длительности цикла для сопоставления времени с номером цикла  $N=t/\tau_{cucl}$ .

«Анизотропия» электросопротивления

$$\Delta \rho_{an}^{cycl}(N) = \rho_{max} - \rho_{min}$$

резко уменьшается за время  $t\approx 3\cdot 10^3$  с  $(N\leq 5)$  как при циклическом изменении магнитного поля (см. рис. 1), так и при вращении образца,  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t,N)$  (см. выражение (9) и вставку на рис. 5). Далее они остаются постоянными. Такое поведение анизотропий как продольного магнитосопротивления  $\mathrm{AMR}^\perp(t)$ , так и электросопротивления,  $\Delta \rho_{an}^{cycl}(t,N)$  и  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t,N)$ , показывает, что намагниченность FM-частицы уменьшается за время  $t\approx 3\cdot 10^3$  с  $(N\leq 5)$ ;



**Рис. 7.** Эффекты тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}$  [15] и электросопротивления при циклическом намагничивании и вращении. Поликристалл  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$  охлажден от 300 до 77 K при H=15 к $\Theta$ 

далее при циклических изменениях магнитного состояния в течение времени  $t\approx 5\cdot 10^3$  с намагниченность не меняется  $(N\leq 13)$ .

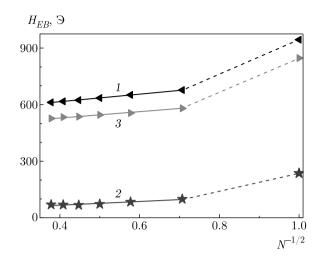
После 11 циклов изменений магнитного поля  $\pm 15$  к $\Theta$  сопротивление поликристалла  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$  (см. рис. 1) оставалось постоянным в течение времени измерений  $t_{meas}\approx 1.2\cdot 10^4$  с при H=0. Такое поведение  $\rho(t)$  показывает, что время релаксации FM-частиц во много раз больше времени измерений:  $\tau\gg t_{meas}\approx 1.2\cdot 10^4$  с.

Обычно связь между  $H_{EB}$  и N при эффекте тренировки задается известным эмпирическим выражением при N>1 или N>2 [14]:

$$H_{EB}(N) = H_{EB}^{eq} + K_H / N^{1/2},$$
 (13)

где  $H_{EB}^{eq}$  — равновесное значение  $H_{EB}$  при бесконечном цикле намагничивания,  $K_H$  — некоторая постоянная величина. Для установления аналогии между эффектами тренировки электросопротивления и поля обменного смещения  $H_{EB}$  временные зависимости электросопротивления при циклическом изменении магнитного поля (см. рис. 4) и вращении образца (см. рис. 5) изображены на рис. 7 степенным соотношением (13). Видно, что эффекты тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}$  [15] и электросопротивления имеют одинаковый характер: они резко изменяются после первого цикла, а при последующих циклах описываются известным эмпирическим выражением [14]

$$\rho_{\text{cycl}}(N), \rho_{rot}(N) \propto N^{-1/2}$$



**Рис. 8.** Эффекты тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}$  неразмагниченного (1), размагниченного при  $T=270~{\rm K}>T_N~(2)$  и намагниченного в поле  $50~{\rm k}$ Э (3) поликристалла  ${\rm GdBaCo_2O_{5.52}}$  (см. текст)

при N>1 или N>2. Одинаковый характер поведения  $\rho(N)$  и  $H_{EB}(N)$  показывает, что они являются аналогами  $H_{EB}$ , а причиной эффекта тренировки электросопротивления и  $H_{EB}$  являются одни и те же механизмы.

В работе [15] предполагалось, что среда неоднородна и в ней имеются мелкие (однодоменные) и крупные (многодоменные) FM-частицы. Природа первого типа эффекта тренировки (резкое уменьшение  $M(t) \propto H_{EB}(t)$  после первого цикла и отклонение  $H_{EB}(N)$  от известного эмпирического соотношения  $H_{EB}(N) \propto N^{-1/2}$ ) объяснялось превращением крупных FM-частиц в многодоменное состояние и размагничиванием их при циклическом изменении магнитного поля. Для проверки этого предположения проведены измерения эффекта тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}$  поликристалла  $GdBaCo_{2}O_{5.52}$  в магнитном поле  $\pm 15$  к $\Theta$  без процесса и с процессом размагничивания. В первом случае образец, как обычно, охлаждался при  $H=15~{\rm k}$  от 300 до 77 К (символы 1 на рис. 8). Во втором случае при  $T_N < T = 270 \text{ K} < T_C$  образец размагничивался циклическим уменьшением напряженности и изменением знака магнитного поля в течение примерно 30 мин от 15 к $\ni$  до  $H\approx 0$  и  $M\approx 0$  (символы 2на рис. 8). Видно, что в размагниченном образце величины  $H_{EB}$  уменьшаются почти на порядок. Далее размагниченный образец был намагничен (при 77 К) в магнитном поле 50 кЭ и измерялся эффект тренировки  $H_{EB}$  (символы 3 на рис. 8). Значения  $H_{EB}$ увеличились, но были меньше примерно на 100 Э от значений  $H_{EB}$  исходного неразмагниченного образца. Видно, что эффекты тренировки  $H_{EB}$  описываются эмпирическим выражением (13).

Предполагаем, что при охлаждении в поле 15 кЭ образуются FM-частицы разных размеров — мелкие однодоменные и крупные многодоменные — и все они вызывают обменное смещение (символы 1 на рис. 8). При охлаждении ниже  $T_N$  при H=0 крупные размагниченные FM-частицы с M=0 не создают обменного смешения. Однодоменные FM-частицы при  $H \approx 0$  выстраиваются в противоположных направлениях, создают  $H_{EB}$  разного знака и также не создают сдвига петли гистерезиса ниже  $T_N$ , что объясняет малые значения  $H_{EB}$  (символы 2 на рис. 8). Циклическое перемагничивание в поле 15 кЭ, по-видимому, не может их разъединить. Только в магнитном поле 50 кЭ они разъединяются. Предполагаем, что уменьшение  $H_{EB}$  до 100  $\Theta$  связано с размагничиванием крупных многодоменных FM-частиц, и очевидно, что они не ответственны за резкое уменьшение  $H_{EB}$  после первого цикла.

В большинстве теорий по обменному смещению считается, что эффект тренировки обусловлен нестабильностью AFM-подсистемы [5-10, 13]. Известное выражение для двухслойных FM-AFM-структур [3, 9, 10],

$$H_{EB} = -J \frac{S_{AF} S_{FM}}{t_{FM} M_{FM}},\tag{14}$$

описывает зависимость поля смещения от обменной связи J между намагниченностями FM-слоя  $(S_{FM})$  и интерфейса AFM/FM  $(S_{AF})$ ,  $t_{FM}$  и  $M_{FM}$  — соответственно толщина и намагниченность насыщения FM-слоя. Поскольку FM-слой гетероструктуры AFM/FM насыщается после каждой петли, обычно предполагается, что последовательное уменьшение магнитного момента интерфейса может происходить только из-за AFM-составляющей. Хотя этот феноменологический подход не затрагивает микроскопического происхождения намагниченности интерфейса, такая запись обменного смещения предполагает, что тренировочный эффект может происходить только от обучения  $S_{AF}$  [9].

Авторы работ [1,2] для объяснения своей модели рассматривали изолированную однодоменную сферическую FM-частицу в AFM-оболочке. В этом отношении наш эксперимент соответствует этой модели: AFM-среда, FM-частицы размером 3–4 нм на удалении 20 нм [22]. Обменное взаимодействие между атомами, расположенными по разные стороны границы фаз, при охлаждении в магнитном поле ниже  $T_N$  вызывает корреляцию спинов FM-частиц

и АҒМ-матрицы вдоль направления магнитного поля. Происходит закрепление (пиннинг) намагниченности в интерфейсе ҒМ/АҒМ, которое действует как некоторое эффективное поле, что вызывает смещение петли гистерезиса [2]. Обменное поле смещения в этой модели рассматривается как баланс между зеемановской энергией ҒМ-частиц и поверхностной энергией обменного взаимодействия интерфейса [29]:

$$N_V g \mu_B H_{EB} = -\frac{N_i J_i m_i}{g \mu_B},\tag{15}$$

где  $N_V$  и  $N_i$  — число спинов внутри соответственно объема FM-слоя и неупорядоченной AFM-оболочки,  $J_i$  — постоянная обмена,  $m_i$  — намагниченность интерфейса,  $\mu_B$  — магнетон Бора, g — гиромагнитный фактор. Выражение (14) для двухслойных структур FM-AFM легко восстанавливается путем внесения соответствующих замен в выражении (15), например,  $N_i/N_V \to a/t_{FM}$ , где a — параметр решетки [29]. Из выражения (15) очевидно, что эффект тренировки может происходить вследствие нестабильности как FM-, так и AFM-подсистемы. Видно также, что уменьшение числа спинов  $N_V$  внутри объема FM-слоя уменьшает  $H_{EB}$ .

Неель указывал, что в малых невзаимодействующих однодоменных частицах время релаксации намагниченности зависит от их объема и необходимо учитывать спонтанные вращения намагниченности из-за тепловых флуктуаций, которые вызывают своего рода магнитное броуновское движение [18]. Однодоменные частицы в целом очень похожи на парамагнитный атом, имеющий большой магнитный момент. Чтобы показать сходство и различие, Бин назвал их «суперпарамагнитиками» [30]. После выключения магнитного поля остаточная намагниченность M(t) однодоменных частиц уменьшается со временем по экспоненциальному закону [18]:

$$M(t) = M(0) \exp(-t/\tau), \tag{16}$$

где M(0) — начальное значение намагниченности. Время магнитной релаксации  $\tau$  однодоменных частиц, как установил также Неель, следует закону Аррениуса и увеличивается с понижением температуры [18]:

$$\tau = \tau_0 \exp(K_{an} V/kT),\tag{17}$$

где предэкспоненциальный множитель  $\tau_0 \approx 10^{-9}$  с — время спонтанных изменений намагниченности из-за тепловых флуктуаций [30], V — объем частицы и  $K_{an}$  — плотность энергии магнитной анизотропии. Время релаксации сильно зависит от объема частицы. В зависимости от

отношения  $K_{an}/kT$  время магнитной релаксации однодоменной частицы может меняться от нескольких секунд до нескольких лет [18].

В первых работах 1956-57 гг. авторы открытия обменного смещения в структуре Со/СоО для объяснения своей модели рассматривали однодоменную частицу как источник создания маленького постоянного магнетика [1,2]. Впоследствии были обнаружены обменное смещение во многих соединениях и сплавах, не похожих на структуру Со/СоО [3, 31]. Майклджон в обзорной статье 1962 г. [32] уже не подчеркивал однодоменность FM-частиц. В работах [3–13] и в других известных нам работах в настояшее время нигле не используется однодоменность FM-частиц. Полагаем, что причина связана с временным масштабом измерительного процесса [33]. В большинстве работ по обменному смещению обычно осуществляется регистрация поля  $H_{EB}$  после первого цикла его изменения с температурой или от поля охлаждения и т. п. [3-13]. В таких работах однодоменность FM-частиц (т. е. временной масштаб измерительного процесса и релаксация намагниченности FM-частицы в течение определенного времени) не важна. Обнаружение обменного смещения во многих соединениях и сплавах при обычных временах измерений  $t_{meas} \sim 10^2 - 10^3$  с показывает, что время релаксации намагниченности FM-частиц  $\tau \geq t_{meas}$ . При достаточно быстрых измерениях, когда переходы между минимумами энергии не успевают произойти, на кривой перемагничивания может наблюдаться гистерезис [33], и возможна регистрация обменного смещения в короткоживущих суперпарамагнитных частицах. Однодоменность и времена релаксации важны, когда изучаются длительные процессы, например, при исследованиях эффекта тренировки.

После нескольких  $(N \sim 4-5,$  или  $t>3\cdot 10^3$  с) циклических изменений магнитного состояния образца анизотропии электросопротивления  $\Delta \rho_{an}^{rot}(t,N)$  и магнитосопротивления  $\mathrm{AMR}^{\perp}(t,N)$  (см. вставки на рис. 5 и 6), а также анизотропия электросопротивления  $\Delta \rho_{an}^{cycl}(t,N)$  (см. рис. 1) уменьшаются и принимают постоянные значения. При этом  $\rho(t)=$  сопят при H=0 за время измерений  $t_{meas}\sim 10^4$  с. Предполагаем, что при циклических изменениях магнитного состояния происходит размагничивание FM-частиц малого объема. Кобальтит GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub> переходит из одного неравновесного состояния  $(\tau \sim 500 \text{ c})$  в другое (стационарное или неравновесное) состояние с  $\tau \gg t_{meas} \sim 10^4$  с.

Впервые в слоистых кобальтитах смещенная петля гистерезиса намагниченности и однонаправ-

ленная анизотропия электросопротивления были обнаружены в поликристаллах и монокристаллах ЕиВаСо<sub>2</sub>О<sub>5 5</sub> [17]. Предполагалось, что неравновесное состояние и обменное смещение являются неслучайными явлениями. Однако в приготовленных на воздухе образцах  $RBaCo_2O_{5.5+\delta}$ , где R = Gd, Tb, эффект однонаправленной анизотропии не был обнаружен [17]. Позже было установлено, что обменное смещение возникает при отжиге  $GdBaCo_2O_{5+\delta}$  в кислороде в дырочном ( $\delta > 0.5$ ) кобальтите при наличии около  $3-4\,\%$  ионов  $\mathrm{Co}^{4+}$  в основной матрице из ионов Со<sup>3+</sup> и исчезает при отжиге в атмосфере аргона в электронном ( $\delta < 0.5$ ) кобальтите [22]. Известно, что в кобальтитах  $R_{1-x}Me_xCoO_3$ , где Me двухвалентный металл, двойной обмен между ионами Co<sup>3+</sup> и Co<sup>4+</sup> ведет к образованию FM-кластеров и что эти случайно легированные оксиды создают ансамбль FM-областей. Предполагалось, что и в слоистых кобальтитах обменное смещение также обусловлено фазовым расслоением на FM-кластеры в АҒМ-матрице из-за двойного обмена между ионами  $Co^{3+}$  и  $Co^{4+}$  [22]. Влияние избытка кислорода на фазовое расслоение в слоистых кобальтитах отмечалось и ранее [20]. Из исследований влияния поля охлаждения  $H_{cool}$  на обменное смещение  $H_{EB}$ и из намагниченности FM-частиц  $m_{FM}$  после первого цикла (нижняя вставка на рис. 3) в работе [22] был оценен магнитный момент FM-частиц  $\mu_{FM} \approx (1-2) \cdot 10^3 \mu_B$ , их размер  $d_{FM} \approx 3-4$  нм и расстояние между ними примерно 20 нм. Неявно предполагалось, что все частицы имеют одинаковый размер. По-видимому, существует целый набор разного размера FM-частиц, и они по-разному влияют на обменное смещение.

Предполагаем, что результаты эффекта тренировки связаны с существованием в исследованном поликристалле GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub> однодоменных частиц, время размагничивания которых изменяется в больших пределах от  $\tau \sim 500 \text{ с до } \tau \gg 10^4 \text{ с.}$ Нам неизвестны значения кристаллографической анизотропии  $GdBaCo_2O_{5.52}$ . Вследствие своей слоистости, это соединение обладает высокой анизотропией, и можно предположить, что значения  $K_{an} \sim 10^6 - 10^7$  эрг/см<sup>3</sup> являются разумными. Оценки по выражениям (16), (17) показывают, что время релаксации намагниченности при размерах FM-частицы от 2 до 10 нм может меняться от нескольких секунд до лет в широком интервале  $K_{an} \sim 10^6 - 10^7 \text{ эрг/см}^3$ . Неравновесное состояние слоистых кобальтитов, зависимость их намагниченности, электросопротивления от времени [15, 17, 22] связаны с влиянием мелких FM-частиц. Крупные FM-частицы с  $\tau\gg 10^4$  с ответственны за медленные изменения намагниченности, электросопротивления,  $H_{EB}$  и других параметров.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для изолированной однодоменной сферической FM-частицы в AFM-окружении эффект тренировки может происходить вследствие нестабильности как FM-, так и AFM-подсистемы. За изменением поля обменного смещения  $H_{EB}$  в эффекте тренировки ответственно не число циклов, а суммарное время действия циклов. Эффект тренировки электросопротивления при циклическом изменении магнитного поля,  $\rho_{cycl}(N)$ , и вращении образца,  $\rho_{rot}(N)$ , в обменно-смещенном кобальтите GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.52</sub> является аналогом эффекта тренировки поля обменного смещения  $H_{EB}(N)$ . Эти эффекты описываются известным эмпирическим выражением

$$H_{EB}(N) \propto \Delta \rho_{cycl}(N) \propto \Delta \rho_{rot}(N) \propto N^{-1/2},$$

N > 1(2).

Поведение этих величин обусловлено уменьшением намагниченности FM-частиц. Результаты объясняются влиянием двух механизмов. В первом намагниченность уменьшается быстро, во втором — медленно.

Предполагается, что среда неоднородна, что имеются крупные (многодоменные) и однодоменные FM-частицы разного размера. Крупные (многодоменные) FM-частицы не ответственны за эффект тренировки первого типа (резкое уменьшение поля обменного смещения после первого цикла). Природа первого типа тренировочного эффекта объясняется близостью энергии мелких однодоменных частиц  $K_{an}V$  к тепловой энергии kT, где  $K_{an}$ — плотность энергии магнитной анизотропии.

**Благодарности.** Авторы благодарны А. В. Королеву за проведение магнитных измерений.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Федерального агентства научных организаций России (тема «Спин» № АААА-А18-118020290104-2) и при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00461).

### ЛИТЕРАТУРА

 W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, Phys. Rev. 102, 1413 (1956).

- W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, Phys. Rev. 105, 904 (1957).
- A. E. Berkowitz and K. Takano, J. Magn. Magn. Mater. 200, 552 (1999).
- J. Nogues and I. K. Schuller, J. Magn. Magn. Mater. 192, 203 (1999).
- 5. R. L. Stamps, J. Phys. D 33, R247 (2000).
- 6. M. Kiwi, J. Magn. Magn. Mater. 234, 584 (2001).
- F. Radu and H. Zabel, Springer Tracts Mod. Phys. 227, 97 (2008).
- K. Giri and T. K. Nath, J. Nanosci. and Nanotechn. 14, 1209 (2014).
- 9. C. Binek, Phys. Rev. B 70, 014421 (2004).
- A. Hochstrat, Ch. Binek, and W. Kleemann, Phys. Rev. B 65, 092409 (2002).
- 11. A. Hoffmann, Phys. Rev. Lett. 93, 097203 (2004).
- **12**. P. Miltényi, M. Gierlings, J. Keller et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 4224 (2000).
- A. P. Malozemoff, Phys. Rev. B 37, 7673 (1988);
   J. Appl. Phys. 63, 3874 (1988).
- D. Paccard, C. Schlenker, O. Massenet et al., Phys. Stat. Solidi (b) 16, 301 (1966).
- **15**. Н. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин, ЖЭТФ **155**, 321 (2019).
- **16**. К. Б. Власов, Н. В. Волкенштейн, С. В. Вонсовский и др., Изв. АН СССР, сер. физ. **28**, 423 (1964).
- H. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин и др., Письма в ЖЭТФ 104, 44 (2016).
- L. Neel, Rev. Mod. Phys. 25, 293 (1953); Ann. Geophys. 5, 99 (1949).
- A. Maignan, C. Martin, D. Pelloquin et al., J. Sol. St. Chem. 142, 247 (1999).
- A. A. Taskin, A. N. Lavrov, and Yoichi Ando, Phys. Rev. B 71, 134414 (2005).
- 21. M. P. Pechini, US Patent No. 3330697 (1967).
- **22**. Н. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин и др., ЖЭТФ **152**, 1286 (2017).
- **23**. M. Patra, S. Majumdar, and S. Giri, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 486003 (2009).
- M. Patra, S. Majumdar, and S. Giri, Eur. Phys. Lett. 87, 58002 (2009).

- B. H. Miller and E. Dan Dahlberg, Appl. Phys. Lett. 69, 393216 (1996).
- **26**. C. Leighton, M. Song, J. Nogués et al., J. Appl. Phys.  $88, 344 \ (2000)$ .
- H. Fulara, S. Chaudhary, and S. C. Kashyap, Appl. Phys. Lett. 101, 142408 (2012).
- **28**. Н. И. Солин, С. В. Наумов, В. А. Казанцев, ЖЭТФ **157**, 824 (2020).
- **29**. D. Niebieskikwiat and M. B. Salamon, Phys. Rev. B **72**, 174422 (2005).
- **30**. C. P. Bean, J. Appl. Phys. **26**, 1381 (1955).
- 31. J. S. Kouvel, J. Phys. Chem. Sol. 16, 107 (1960).
- 32. W. H. Meiklejohn, J. Appl. Phys. 33, 1328 (1962).
- **33**. А. К. Звездин, К. А. Звездин, Природа № 9, 8 (2001).

### НУКЛЕАЦИЯ И РОСТ ЗАРОДЫШЕЙ СТАБИЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ ЖИДКОСТИ ЮКАВЫ

В. В. Решетняк  $a,b^*$ , О. Б. Решетняк a, А. В. Филиппов a,b

<sup>а</sup> Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований 108840, Троицк, Москва, Россия

<sup>b</sup> Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 2 сентября 2020 г., после переработки 2 сентября 2020 г. Принята к публикации 22 октября 2020 г.

Рассмотрен неравновесный процесс формирования и роста стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости Юкавы. Установлено, что при значениях эффективного параметра неидеальности в диапазоне  $120 \le \Gamma^* \le 150$  фазовый переход сопровождается формированием сферического зародыша объемно-центрированной кубической фазы. Рост зародыша хорошо аппроксимируется зависимостью, полученной в рамках классической теории нуклеации, и в пределах погрешности вычислений зависит от единственного параметра  $\Gamma^*$ . Возможная зависимость коэффициента поверхностного натяжения межфазной границы  $\gamma$  от радиуса зародыша R не учитывалась. При дальнейшем охлаждении жидкости до  $\Gamma^*=160$  фазовое расслоение наблюдалось по всему объему системы без образования компактного зародыша.

### **DOI:** 10.31857/S0044451021020127

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Пылевая плазма и заряженные коллоидные системы широко используются в качестве модельных объектов при изучении неравновесных процессов в неидеальных системах, в частности, фазовых переходов. Основным преимуществом данного подхода является возможность прямого измерения траекторий частиц в экспериментах [1–5].

При моделировании различных процессов в указанных системах для приближенного описания межчастичных взаимодействий используются эффективные парные потенциалы. В наиболее простых случаях это потенциал твердых сфер, потенциал Дебая (Юкавы) или их суперпозиция. В случае, когда взаимодействие частиц является преимущественно электростатическим, а их размеры малы по сравне-

нию со средним межчастичным расстоянием, обычно используется потенциал Юкавы [4,6–10]:

$$u(r) = \frac{u_0}{r} e^{-r/\lambda}. (1)$$

Здесь r — расстояние между частицами,  $u_0$  — параметр связи, определяющий величину кулоновского взаимодействия частиц,  $\lambda$  — параметр экранирования.

Теоретическому исследованию фазовых переходов в модельных ансамблях, частицы которых взаимодействуют посредством потенциала (1), посвящены работы [1, 5, 11–34]. Значительное внимание уделено изучению фазовой диаграммы, в то время как неравновесный процесс кристаллизации переохлажденной жидкости Юкавы менее изучен.

Экспериментальный и теоретический анализ неравновесной кристаллизации переохлажденной плазменно-пылевой системы был выполнен в работах [5,11,35–38]. Однако в этих работах кинетическая модель либо была предложена для поздних стадий развития фазового перехода, соответствующих постоянной скорости роста стабильной фазы, либо не предлагалась вовсе.

<sup>\*</sup> E-mail: viktor.reshetnyak84@gmail.com

Исследованию процесса нуклеации в системе Юкавы с исключенным объемом посвящена работа [33], где разупорядоченный ансамбль частиц стабилизировался в течение длительного времени в условиях (давление, температура), соответствующих стабильной кристаллической фазе (объемноили гранецентрированной кубической, ОЦК или ГЦК). Анализировалась временная зависимость фазового состава ансамбля частиц. Работа свидетельствует о том, что зародыш фазового перехода имеет ОЦК-структуру даже в тех областях фазовой диаграммы, где предполагается стабильность ГЦК-кристалла. Форма зародыша была близка к сферической.

В работах [39,40] выполнено численное предсказание констант скорости кристаллизации для коллоидных систем, основанное на использовании классической теории нуклеации. Однако в этих работах рассматривались ансамбли твердых сфер.

Настоящая работа посвящена исследованию кинетики кристаллизации переохлажденной жидкости Юкавы. При этом использовалась аналитическая модель, основанная на классической теории нуклеации (КТН), и численная, в которой кристаллизация наблюдалась при непосредственном расчете траекторий частиц в переохлажденной жидкости методом молекулярной динамики (МД).

Молекулярное моделирование неравновесных редких процессов, к которым относится и нуклеация, связано со значительными вычислительными затратами [41] и сопутствующей проблемой накопления статистических данных. При численном расчете для ускорения нуклеации был применен подход, предложенный в работе [42]. Согласно указанному подходу для ускорения нуклеации используется кристаллический прекурсор малого размера (радиус прекурсора должен быть меньше критического), атомы которого удерживаются вблизи своих исходных позиций гармоническими связями. В ходе расчета спустя некоторое время в переохлажденной жидкости вокруг такого прекурсора начинается рост стабильной кристаллической фазы. Жесткость связей изменяется в ходе вычислений и полностью отключается к моменту достижения кристаллическим зародышем критического радиуса  $R_{cr}$ .

В настоящей работе процесс формирования зародыша критического радиуса не анализировался. Вместо этого был выполнен анализ движения границы раздела фаз при монотонном росте закритического зародыша. Анализ начинался спустя некоторое время (5000 шагов) после полного отключения гармонических связей. Предполагается, что введение такого временного интервала позволяет устранить возможные эффекты, не имеющие физической природы и связанные с искусственным введением прекурсора кристаллизации.

Использование кристаллического прекурсора позволяет значительно сократить время, необходимое для формирования критического зародыша, а также устраняет неопределенность его расположения в расчетной области. Это существенно упрощает накопление статистических данных, необходимых для анализа средних величин (например, среднего радиуса зародыша в заданный момент времени). В отличие от работы [42] мы использовали классическую теорию нуклеации для анализа роста зародыша радиусом  $R \gtrsim R_{cr}$ . Результаты неравновесных вычислений в настоящей работе были использованы для расчета параметров скорости роста стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости: параметра  $\Delta \mu = \mu_{bcc} - \mu_{lig}$ , равного разности химических потенциалов кристаллической  $\mu_{bcc}$  и жидкой  $\mu_{liq}$  фаз, и удельной свободной энергии межфазной границы у. Для тестирования результатов моделирования в настоящей работе указанные параметры были рассчитаны также и в равновесных системах.

В отличие от обычных веществ, состояние которых определяется температурой и плотностью, а параметры потенциала взаимодействия считаются постоянными, эксперименты с пылевой плазмой часто проводятся при постоянных значениях температуры и сопровождаются изменением параметров потенциала. Поэтому в качестве масштаба энергии удобно использовать температуру. В качестве масштаба длины широко используется среднее межчастичное расстояние  $\delta = n^{-1/3}$ , где n — плотность. При таком масштабировании уравнения движения автомодельны и состояние однофазной системы полностью определяется двумя безразмерными величинами: параметром неидеальности  $\Gamma = u/(\delta kT)$  (kпостоянная Больцмана, T — температура) и структурным параметром  $\kappa = \delta/\lambda$  [6].

Кристаллизация жидкости Юкавы является фазовым переходом первого рода и сопровождается скачкообразным изменением плотности. Использование связанных с плотностью масштабов при изучении двухфазных систем неизбежно приведет к потере точности. Однако известно, что величина скачка плотности  $\Delta n/n$  при кристаллизации жидкости Юкавы мала [34], а ошибка при вычислении положения бинодали, связанная с неопределенностью масштабов, не превышает  $\Delta n/n$  [43]. Поэтому можно

ожидать, что использование указанных масштабов и двух безразмерных параметров состояния позволит обеспечить достаточную точность при исследовании неравновесных процессов в двухфазных системах.

### 2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

### 2.1. Рост зародыша стабильной фазы в рамках KTH

Изменение свободной энергии Гиббса при образовании кристаллического кластера из N атомов в переохлажденной жидкости определяется формулой [44,45]

$$\Delta G = N\Delta\mu + 4\pi R^2 \gamma. \tag{2}$$

Выражение (2) содержит два неизвестных параметра: разность химических потенциалов стабильной и метастабильной фаз  $\Delta\mu$  и удельную свободную энергию межфазной границы  $\gamma$ .

Считая зародыш сферическим, запишем уравнение движения межфазной границы в безразмерных переменных [46]:

$$\frac{d\widetilde{R}}{d\widetilde{t}} = \frac{1}{4\pi\widetilde{R}^2} \left( \widetilde{j}^+ - \widetilde{j}^- \right),\tag{3}$$

где тильдой сверху отмечены безразмерные переменные,  $j^+$  и  $j^-$  — потоки частиц через границу раздела фаз. В качестве масштаба длины и времени используются среднее межчастичное расстояние  $\delta$  и период тепловых колебаний частиц кристалла:

$$\nu_0^{-1} = l/v_T, (4)$$

где  $v_T$  — средняя скорость теплового движения частиц:  $v_T = (3kT/m)^{1/2}$ , l — средняя амплитуда колебаний:  $l = c\delta$ , c = 0.2 — критерий Линдеманна [17]. Масса частиц m в настоящей работе была принята равной  $4.19 \cdot 10^{-12}$  г (соответствует примерно капле воды радиусом 1 мкм), температура T задавалась равной 300 К.

В дальнейшем везде в настоящей работе, если не оговорено обратное, будут использоваться только безразмерные переменные, а символ  $\tilde{**}$  будет опущен. Будем рассматривать только зародыши размером не меньше критического. Тогда изменение свободной энергии при добавлении к кластеру одного атома равно

$$\Delta g = \frac{d}{dN} \left( \Delta G \right) < 0. \tag{5}$$

Потоки частиц сквозь фазовую границу можно определить согласно выражению

$$j^{+} = 4\pi R^{2} v^{+},$$
  
 $j^{-} = 4\pi R^{2} v^{-} \exp(\Delta g).$  (6)

Скорости  $v^{\pm}$  положим равными друг другу и оценим как  $v=f_0D$ . Эмпирический коэффициент  $f_0\sim 1$  входит в модель в качестве параметра и может быть найден путем аппроксимации результатов вычислений или экспериментов. Безразмерный коэффициент диффузии, согласно [47],  $D\propto \exp(-\Gamma^*/\Gamma^*_{melt})$ . Значение эффективного параметра неидеальности на линии плавления  $\Gamma^*_{melt}\approx 106$  [48, 49]. Тогда из уравнений (3) и (6) следует уравнение движения межфазной границы, которое в выбранных масштабах примет вид

$$\frac{dR}{dt} = v \left[ 1 - \exp(\Delta g) \right], 
v = f_0 \exp(-\Gamma^* / \Gamma^*_{melt}).$$
(7)

При больших значениях радиуса зародыша  $\Delta g \approx \Delta \mu$  и не зависит от R. В этом случае скорость движения фронта волны кристаллизации постоянна, что и наблюдалось в экспериментах [5,11].

В случае, когда размер зародыша близок к критическому и  $\Delta g \ll 1$ , экспоненту в выражении (7) можно разложить по малому параметру:

$$\frac{dR}{dt} = -v\left(\Delta\mu + \frac{2\gamma}{R}\right). \tag{8}$$

Пренебрегая зависимостью  $\gamma$  от R и решая дифференциальное уравнение методом разделения переменных, получим

$$-\frac{R - R_0}{v\Delta\mu} + \frac{2\gamma}{v\Delta\mu^2} \ln\left[\frac{\Delta\mu R + 2\gamma}{\Delta\mu R_0 + 2\gamma}\right] = t.$$
 (9)

Считается, что в начальный момент времени t==0 радиус зародыша равен  $R_0$ . Если  $R_0=R_{cr}=$  $= -2\gamma/\Delta\mu$ , логарифм в левой части уравнения (9) обращается в бесконечность. Следовательно, рост зародыша от критического радиуса до R длится бесконечно долго. Это формальное следствие нулевой скорости роста критического зародыша отражает тот факт, что предложенная модель роста не учитывает флуктуационного характера появления зародыша размером больше критического. Поскольку в настоящей работе формула (9) используется только при  $R > R_{cr}$ , указанная особенность модели не может привести к появлению не имеющих физического смысла результатов. Заметим, что при известных значениях параметров  $\gamma$  и  $\Delta\mu$  константа скорости нуклеации может быть легко вычислена в рамках КТН [44, 45].

### 2.2. Равновесные расчеты методом молекулярной динамики

Расчет энергии межфазной границы в равновесной двухфазной системе предполагает стабилизацию разделенных фазовой границей кристалла и жидкости. Стабилизация выполнялась в два этапа. Сначала в каноническом (NVT) ансамбле с использованием термостата Ланжевена система выводилась на заданную равновесную температуру. Затем термостат отключался, после чего выполнялся расчет средних величин.

Вычисления методом МД выполнены в программе LAMMPS [50, 51] для пяти точек вдоль линии фазового равновесия:  $\kappa=2,3,\ldots,6$ . Шаг по времени задавался равным  $dt=\nu_0^{-1}/100$ . Для анализа локального порядка использовался параметр  $q_6$  [52, 53]. Вычисление параметров порядка при этом осуществлялось для каждого атома с учетом 14 ближайших соседей.

Рассматривалась система из 32000 частиц (изначально — суперъячейка ОЦК-кристалла размером  $40\times20\times20$ ), разделенная на две равные части плоскостью границы раздела фаз с индексами Миллера (100). Длина экранирования  $\lambda$  задавалась равной 50 мкм, а плотность системы — в соответствии с выбранным значением структурного параметра  $\kappa$ . Объем ячейки во время расчета поддерживался постоянным. Величина параметра связи  $u_0$  вычислялась из условия фазового равновесия в соответствии с данными работы [43] для температуры 300 К.

Сначала система стабилизировалась при температуре 600 К. Периодическая структура половины вещества (жидкости) при этом нарушалась в результате плавления. Для предотвращения плавления второй половины вещества (ОЦК-кристалла), его частицы удерживались вблизи исходных положений специально введенными упругими связями. Кристаллическая часть вещества при этом представляла собой периодическую в направлениях у и z пленку, которая располагалась посреди расчетной области и была отделена от границ равными между собой по толщине слоями жидкости. Далее система медленно охлаждалась до температуры плавления, равной 300 К. Жесткость связей при этом линейно уменьшалась с уменьшением температуры и обращалась в нуль на бинодали. После установления температуры плавления упругие связи удалялись и система стабилизировалась в течение 10<sup>4</sup> шагов в NVT-ансамбле с термостатом Ланжевена. После стабилизации термостат выключался и система стабилизировалась еще 10<sup>5</sup> шагов в микроканоническом ансамбле (NVE). При этом контролировалась температура системы, измерение которой в ходе стабилизации в NVE-ансамбле не превышало  $2\,\%$ .

Коэффициент поверхностного натяжения был рассчитан после стабилизации в рамках гидростатического приближения [54,55] по формуле

$$\gamma = \frac{1}{2} \int_{0}^{l} (P_N - P_T) \, dx,\tag{10}$$

где  $P_N$  и  $P_T$  — локальные значения нормальной и тангенциальной по отношению к поверхности раздела фаз компонент напряжений, а l — длина расчетной области в направлении x, перпендикулярном межфазной границе. Усреднение выполнялось по 20 статистически независимым вычислениям, в каждом из которых результат усреднялся на временном интервале в  $10^5$  шагов.

Расчет разности химических потенциалов жидкости и кристалла был выполнен методом термодинамического интегрирования с использованием алгоритма, описанного в наших предыдущих работах [34, 43, 56]. Свободные энергии кристалла и жидкости вычислялись отдельно друг от друга в зависимости от величины  $\Gamma^*$ . При этом для расчета энергии жидкости была выбрана область параметров  $85 \le \Gamma^* \le 100$ , соответствующая стабильной жидкой фазе, а для кристалла — область  $125 \le \Gamma^* \le 140$ , соответствующая стабильной ОЦК-фазе. Зависимости свободной энергии от  $\Gamma^*$  аппроксимировались линейными функциями, по разности значений которых вычислялась величина  $\Delta\mu(\Gamma^*)$ .

## 2.3. Неравновесный расчет формирования и роста кристаллического зародыша в метастабильной жидкой фазе

Для ускорения процесса нуклеации с целью набора необходимого количества статистически независимых результатов нами был использован подход, предложенный в работе [42]. Рассматривалась система из 128000 частиц (изначально — кристаллическая суперъячейка ОЦК размером  $40 \times 40 \times 40$ ). В центре расчетного домена была выбрана сферическая область  $\Omega$  малого радиуса, величина которого подбиралась эмпирически и составляла примерно от 2 до  $2.5~\delta$  для рассмотренных значений  $\Gamma^*$  в диапазоне от 120 до 160. Частицы, принадлежащие области  $\Omega$ , удерживались вблизи своих исходных позиций гармоническими связями. Жесткость связей изменялась в ходе вычислений, уменьшаясь с ростом зародыша ОЦК-фазы. Таким образом частицы в вы-

бранной области служили прекурсором для формирования зародыша фазового перехода.

Система частиц плавилась при температуре, равной удвоенной температуре плавления, а затем охлаждалась до температуры T = 300 K, соответствующей выбранному значению Г\* и условиям стабильности ОЦК-фазы. Значение параметра потенциала  $u_0$  в выражении (1) вычислялось в соответствии с заданным значением  $\Gamma^*$ , которое в ходе исследований изменялось в диапазоне значений от 120 до 160. Спустя некоторое время (не менее  $5 \cdot 10^4$  шагов) в окрестности области  $\Omega$  формируется кристаллическая фаза критического размера. С этого момента радиус зародыша монотонно растет с течением времени. Возможность длительного существования метастабильной фазы с кристаллическим прекурсором говорит о том, что выбранный радиус области  $\Omega$  не превышал значение  $R_{cr}$ . В момент достижения зародышем своего критического радиуса гармонические связи удалялись. Анализ скорости движения межфазной границы начинался спустя 5000 шагов после удаления гармонических связей.

#### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Зависимость  $\mu(\Gamma^*)$  хорошо аппроксимируется линейной функцией как для жидкости, так и для ОЦК-кристалла Юкавы. Результаты расчета разности химических потенциалов  $\Delta\mu(\Gamma^*,\kappa)$  для разных значений  $\kappa$  мало отличаются друг от друга: средние квадратические отклонения параметров линейной аппроксимации a и b составляют примерно 3% от средних значений. Поэтому в дальнейших вычислениях была использована линейная аппроксимация с усредненными по  $\kappa$  параметрами

$$\Delta \mu = -9.71 \cdot 10^{-3} \Gamma^* + 0.99. \tag{11}$$

Таким образом, в указанном диапазоне  $\kappa$  фазовому равновесию соответствует среднее значение  $\Gamma^* \approx 102$ . Этот результат согласуется с данными работ [34, 43, 48, 49].

Среднее вдоль линии плавления значение коэффициента поверхностного натяжения на плоской границе раздела фазы ОЦК (100) и жидкой фазы, рассчитанного по формуле (10), составило  $\gamma=0.49$ . Указанное значение находится в разумном соответствии с данными работы [55], где для межфазных границ в системе твердых сфер были получены значения от 0.17 до 0.71 в единицах  $kT/\sigma^2$ , а также с данными работы [57], где анализ системы мягких сфер дал значения  $\gamma$  в диапазоне от 0.46 до 0.62  $kT/\sigma^2$ .

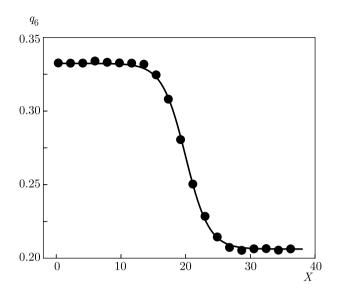


Рис. 1. Зависимость параметра локального порядка  $q_6$  от безразмерной координаты в направлении, перпендикулярном межфазной границе: • — результаты МД-вычислений, сплошная кривая — аппроксимация результатов функцией (12)

Для вычисления ширины межфазной границы в настоящей работе была проанализирована зависимость параметра порядка  $q_6$  от координаты x, которая аппроксимировалась следующим выражением:

$$q_6(x) = 0.5(q_{bcc} + q_{liq}) -$$

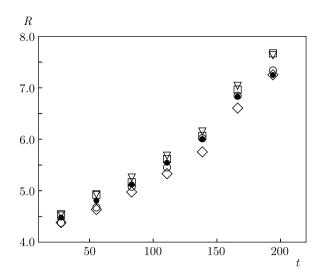
$$-0.5(q_{bcc} - q_{liq}) \operatorname{th} \left[ \frac{2(x - x_0)}{\zeta} \right], \quad (12)$$

где  $q_{bcc}$  и  $q_{liq}$  — значения параметра локального порядка  $q_6$ , соответствующие ОЦК и жидкой фазам;  $x_0$  и  $\zeta$  — параметры, характеризующие положение границы и ее ширину. Величина параметра  $\zeta$  определяет ширину межфазной границы. Результаты аппроксимации представлены на рис. 1, при этом начало координат смещено в центр расчетной области.

Анализ данных МД-моделирования позволяет сделать вывод о том, что в выбранных масшта-бах ширина межфазной границы с точностью около  $15\,\%$  совпадает для разных  $\kappa$  и составляет  $\zeta\approx7.5$ .

Данные, полученные в ходе равновесных расчетов, позволяют оценить границы применимости линейного разложения экспоненты, использованного нами в преобразовании формулы (7) к виду (8). Ограничив погрешность линеаризации экспоненты величиной  $10\,\%$  и используя найденные в равновесных расчетах значения  $\gamma$  и  $\Delta\mu$ , получим оценку для максимального радиуса зародыша R=9.0.

Результаты неравновесных вычислений также свидетельствуют о слабой зависимости скорости



**Рис. 2.** Зависимость радиуса зародыша от времени, рассчитанная в безразмерных величинах для разных значений структурного параметра при  $\Gamma^*=150$ : • —  $\kappa=2$ ,  $\circ$  —  $\kappa=3$ ,  $\nabla$  —  $\kappa=4$ ,  $\square$  —  $\kappa=5$ ,  $\diamond$  —  $\kappa=6$ 

движения межфазной границы от  $\kappa$ . Положение межфазной границы относительно центра зародыша (радиус зародыша R) определялось с использованием аппроксимации радиального распределения параметра локального порядка  $q_6$  выражением (12). Вычисленные для разных  $\kappa$  зависимости R(t) представлены на рис. 2.

Начальное значение радиуса зародыша  $R_0$  меньше вычисленной ранее ширины плоской межфазной границы d. Поэтому правомерность пренебрежения зависимостью  $\gamma(R)$  требует дополнительного анализа. В то же время, данный результат ограничивает применимость толменовской модели зависимости  $\gamma(R)$ , предполагающей малость параметра  $\zeta/R$ .

Аппроксимация по формуле (12) функции радиального распределения параметра порядка  $q_6(R)$  была использована также для вычисления ширины межфазной границы. Анализ, выполненный для  $\Gamma^*=150$ , свидетельствует о том, что с ростом зародыша ширина межфазной границы растет, и на начальном этапе  $\zeta \sim R$ . Зависимость  $\zeta(R)$  при этом можно аппроксимировать гиперболическим тангенсом:

$$\zeta = a \operatorname{th} \frac{R - R_1}{b},\tag{13}$$

с параметрами  $a=6.66,\,b=1.83$  и  $R_1=3.21.$ 

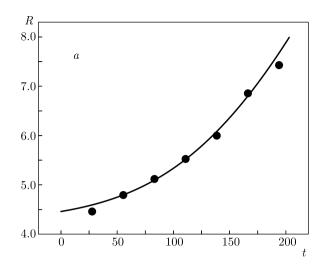
Аппроксимации усредненных по  $\kappa$  зависимостей R(t) и  $\zeta(R)$  выражениями (9) и (13) для  $\Gamma^*=150$  представлены на рис. 3. В ходе аппроксимации зависимости R(t) выражением (9) были вычислены значения параметров  $f_0=0.67, \Delta\mu=-0.42$  и  $\gamma=0.89$ .

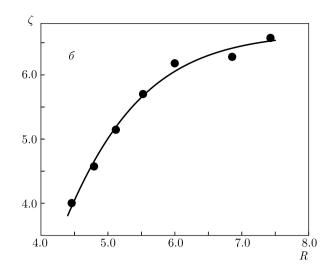
Учитывая использованные допущения, можно считать что результаты равновесных ( $\Delta\mu=-0.45$  и  $\gamma=0.49$ ) и неравновесных ( $\Delta\mu=-0.42$  и  $\gamma=0.89$ ) вычислений совпадают с достаточной точностью.

Подстановка в формулу (11) для  $\Delta\mu$  значений  $\Gamma^*$  в диапазоне  $120 \leq \Gamma^* \leq 160$  дает  $-0.56 \leq \Delta\mu \leq \leq -0.17$ . По формуле (7), используя вычисленную в ходе аппроксимации величину  $f_0$ , получим асимптотическое значение скорости движения фронта кристаллизации для зародышей большого радиуса в диапазоне от 0.5 до 3.0  $\delta$  с<sup>-1</sup>, что соответствует результатам [5, 11, 36], где наблюдалось движение фронта кристаллизации со скоростью  $v_f \sim 1 \, \delta \, \mathrm{c}^{-1}$ .

Значения критического радиуса зародыша  $R_{cr} =$  $=2\gamma/\Delta\mu$ , вычисленные по равновесным и неравновесным значениям параметров, отличаются примерно в 2 раза. Так данные, взятые из равновесных расчетов при  $\Gamma^* = 150$ , дают  $R_{cr} = 2$ . Неравновесные же вычисления свидетельствуют о том, что в указанных условиях метастабильная жидкость с погруженным в нее зародышем ОЦК-фазы соответствующего радиуса может долго существовать, не испытывая фазового перехода. Монотонный рост зародыша со временем наблюдался в неравновесных расчетах лишь при R > 4. Указанное расхождение связано вероятно с тем, что формула (10) была нами использована только для плоской границы раздела фаз с индексами Миллера (100), в то время как при росте зародыша вероятно появление межфазных границ различной ориентации. Энергии этих поверхностей могут существенно различаться. В частности, для системы твердых шаров в работе [55] энергия поверхности раздела жидкой и кристаллической фаз с индексами (100) была минимальной и примерно в четыре раза отличалась от энергии поверхности (111). Также, среди возможных источников несоответствия следует выделить принятые при выводе уравнения (9) допущения КТН и применение гидростатического приближения при вычислении коэффициента поверхностного натяжения по формуле (10).

Аналогичные неравновесные расчеты были проведены для  $\Gamma^*=120,130,140,160$ . Во всех случаях результаты слабо зависели от  $\kappa$ . С уменьшением значения  $\Gamma^*$  время формирования зародыша критического размера существенно возрастало, а скорость роста падала. Такой характер зависимости скорости фазового перехода от  $\Gamma^*$  очевидно следует из формул (8) и (11). При этом полученная в ходе неравновесных вычислений в выбранном диапазоне  $\Gamma^*$  функция  $\Delta\mu(\Gamma^*)$  аппроксимируется линейной зависимостью  $\Delta\mu=-9.5\cdot 10^{-3}\Gamma^*+0.89$  и, следовательно,





**Рис. 3.** Усредненные по  $\kappa$  характеристики структуры, полученные в ходе неравновесного расчета роста кристаллического зародыша в метастабильной жидкости Юкавы при  $\Gamma^*=150$ : a — зависимость радиуса зародыша от времени,  $\delta$  — зависимость ширины межфазной границы от радиуса зародыша;  $\bullet$  — расчеты методом МД, сплошные линии — аппроксимации выражениями (9) и (13) (результаты приведены в безразмерных величинах)

хорошо совпадает с вычисленной методом термодинамического интегрирования (аппроксимация (11)). Значение коэффициента поверхностного натяжения с изменением  $\Gamma^*$  менялось в пределах ошибки аппроксимации, и в среднем составляло  $\gamma=0.95$ .

При  $\Gamma^* = 160$  формирование компактного зародыша вблизи области с гармоническими связями не наблюдалось. Вместо этого фазовый переход сопровождался быстрым появлением и ростом областей ОЦК-фазы, случайным образом распределенных в объеме жидкости. Время жизни метастабильной жидкости в таких условиях оказалось малым, соизмеримым со временем температурной релаксации стабильной однофазной системы (порядка 5000 шагов, или  $50\nu_0^{-1}$  против 50000 шагов при  $\Gamma^*=150$ ). Следовательно, при  $\Gamma \geq 160$  жидкость Юкавы испытывает спинодальный распад. Интересно, что формальная оценка критического радиуса зародыша при  $\Gamma^* = 160$  с использованием  $\Delta \mu = -0.56$  (значение получено по формуле (11)) и  $\gamma = 0.89$  дает  $R_{cr} \approx 3.16$ . Это значение примерно соответствует нулю функции  $\zeta(R)$ ,  $R_1 = 3.2$  в формуле (13). Однако анализ возможной взаимосвязи между формальным нулем ширины межфазной границы  $R_1$  и условиями спинодального распада выходит за рамки настоящего исследования.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием метода молекулярной динамики и классической теории нуклеации изучен про-

цесс роста зародыша кристаллической фазы в переохлажденной жидкости Юкавы. Применены подходы, основанные на исследовании состояния равновесных фаз, а также неравновесного процесса кристаллизации метастабильной жидкости. Анализ результатов неравновесных расчетов указывает на то, что скорость распространения фронта волны кристаллизации на ранних стадиях фазового перехода хорошо аппроксимируется выражением (9), полученным в рамках классической теории нуклеации. При этом размер критического зародыша и скорость движения межфазной границы при выбранном масштабировании оказываются независимыми от структурного параметра  $\kappa$  (в пределах погрешности аппроксимации) и полностью определяются эффективным параметром неидеальности  $\Gamma^*$ .

Использованная в настоящей работе модель движения межфазной границы не учитывала возможной зависимости коэффициента поверхностного натяжения от радиуса зародыша R. Анализ ширины межфазной границы  $\zeta$  указывает на то, что на начальных стадиях роста  $\zeta \sim R$ , причем  $\zeta(R)$  монотонно растет и достигает насыщения примерно при  $\zeta=6.7$ . Этот результат находится в разумном соответствии с данными, полученными при анализе равновесной двухфазной системы с плоской межфазной границей:  $\zeta=7.5$ . Зависимость  $\zeta(R)$  аппроксимируется гиперболическим тангенсом (13) с параметрами  $a=6.66,\ b=1.83$  и  $R_1=3.21$ .

Полученные в широком диапазоне  $\Gamma^*$  путем аппроксимации R(t) значения разности химических потенциалов  $\Delta \mu$  в пределах погрешности согласуются с вычисленными для равновесных систем методом термодинамического интегрирования. Значения коэффициента поверхностного натяжения  $\gamma$ , рассчитанные в равновесной двухфазной системе в рамках гидростатического приближения, и в неравновесной — путем аппроксимации R(t), различаются примерно в два раза. Наиболее вероятной причиной этого различия является тот факт, что в настоящей работе равновесный расчет был выполнен только для плоской границы раздела жидкой и ОЦК-фаз с индексами Миллера (100), в то время как зародыш кристаллической фазы может иметь границы различной ориентации. При этом вычисленные значения находятся в разумном соответствии с известным из литературы результатами расчетов для ансамблей твердых и мягких сфер.

Неравновесные расчеты свидетельствуют о том, что при  $\Gamma^* \geq 160$  фазовый переход не сопровождается нуклеацией и жидкость Юкавы в этих условиях испытывает спинодальный распад. Интересно отметить факт совпадения при этом вычисленных формально безразмерных значения радиуса критического зародыша  $R_{cr} = 2\gamma/\Delta\mu \approx 3.16~(\gamma = 0.89~\text{и}$   $\Delta\mu = 0.56$ ) и нуля функции  $\zeta(R)$  (см. выражение (13))  $R_1 = 3.2$ . Однако анализ возможной взаимосвязи между формальным нулем ширины межфазной границы в аппроксимации  $\zeta(R)$  и условиями спинодального распада выходит за рамки настоящего исследования.

**Финансирование.** Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424).

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Б. А. Клумов, УФН 180, 1095 (2010).
- 2. A. Yethiraj, Soft Matter 3, 1099 (2007).
- D. M. Herlach, I. Klassen, P. Wette, and D. Holland-Moritz, J. Phys.: Condens. Matter 22, 153101 (2010).
- 4. Л. Кедель, В. М. Носенко, С. Жданов, А. В. Ивлев, И. Лаут, Е. В. Яковлев, Н. П. Крючков, П. В. Овчаров, А. М. Липаев, С. О. Юрченко, УФН 189, 1070 (2019).

- **5**. Д. И. Жуховицкий, В. Н. Наумкин, А. И. Хуснулгатин, В. И. Молотков, А. М. Липаев, ЖЭТФ **157**, 734 (2020).
- V. E. Fortov and G. E. Morfill Complex and Dusty Plasmas: from Laboratory to Space, CRC Press, Boca Raton (2009).
- V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rep. 421, 1 (2005).
- 8. И. С. Арансон, УФН 183, 87 (2013).
- A.-P. Hynninen, C. G. Christova, R. Van Roij,
   A. Van Blaaderen, and M. Dijkstra, Phys. Rev. Lett.
   96, 138308 (2006).
- J. Dobnikar, D. Haložan, M. Brumen, H.-H. Von Gruenberg, and R. Rzehak, Comput. Phys. Commun. 159, 73 (2004).
- Б. А. Клумов, М. Рубин-Зузич, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ 84, 636 (2007).
- B. Klumov, P. Huber, S. Vladimirov, H. Thomas, A. Ivlev, G. Morfill, V. Fortov, A. Lipaev, and V. Molotkov, Plasma Phys. Contr. F. 51, 124028 (2009).
- 13. B. Klumov, G. Joyce, C. Räth, P. Huber, H. Thomas, G. E. Morfill, V. Molotkov, and V. Fortov, Eur. Phys. Lett. 92, 15003 (2010).
- D. Hone, S. Alexander, P. M. Chaikin, and P. Pincus, J. Chem. Phys. 79, 1474 (1983).
- W. Y. Shih, I. A. Aksay, and R. Kikuchi, J. Chem. Phys. 79, 1474 (1983).
- M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, J. Chem. Phys. 88, 3286 (1988).
- E. J. Meijer and D. Frenkel, J. Chem. Phys. 94, 2269 (1991).
- R. T. Farouki and S. Hamaguchi, Appl. Phys. Lett. 61, 2973 (1992).
- C. F. Tejero, J. F. Lutsko, J. L. Colot, and M. Baus, Phys. Rev. A 46, 3373 (1992).
- G. Dupont, S. Moulinasse, J. P. Ryckaert, and M. Baus, Mol. Phys. 79, 453 (1993).
- S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, J. Chem. Phys. 105, 7641 (1996).
- **22**. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E **56**, 4671 (1997).
- 23. H. S. Lee, D. Y. Chen, and B. Rosenstein, Phys. Rev. E 56, 4671 (1997).

- G. P. Hoffmann and H. Löwen, J. Phys.: Condens. Matter 12, 7359 (2000).
- J. Dobnikar, Y. Chen, R. Rzehak, and H.-H. Von Grünberg, J. Chem. Phys. 119, 4971 (2003).
- O. S. Vaulina, I. E. Drangevski, X. G. Adamovich,
   O. F. Petrov, and V. E. Fortov, Phys. Rev. Lett. 97, 195001 (2006).
- S. A. Khrapak, H. M. Thomas, and G. E. Morfill, Eur. Phys. Lett. 91, 25001 (2010).
- 28. D. I. Zhukhovitskii, Phys. Plasmas 24, 033709 (2017).
- S. Maity and A. Das, Phys. Plasmas 26, 023703 (2019).
- V. S. Nikolaev and A. V. Timofeev, Phys. Plasmas 26, 073701 (2019).
- V. J. Anderson and H. N. W. Lekkerkerker, Nature 416, 811 (2002).
- Y. Feng, B. Liu, and J. Goree, Phys. Rev. E 78, 026415 (2008).
- X. Ji, Zh. Sun, W. Ouyang, and Sh. Xu, J. Chem. Phys. 148, 174904 (2018).
- **34**. В. В. Решетняк, А. В. Филиппов, ЖЭТФ **156**, 545 (2019).
- V. E. Fortov and G. E. Morfill, Plasma Phys. Contr. F 54, 124040 (2012).
- 36. M. Rubin-Zuzic, G. E. Morfill, A. V. Ivlev, R. Pompl, B. A. Klumov, W. Bunk, H. M. Thomas, H. Rothermel, O. Havnes, and A. Fouquet, Nat. Phys. 2, 181 (2006).
- 37. S. A. Khrapak, B. A. Klumov, P. Huber, V. I. Molotkov, A. M. Lipaev, V. N. Naumkin, A. V. Ivlev, H. M. Thomas, M. Schwabe, G. E. Morfill, O. F. Petrov, V. E. Fortov, Yu. Malentschenko, and S. Volkov, Phys. Rev. E 85, 066407 (2012).
- S. A. Khrapak, B. A. Klumov, P. Huber, V. I. Molotkov, A. M. Lipaev, V. N. Naumkin, H. M. Thomas, A. V. Ivlev, G. E. Morfill, O. F. Petrov, V. E. Fortov, Yu. Malentschenko, and S. Volkov, Phys. Rev. Lett. 106, 205001 (2011).
- **39**. S. Auer and D. Frenkel, Nature **409**, 1020 (2001).

- S. Auer and D. Frenkel, J. Chem. Phys. 120, 3015 (2004).
- **41.** D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications*, Computational sciences series, Vol. 1, pp. 1–638, Academic Press, San Diego (2002).
- 42. Y. Sun, H. Song, F. Zhang, L. Yang, Zh. Ye, M. I. Mendelev, C.-Zh. Wang, and K.-M. Ho, Phys. Rev. Lett. 120, 085703 (2018).
- V. V. Reshetniak, O. B. Reshetniak, and A. V. Filippov, submitted to J. Phys. Conf. Ser.
- 44. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ 12, 525 (1942).
- **45**. Я. И. Френкель,, Собрание избранных трудов. Т. III. Кинетическая теория жидкостей, Изд-во АН СССР, Москва-Ленинград (1959).
- 46. K. A. Jackson, Interface Sci. 10, 159 (2002).
- **47**. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, Phys. Plasmas **9**, 835 (2002).
- **48**. O. S. Vaulina and S. A. Khrapak, ЖЭΤΦ **117**, 326 (2000).
- O. S. Vaulina, S. V. Vladimirov, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, Phys. Rev. Lett. 88, 245002 (2002).
- **50**. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
- **51**. LAMMPS http://lammps.sandia.gov.
- P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. Lett. 47, 1297 (1981).
- 53. W. Mickel, S. C. Kapfer, G. E. Schröder-Turk, and K. Mecke, J. Chem. Phys. 138, 044501 (2013).
- **54.** S. Ono and S. Kondo, *Molecular Theory of Surface Tension in Liquids*. In: Structure of Liquids, Vol. 3/10, Springer, Berlin, Heidelberg (1960).
- R. L. Davidchack and B. B. Laird, J. Chem. Phys. 108, 9452 (1998).
- **56**. В. В. Решетняк, А. Н. Старостин, А. В. Филиппов, ЖЭТФ **154**, 1258 (2018).
- B. B. Laird and R. L. Davidchack, J. Phys. Chem. B 109, 17802 (2005).

# СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ГРАНИЦЫ МАГНИТНОГО БАРЬЕРА, ОБТЕКАЕМОГО ПЛАЗМОЙ: МЕМБРАННАЯ МОДЕЛЬ ГРАНИЦЫ, ЛИНЕЙНЫЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ РЕЗОНАНСЫ И СВЯЗИ С ВНУТРЕННИМИ МОДАМИ

```
С. П. Савин <sup>a*</sup>, В. В. Ляхов <sup>b</sup>, В. М. Нещадим <sup>b</sup>, Л. М. Зеленый <sup>a</sup>, 
3. Немечек <sup>c</sup>, Я. Шафранкова <sup>c</sup>, С. И. Климов <sup>a</sup>, С. А. Скальский <sup>a</sup>, 
М. О. Рязанцева <sup>a</sup>, Л. С. Рахманова <sup>a</sup>, Ч. Ванг <sup>d</sup>, Х. Ли <sup>d</sup>, Я. Бленцки <sup>e</sup>, 
Ж.-Л. Рош <sup>f</sup>, Л. Козак <sup>g</sup>, А. Суворова <sup>h</sup>, Л. А. Лежен <sup>a</sup>
```

<sup>а</sup> Институт космических исследований Российской академии наук, 117997, Москва, Россия

<sup>b</sup> DTO "Institute of Ionosphere", 050020, Almaty, Kazakhstan

<sup>c</sup> Charles University, 1636, Prague, Czech Republic

<sup>d</sup> National Space Science Center, CAS, 100190, Beijing, China

<sup>e</sup> Space Research Center, 57622, Warsaw, Poland

f Laboratory of Physics and Chemistry of the Environment and Space, 45071, Orleans, France

g Kyiv Taras Shevchenko University, and SRI NASU-SSAU 01601, Kyiv, Ukraine

<sup>h</sup> GPS Science and Application Research Center, National Central University, 32001, Taiwan

Поступила в редакцию 4 марта 2020 г., после переработки 27 июня 2020 г. Принята к публикации 7 сентября 2020 г.

Исследуются линейные и нелинейные резонансы и каскады, существенно влияющие на взаимодействие потока бесстолкновительной плазмы с магнитным барьером и на проникновение плазмы внутрь барьера, на примере околоземной магнитопаузы. Наша линейная теория мембранной неустойчивости границы магнитного барьера — магнитопаузы — позволяет объяснить структуру спектров и би-спектров флуктуаций на разных участках погранслоев у магнитопаузы, и также резонансы на частотах 0.05– $0.5\,$  м $\Gamma$ ц. Регистрируемая сжимаемость волн под магнитопаузой означает невозможность их возбуждения одними альвеновскими резонансами. Мы предлагаем — как общий принцип — примерное совпадение частот разных гармоник разных резонансов в качестве условия усиления резонансов до нелинейных амплитуд и их распространения в ионосферу. Мы подтверждаем наличие резонансных волн у магнитопаузы и демонстрируем нелинейное трехволновое каскадное взаимодействие сжимаемых  $(0.05-5 \text{ м}\Gamma\text{ц})$  и несжимаемых волн под магнитопаузой, обеспечивающее возбуждение резонансов магнитных силовых линий и волноводных резонансов на частотах 1-25 м $\Gamma$ ц без точного совпадения частот с линейными резонансами на магнитопаузе и ударной волне. Это также может обеспечить нелинейную связь линейных и нелинейных резонансов в других многослойных средах (например, в плазменном и нейтральном слоях геомагнитного хвоста и между ним и магнитопаузой). Приведен пример возбуждения волноводной моды внутри магнитопаузы нелинейными мембранными волнами. Обнаружено нелинейное возбуждение и взаимодействие большинства «магических» гармоник под магнитопаузой.

**DOI:** 10.31857/S0044451021020139

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Анализ движения магнитопаузы (МП), наблюдаемого, например, на ИНТЕРБОЛ-1, THEMIS и

<sup>\*</sup> E-mail: ssavin@iki.rssi.ru

CLUSTER [1–10], выявил, что магнитопауза (МП) осциллирует на выделенных («магических») ультранизких частотах, которые видны и в наземных, и в магнитосферных данных:

$$(0.7; 1.3; 1.9; 2.6; 3.3; 4.8; ...)$$
 м $\Gamma$ ц.  $(1)$ 

Магнитопауза представляет собой мембрану под растяжением, которая может резонансно взаимодействовать с магнитосферной полостью, а ионосфера выступает в качестве опоры вдоль магнитных силовых линий. То, что именно поверхностные волны у МП — источник дневных пульсаций Рс5-6 на Земле, не полностью подтверждается у границы замкнутых силовых линий в ионосфере: максимум возмущений смещен внутрь границы захвата частиц [10]. Авторы предположили, что широкополосная турбулентность у МП может мешать передаче и регистрации низкочастотных резонансных волн в ионосфере. Но в работах [1–3] показано, что альвеновскому резонансу подвержены именно пограничные силовые линии. Поэтому мы предлагаем новую модель — мембранной неустойчивости (МН), которая не зависит от альвеновских волн и объясняет наблюдения резонансов от магнитослоя (МСЛ) до нескольких  $R_E$  под МП, причем генерироваться должны как раз наблюдаемые сжимаемые волны. Мы демонстрируем возбуждение альвеновских резонансов магнитных силовых линий мембранными волнами через нелинейные трехволновые взаимодействия и каскады.

#### 2. МОДЕЛЬ МП

Считаем МП в подсолнечной точке круглой, плоской, закрепленной по краям мембраной радиуса  $r_0$  (более простая модель МП с квадратной плоской одномерной мембраной для более высоких частот (свыше 1 мГц) независимо рассмотрена в работе [11]). Закрепленность по краям, как уже упоминалось, обусловлена тем, что силовые линии МП проектируются в ионосферу и далее в мантию Земли (ср. [1–3]).

Решение для механической мембраны известно [12]:

$$u(r,\theta,t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \widehat{v}_{n,m}(r,\theta) \left( A_{n,m} \cos \left( \frac{a\mu_m^n}{r_0} t \right) + B_{n,m} \sin \left( \frac{a\mu_m^n}{r_0} t \right) \right) + \sum_{n,m=0}^{\infty} \widetilde{v}_{n,m}(r,\theta) \times \left( C_{n,m} \cos \left( \frac{a\mu_m^n}{r_0} t \right) + D_{n,m} \sin \left( \frac{a\mu_m^n}{r_0} t \right) \right).$$
 (2)

Суммируются собственные колебания с частотами  $\omega = a\mu_m^n/r_0$ . Здесь  $\mu_m^n - m$ -й корень уравнения функции Бесселя  $J_n(\mu) = 0, \ a = \sqrt{T/\rho}, \ T -$ поверхностное натяжение( $[T] = \mathcal{Д} \mathbb{x}/\mathbb{x}^2$ ),  $\rho -$  поверхностная плотность мембраны ( $[\rho] = \kappa \Gamma/\mathbb{x}^2$ ). Коэффициенты  $A_{n,m}, B_{n,m}, C_{n,m}, D_{n,m}$  определяются из начальных условий

$$u(r,\theta,0) = \sum_{n,m=0}^{\infty} (\widehat{v}_{n,m}(r,\theta)A_{n,m} + \overline{v}_{n,m}(r,\theta)C_{n,m}) =$$
$$= f_1(r,\theta),$$

$$u_t(r,\theta,0) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \left( \widehat{v}_{n,m}(r,\theta) B_{n,m} + \widetilde{v}_{n,m}(r,\theta) D_{n,m} \right) \times \frac{a\mu_m^n}{r_0} = f_2(r,\theta)$$

по формулам

$$A_{n,m} = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{r_0} f_1(r,\theta) J_n\left(\sqrt{\lambda_{n,m}}r\right) \times \left(\cos(n\theta)r \, dr \, d\theta \right) \left\{ \frac{\pi r_0^2}{2} \varepsilon_n \left[ J_n'\left(\sqrt{\lambda_{n,m}}r_0\right) \right]^2 \right\},$$

$$C_{n,m} = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{r_0} f_2(r,\theta) J_n\left(\sqrt{\lambda_{n,m}}r\right) \times \left(\sin(n\theta)r \, dr \, d\theta \right) \left\{ \frac{\pi r_0^2}{2} \varepsilon_n \left[ J_n'\left(\sqrt{\lambda_{n,m}}r_0\right) \right]^2 \right\}.$$
(3)

Аналогичные формулы можно найти для  $a\sqrt{\lambda_{n,m}}B_{n,m}$  и  $a\sqrt{\lambda_{n,m}}D_{n,m}$ . Здесь

$$\lambda_{n,m} = \left(\frac{\mu_m^n}{r_0}\right)^2, \quad \varepsilon_n = \begin{cases} 2, & n = 0, \\ 1, & n \neq 0. \end{cases}$$

Моделирование магнитопаузы тонкой мембраной вполне оправдано. В работе [13] рассматривается возникновение тонких равновесных границ между плазмой и магнитным полем, когда характерная толщина погранслоя даже меньше дебаевского радиуса.

### 3. МГД-ХАРАКТЕРИСТИКИ НАТЯЖЕНИЯ МП

В механике поверхностное натяжение T — это энергия, затрачиваемая на разрыв единицы поверхности. Магнитные силовые линии — как упругие нити стремятся сократиться и развить продольное натяжение  $T=B_0^2/2\mu_0$ , где  $B_0$  — индукция магнитного поля,  $\mu_0$  — магнитная постоянная. У МП мы

**Таблица 1.** Спектр собственных мембранных частот магнитопаузы  $(r_0=10R_E=6.4\cdot 10^7~{
m M})$ 

$\mu_m^0$	2.404	5.520	8.653	11.791	14.930
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0.6	1.3	2.0	2.7	3.4
$\mu_m^1$	0	3.831	10.173	13.323	16.470
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	0.8	2.3	3.1	3.8
$\mu_m^2$	0	5.135	8.417	11.619	14.795
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	1.2	1.9	2.7	3.4
$\mu_m^3$	0	6.380	9.761	13.015	16.223
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	1.5	2.3	3.0	3.7
$\mu_m^4$	0	7.588	11.064	14.372	17.615
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	1.7	2.5	3.3	4.1

используем это МГД-понятие, в качестве плотности используем объемную плотность  $\rho=(m_i+m_e)n_0\approx m_in_0$ , масса иона гораздо больше массы электрона  $(m_i\gg m_e)$ ;  $n_0$  — концентрация плазмы. Размерность натяжения в МГД [T]= Дж/м³, плотности  $[\rho]=$  кг/м³, поэтому размерность  $a=\sqrt{T/\rho}$  остается прежней.

#### 4. СОБСТВЕННЫЕ ЧАСТОТЫ МП

С помощью (2) определены собственные частоты МП при  $\mu_0=1.26\cdot 10^{-6}~\Gamma \mathrm{H/M}$ :

$$B_0 = 2.5 \cdot 10^{-8} \text{Тл},$$
  
 $n_0 = 16 \cdot 10^6 \text{м}^{-3},$   
 $m_i = 1836 \cdot 10^{-31} \text{кг}.$ 

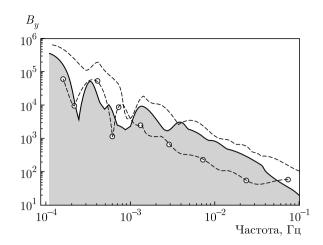
В среде пакета МАРLE решено уравнение  $J_n(\mu)=0$ , т. е. определены первые четыре корня  $\mu_m^n$  функций Бесселя порядка n=0,1,2,3. Теоретические значения собственных частот для функции Бесселя нулевого порядка (вторая строка табл. 1) практически совпадает с экспериментальным рядом «магических» частот [1]. Эта строка представляет собой наименьшие возможные собственные частоты колебаний магнитопаузы, рассматриваемой как мембрана, при  $r_0 \sim 10R_E$ , где может считаться применимой плоская модель мембраны, поскольку радиус кривизны МП здесь больше  $r_0$ . В табл. 2 представлен спектр собственных частот МП, если брать за мембрану прилегающую МП вплоть до ближнего хвоста с эффективным радиусом

**Таблица 2.** Спектр собственных частот МП  $(r_0 = 25R_E)$ 

$\mu_m^0$	2.404	5.520	8.653	11.791
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0.24	0.52	0.8	1.08
$\mu_m^1$	0	3.831	10.173	13.323
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	0.32	0.92	1.24
$\mu_m^2$	0	5.135	8.417	11.619
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	0.48	0.76	1.08
$\mu_m^3$	0	6.38	9.761	13.015
$\omega$ , м $\Gamma$ ц	0	0.6	0.92	1.2

 $r_0 \sim 25 R_E$ . На самом деле, мы просчитали все характерные частоты для  $r_0 \sim 10, 15, 20, 25R_E$ , и убедились в линейной зависимости нулевых частот от  $r_0$ , поэтому приводим только табл. 1 и 2. Для табл. 2 мы получим резонансы от 0.24мГц и выше, хотя использование модели плоской мембраны для выпуклой МП с  $r_0 \sim 25 R_E$  требует дополнительного рассмотрения. Мы полагаем, что кривизна магнитопаузы меняет только численные значения собственных частот. Мы считаем изменения несущественными, исходя из того, что частоты второй сверху строчки табл. 1 близки к «магическим» ионосферным частотам [1]. Кроме того, далее мы показываем, что нелинейные каскады и гармоники обеспечивают синхронизацию резонансов в разных подобластях магнитосферы в достаточно широких поддиапазонах частот (см. обсуждение рис. 2, 5, 6).

Мы рассматриваем эффективный радиус как расстояние вдоль МП от подсолнечной точки до проекции положения спутника на МП вдоль ее нормали. Далее мы подкрепляем это время пролетными соображениями для нулевых гармоник. Обосновывать же дополнительно приближение закрепленной по краям мембраны мы предлагаем за счет инерции длинного геомагнитного хвоста и внешней канализирующей силы — обтекающего потока солнечного ветра (СВ). Внутренние же линии вморожены как в ионосферу, так и в плазменный слой у экватора, обеспечивая внутреннюю канализацию/закрепленность МП. Отметим, что до сих пор мы рассматривали в МН линейные (бесселевы) гармоники собственных колебаний мембраны.



**Рис. 1.** Вэйвлетные спектры мощности компоненты магнитного поля  $B_y$  по данным Интербол–1 (INTERBALL–1, 19.06.1998:в 10–11 UT — магнитосфера (Plasma Ball, PB, [14], серая заливка); 08:53-09:53 UT — МСЛ (штриховая кривая);  $P_{dyn}$ , в CB (SW), 08:30-09:50 UT (светлые символы)

#### 5. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

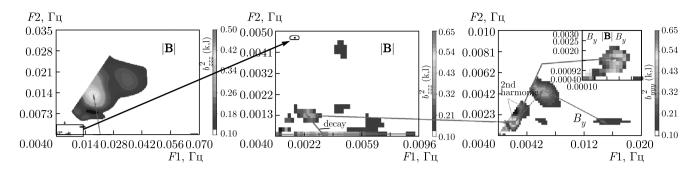
Мы основываемся на сравнении с экспериментальными данными спутников ИНТЕРБОЛ-1, CLUSTER, THEMIS, GEOTAIL в работах [7,8,14–16] и ссылках в них, а также на двух новых примерах, включая данные DOUBLE STAR и SPEKTR-R.

#### 5.1. Данные ИНТЕРБОЛ-1 19.06.1998

Как показано на рис. 1а в работе [14], колебания на частоте 0.3–1 мГц видны от ударной волны (УВ) до МП. При частоте около 0.5 мГц колебания (ср. со второй строчкой табл. 2) длятся два часа внутри МП. На рис. 1b из работы [14] модуль магнитного поля |В| под МП (зеленая заливка) промодулирован частотой около 1.7 мГц в течение 50 мин (заметим, хотя частота и не совпадает с (1), свободный параметр  $r_0$  позволяет найти соответствующую часть резонирующей магнитопаузы, а нелинейные каскады позволяют сопрячь частоты с (1), см. далее). Кроме того, в нижней строчке табл. 1 минимальная гармоника как раз равна 1.7 мГц. Волны распространяются внутрь магнитосферы с затуханием (т. е. они генерируются или усиливаются вблизи МП). Проникновение внутрь МП видно и на рис. 1, где даны спектры магнитной компоненты  $B_{\nu}$ (система координат GSE) за час до и после пересечений МП и спектр динамического давления  $P_{dun}$ в CB (OMNI), характеризующий энергетику колебаний в СВ (ИНТЕРБОЛ-1, 19.06.1998). Видно, что пики в СВ не служат триггерами волн у МП на частотах свыше 0.5 мГц, хотя пик в СВ на частоте около 0.35 мГц (ср. с четвертой строчкой табл. 2) сопровождается пиками в магнитосфере и МСЛ на немного более высокой частоте. Спектры  $B_{y}$  за час до МП (штриховая кривая) напоминают спектры час спустя внутри МП (серая заливка), будучи в 2–3 раза мощнее (вероятно, из-за падения  $|\mathbf{B}|$  сразу под  $\mathrm{M}\Pi$ ) и имея сдвиг максимумов к высоким частотам, как считали до этого, из-за доплер-сдвига в движущемся МСЛ. Мы вернемся к сдвигу при обсуждении рис. 4. То же относится и к максимумам на более высоких частотах. Без учета этого сдвига спектры имеют почти идентичную структуру. Итак, рис. 1 и работа [14] опровергают одно из предположений работы [10] об отсутствии резонансов у МП и ставят проблему роста частоты в МСЛ относительно потенциального триггера в СВ (см.  $P_{dyn}$ ).

На рис. 2 мы приводим би-спектры магнитных компонент  $|\mathbf{B}|$  (сжимаемые волны) и  $B_y$  (в системе координат GSE). Первые соответствуют сжимаемым мембраной волнам (средняя панель — низкочастотная часть левой), правая панель отражает, большей частью, альвеновские резонансы. Для понимания процессов на внешних магнитосферных границах необходим не только спектральный, но биспектральный анализ (т. е. простейший нелинейный анализ для трехволновых процессов): он выявляет процессы, где частоты трех волн  $F1+F2 \sim F3$ (частота F1 — горизонтальная ось рисунка, F2 вертикальная, F3 — подразумевается) и дает их тройную когерентность. Мы приводим данные с би-когерентностью свыше 10% (= 0.1 на цветных шкалах сбоку), которая считается достаточно представительной [7, 8, 14, 16]. К сожалению, наиболее низкие частоты недоступны для анализа (спутник находился в области однородных физических процессов слишком мало времени), но мы исследуем эти частоты по другим данным. Максимумы в биспектрах являются «толстыми», так как в плазме с нелинейными амплитудами колебаний резонансы размываются из-за флуктуаций основных параметров плазмы. Так, в 09:40-10:31 UT среднее значение  $|{f B}|$  (+/- стандартное отклонение) составляет около 30 + / - 11 нТл (полное стандартное отклонение трех компонент равно примерно 25 нТл), т.е. «толщина» резонансов может вполне превышать и 1/3 средней величины. Это и обеспечивает эффективное взаимодействие резонансов, в отличие от линейной ламинарной физики.

Итак, на левой панели даны наиболее высокочастотные данные |**B**| свыше порога (16 Гц). На са-



**Рис. 2.** Вэйвлетные би-спектры компонент магнитного поля  $|\mathbf{B}|$  (левые панели) и  $B_y$  (GSE, правая панель) по данным ИНТЕРБОЛ-1 (INTERBALL-1) 19.06.1998, 09:40-11:17 UT. На вставке в верхнем правом углу правой панели в качестве входов для би-спектрального анализа использовались сигналы  $F1-B_y$  (по горизонтали)  $F2-|\mathbf{B}|$  (по вертикали),  $F3-B_y$  (суммарная, F1+F2=F3)

мой низкой частоте виден нелинейный каскад, когда волны на суммарной частоте F3 несколько раз нелинейно взаимодействуют с исходной F2 («накачка») [7, 8, 14]. Он продолжается до  $F1 \sim 25 \text{ м}$ Гц, и на одной из суммарных частот F3 возникает нелинейный резонанс (показан фиолетовой стрелкой). Мы полагаем, что это возбуждение стоячих быстрых магнитозвуковых волн в полости между магнитопаузой и плазменным слоем (так называемые волноводные (waveguide) моды [9,17]). Они тоже имеют собственные линейные бесселевы гармоники, и мы демонстрируем их нелинейную связь с мембранными модами. Конечно, энергия может идти и от волноводных мод к мембранным. Но поток солнечного ветра непосредственно взаимодействует именно с МП, поэтому мы полагаем, что мембранные моды в большинстве случаев возбуждают волноводные под МП как раз за счет обнаруженного нами нелинейного механизма.

Средняя панель демонстрирует нелинейное возбуждение волн на суммарной частоте  $F3\sim3.5~\mathrm{M}\Gamma$ ц (ср. с пятой строчкой табл. 1) с последующим распадом на F3, обозначенной фиолетово-черной стрелкой и «decay». Низкочастотная горизонтальная «накачка» на  $F2\sim0.5~\mathrm{M}\Gamma$ ц достаточно близка к наименьшей частоте из табл. 1. Фиолетовыми стрелками показаны четыре нелинейные гармоники.

Для  $B_y$  (правая панель) максимум  $(F1,F2) \sim (1.3;2.6 \ \mathrm{M}\Gamma\mathrm{H})$  достигает  $70\,\%$ , что мы связываем с генерацией альвеновского резонанса силовых линий, который и достигает земной поверхности [9–11] (заметьте, на средней панели в  $|\mathbf{B}|$  этот же бимаксимум не превышает  $40\,\%$ ). Это взаимодействие второй и четвертой «магических» гармоник (1), ср. также с табл. 1. Однако процессы в  $B_y$  продолжаются на суммарных частотах F3 (показано фиоле-

товыми стрелками), причем они взаимодействуют и с исходным резонансом  $F2 \sim 1.3$  м $\Gamma$ ц, и при помощи «распада» с  $F3 \sim \text{const}$  с шестой «магической» гармоникой (1), см. зеленый максимум и его левый край, а также голубую с черным стрелку. Более того, на вставке в верхнем правом углу правой панели в качестве входов для би-спектрального анализа использовались разные сигналы на частотах  $F1-B_{y}$ ,  $F2-|\mathbf{B}|, F3-B_{y}$ ; что непосредственно демонстрирует трехволновое взаимодействие между сжимаемыми ( $|\mathbf{B}|$ ) и альвеновскими ( $B_u$ ) резонансами магнитных силовых линий (ср. [16]). И опять «магический» максимум  $(F1, F2) \sim (1.3; 2.6 \text{ м}\Gamma\text{ц})$  близок к 70%, что считается надежным даже для корреляции двух сигналов (ср. с [16]). Чтобы проверить альвеновский характер сигнала, характеризуемого  $B_{y}$ , мы также посчитали стандартные отклонения в 09:40-10:31 UT для  $|\mathbf{B}|$  и несжимаемых (альвеновских) магнитных флуктуаций в трех компонентах: последние в два раза превышают первые. Это значит, что внутри магнитопаузы на рис. 2 доминируют именно альвеновские волны и  $B_{y}$ , по всей видимости, их правильно характеризует.

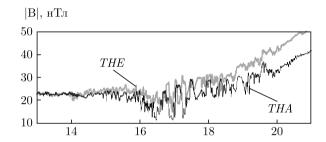
Таким образом, мы демонстрируем существенную роль нелинейных процессов во внешнемагнитосферной физике, в отличие от предыдущих, в основном, линейных подходов (с которого мы и начали в мембранной модели МН).

#### 5.2. 30.10.2007

На рис. 3h в работе [7] была показана регистрация сжимаемых волн в  $|\mathbf{B}|$  на частотах около 1.6 и 3 м $\Gamma$ ц на THEMIS-E (TME порядка  $3R_E$  под МП). Частоты почти идентичны демонстрируемым позже в работе [11] 1.66 и 3.3 м $\Gamma$ ц и могут быть воспроиз-

UT	13		21			
$\fbox{Spacecraft\backslash GSE,RE}$	X	Y	Z	X	Y	Z
SPEKTR-R	-17	30	-9	-16	26	-11
CLUSTER-4	14	-8	-7	6	-7	-2
GEOTAIL	-4	-19	4	2	-25	2
THA/THE	-3	-10	4	3	-8	3

Таблица 3. Координаты спутников 20.03.2012

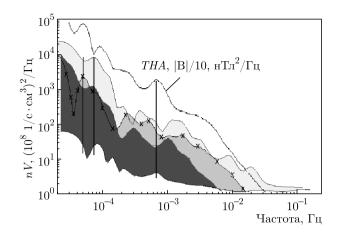


**Рис. 3.** Временной ход  $|\mathbf{B}|$  на TMA и TME 20.03.2012 в 13-21 UT. Орбиту см. в табл. 2

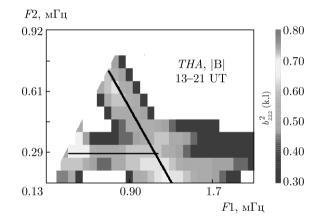
ведены МН при переменном  $r_0 \sim 4$  и  $2R_E$ , соответственно, а также гармониками в нижней строчке табл. 1. Сигнал на частоте 1.6 мГц — квазистационарен (т. е. может возбуждаться относительно слабыми стационарными волнами в СВ), а сигнал на частоте 3 мГц был вызван четырьмя плазменными струями в МСЛ, период появления которых равен периоду резонансных затухающих колебаний. Авторы [7] показали, что два мощных возмущения — токовых слоя — в СВ вызывают эти колебания. Это согласуется с [10, 11, 15, 16]: резонансы наблюдаются как у МП, так и внутри нее. Но у МП существует широкий спектр волн, мешающий регистрации резонансов в ионосфере [10]. Резонансы же порядка Pc5-6 с длиной волны вплоть до нескольких  $R_E$  (порядка глубины орбиты ТМЕ под МП) проникают глубже высокочастотной турбулентности и возбуждают резонансные колебания силовых линий (ср. рис. 2), они хорошо видны и под углом  $1^{\circ}-4^{\circ}$ внутри границы замкнутых силовых линий в ионосфере [10].

#### 5.3. Новый пример 20.03.2012

Мы представляем новые данные, включающие измерения потока плазмы на SPEKTR-R. Мы сравниваем данные с пяти космических аппаратов (KA,



**Рис. 4.** Вэйвлетные спектры мощности потока плазмы nV: 20.03.2012. WIND, CB (SW), 13-18 UT, нижний график без заливки; SPEKTR-R, 13-21 UT, крестики (голубая заливка); CLUSTER-4 13-18 UT, светлая (желтая) заливка; GEOTAIL, 05-24 UT, темная (фиолетовая) заливка; THA,  $|\mathbf{B}|$ , 13-21 UT, верхняя кривая. Орбиты см. табл. 2, 20.03.2012, вэйвлетная би-когерентность  $|\mathbf{B}|$ , THA, 13-21 UT



**Рис. 5.** Трехволновой процесс: когерентность трех сигналов: F1 (горизонтально) + F2 (вертикально) = F3 (не показано)

ХGSE от 14 до  $-17R_E$ , см. табл. 3). Вне МП мы анализируем поток ионов nV (произведение плотности ионов на скорость), т.е. доминирующий импульс в СВ/МСЛ. Внутри МП (по данным спутников THEMIS-A/E=TMA/TME) анализируется импульс  $|\mathbf{B}|$ , отражающий доминирующее магнитное давление внутри магнитосферы. На рис. 3 показаны сжимаемые волны в  $|\mathbf{B}|\sim 3$ –4 $R_E$  под МП. Амплитуда волн на TME значительно выше, чем на TMA (TME примерно на  $1R_E$  ближе к МП). Это говорит о малой вероятности непосредственного достижения этой сжимаемой волной ионосферы. Вэйвлетный спектр мощности на TMA с рис. 3 приведен на рис. 4 (верхняя кривая), а вэйвлетная би-спектро-

грамма (отражающая нелинейное трехволновое взаимодействие) — на рис. 5.

На THA в области интенсивных волн в 16-19 UT стандартное отклонение  $|{\bf B}| \sim 4.9 \; {\rm нTл}$ , а перпендикулярное магнитному полю составляет примерно 3.3 нТл. Таким образом, здесь преобладают сжимаемые, а не альвеновские волны [1–3] (ср. с [11]). По всей видимости, ТНА и ТНЕ регистрируют и альвеновские волны на резонансной для силовой линии частоте (линейной) порядка 0.6-0.7 мГц [1-3,11,17]. О нелинейных трехволновых каскадообразных процессах говорят максимумы (свыше 50%), близкие к черным линиям на рис. 5. Основной каскад (наклонная линия) соответствует трехволновому процессу с частотами  $F1+F2\sim 1.4$  м $\Gamma$ ц (близко ко второй «магической» частоте). Он начинается на  $F2 \sim 0.7 \text{ м}$ Гц — частоте максимума в спектре |**B**| на рис. 4, что соответствует первой «магической» частоте (1). Этот же максимум, почти без доплерсдвига, виден и в СВ, однако, в МСЛ (спектры с заливкой) только на CLUSTER-4 и SPEKTR-R видны слабые максимумы на меньших частотах, не объяснимые доплер-сдвигом (так как его нет на THA). Таким образом, этот резонанс не распространяется наружу от МП к Солнцу вдали от подсолнечной точки, вблизи которой он, по-видимому, и возбуждается (из-за совпадения частот в СВ, в гармонике МН и, возможно, волноводного резонанса [9], см. далее «множественные резонансы»). Горизонтальный каскад на частоте  $F2 \sim 0.29$  м $\Gamma$ ц близок к минимальной частоте табл. 2. Более точно частоту можно получить, слегка уменьшив  $r_0$  (так как нулевая бесселева частота линейно зависит от его обратной величины, (ср. табл. 1, 2).

Поскольку на ТНА доминируют сжимаемые волны, они вызываются не альвеновскими резонансами [1–3], а мы считаем, низшей «магической» (1) гармоникой  $MH \sim 0.6$ –0.7 м $\Gamma$ ц с характерным размером резонанса мембраны  $r_0 \sim 10 R_E$  (табл. 1). Для  $r_0 \sim 25 R_E$  доминируют волны с частотой  $0.24~\mathrm{m}\Gamma\mathrm{m}$ (табл. 2), что близко к минимальной частоте пиков на рис. 4, из чего и выбран  $r_0$  для табл. 2. Физическим основанием для этого служит то, что с ростом  $r_0$  должно увеличиваться время пролета резонансной волны вдоль мембраны. Мы также предполагаем, что этот принцип — линейной зависимости периода основного мембранного резонанса от эффективного радиуса мембраны — справедлив и для изогнутой мембраны, т.е. МП вдали от подсолнечной точки (время пролета резонансной волны вдоль МП может расти примерно линейно с ростом эффективного радиуса).

Мы считаем, что МН деформирует МП и создает флуктуации магнитного давления на внутренней кромке МП. Глубоко внутрь магнитосферы флуктуации, возбуждаемые возмущением |В| (отражающего изменения магнитного давления), попадают, вероятно, за счет раскачки альвеновских резонансов силовых линий (ср. рис. 2, [1–3, 11, 16, 17]). Суммарная частота трехволнового резонанса для частот  $F1 + F2 = F3 \sim 1.4$  мГц (рис. 5) видна лишь в слабых спектральных максимумах в МСЛ и в «полке» в  $|\mathbf{B}|$  на рис. 4, совпадая с одной из гармоник табл. 1. На рис. 5 амплитуда этого резонанса превышает 60% и приводит к каскаду трехволновых распадов (см. наклонную черную прямую, «распад», см. далее). Как мы уже говорили, дискретным нелинейным каскадом является взаимодействие сигнала на одной из частот F1 - F3 с сигналами на других фиксированных частотах F1 - F3 с повторением нелинейного взаимодействия вдоль линии, фиксирующей каскадную частоту [7, 8, 14] (не путать с турбулентным каскадом). Если  $F3 \sim \text{const}$ , то это «распад» исходной волны на дочерние волны, соответствующий наклонным линиям на рис. 2, 5, 6 (см. далее). Если  $F2/F1 \sim {\rm const} - {\rm это}$  горизонтально/вертикально протяженный максимум («накачка»). При этом для распадающихся волн на рис. 5 с частотами 0.1 < F1 < 0.7 < F2 < 1.4 м $\Gamma$ ц (ср. с рис. 2) резонансов магнитосферных силовых линий и/или волноводных мод в непрерывном интервале 0.1-1.4 мГц не наблюдается. Каскад на  $F2 \sim 0.26$ –0.32 м $\Gamma$ ц (см. горизонтальную черную линию на рис. 5) начинается максимумом  $F2 \sim 70\%$ (слева, считаем, что это — «накачка» от УВ/МСЛ [16]). Он соответствует едва заметному пику на рис. 4. Его вторая (нелинейная) гармоника — близка к начальной частоте F2 наклонного каскада (примерно первая «магическая» частота). Максимумы на 0.05–0.5 м $\Gamma$ ц наблюдаются часто (см. рис. 1, 4, [8]), но они до сих пор не были объяснены. МН делает это, если считать, что в разных точках наблюдения доминируют разные гармоники (преимущественно, нулевые) с разным соответствующим характерным размером резонансной области  $r_0$ . На рис. 4 на GEOTAIL (наиболее близкому к THAпо XGSE) виден максимум на частоте 0.3 м $\Gamma$ ц  $r_0 \sim 20R_E$ ), на THA — относительный максимум при частоте примерно на 0.25 мГц (ср. табл. 2). Напомним, вторая (нелинейная) гармоника этой частоты может резонировать с линейной гармоникой резонансной силовой линии на частоте примерно 0.6-0.7 мГц (близка к первой «магической» частоте (1) (см. рис. 5, табл. 1), предсказываемой в работах [1-3, 11, 17] и возбуждаемой МН в зоне резонансного возбуждения МП до  $r_0 \sim 10 R_E$ . Насчет резонансного возбуждения: дополнительно следует рассмотреть, как резонансные волны распространяются вверх по потоку магнитослоя. В [16] показано, что в магнитослое регистрируется распространение возмущений в сторону Солнца. Отсюда наша концепция: в резонансе участвует, главным образом, магнитопауза в сторону Солнца от спутника, и он видит ее результат благодаря движению волн к Солнцу [16]. Кстати, деление характерной альвеновской скорости (порядка 100 км/с) на эффективный диаметр мембраны для табл. 1 (т. е. пролет резонансной волны от центра мембраны и обратно) дает именно частоту около 0.7 мГц. На ближайшем к Солнцу CLUSTER-4 — максимум наблюдается на частоте 0.4 мГц  $(r_0 \sim 15 R_E)$ , на самом удаленном от Солнца SPEKTR-R — на 0.22 мГц ( $r_0 \sim 27 R_E$ , ср. с табл. 2). Это может означать, что в мембранном резонансе радиус  $r_0$  действительно близок к длине МП от подсолнечной точки до места измерения вдоль магнитопаузы. При этом резонансы возбуждаются не обязательно на частотах спектральных пиков СВ, что не должно казаться удивительным: усиление мощности в резонансных пиках в МСЛ на рис. 3 достигает 1.5-2 порядков относительно СВ, тогда как пики в СВ превышают фон только в 1.5-3 раза. Однако спектральные пики в СВ могут-таки провоцировать резонансы под МП (см. рис. 1, 4). Отметим, уменьшение частоты с удалением КА от Солнца в МСЛ не объясняется доплер-сдвигом: он должен расти из-за вторичного ускорения в сторону магнитосферного хвоста потока, обтекающего хвостовую магнитосферу. На SPEKTR-R виден пик на частоте 0.5 мГц, в принципе, объяснимый доплеровским сдвигом, но все равно, пики около 0.3 мГц на GEOTAIL и SPEKTR-R не могут быть объяснены доплер-сдвигом. Возвращаясь к увеличению частоты резонанса в МСЛ с 0.31 до 0.4 мГц на рис. 1, она может быть связана с тем, что KA «видят» резонансы на разных гармониках (и/или резонируют разные области погранслоев с разным  $r_0$ ). Ближе к Солнцу КА пролетает области, резонирующие с меньшей частью МП, отсюда большая частота гармоник. А пик под МП больше выделяется на рис. 4, вероятно, из-за совпадения с пиком в СВ. На частоте 0.5–2 мГц (рис. 4) пики в МСЛ расположены в той же последовательности, что и рассмотренные выше, но не имеют триггерных пиков в СВ. Однако они укладываются в рамки МН (ср. табл. 1, 2).

Два низкочастотных максимума в  $|\mathbf{B}|$  на частотах 0.05 и 0.1 м $\Gamma$ ц на рис. 4 могут быть вызваны

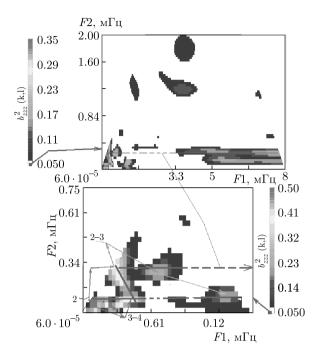
похожими максимумами в СВ на частотах 0.08 и 0.13 мГц, доплер-сдвинутыми на 0.03 мГц. Похожие максимумы видны в МСЛ, их частота тоже уменьшается с удалением от Солнца, а мощность выше уровня СВ опять на 1.5-2.5 порядка. И снова минимальную частоту на SPEKTR-R нельзя объяснить доплер-сдвигом. На *TMA* и SPEKTR-R самый низкочастотный пик наблюдается на 0.05 мГц, он требует участия в резонансе МП вплоть до XGSE порядка  $-70R_E$ ,что трудно объяснить МН: здесь, очевидно, приближение плоской мембраны не работает прямо. Хотя последовательность частот на разных КА, объясняемая МН, сохраняется. Если линейная зависимость периода возмущений от эффективного радиуса мембраны для нулевой гармоники качественно работает и здесь (ср. время пролета резонансной волны вдоль мембраны), то совпадение частот на TMA и SPEKTR-R может объясняться тем, что с ростом  $r_0$  растет и длина резонансной волны, делая пренебрежимым доплер-сдвиг в МСЛ.

#### 5.4. Новый пример 27.03.2005

В этом случае мы прокоррелировали все доступные данные 27.03.2005 г. и подтвердили прохождение резонансных волн от солнечного ветра до наземных станций на полярных широтах. Их частоты удовлетворительно согласуются с бесселевыми гармониками линейных резонансов на разных границах.

В работах [8,16] показано как и какими волнами разрушается бесстолкновительный поток СВ, набегающий на магнитосферу: слабые короткие импульсы волн, бегущие навстречу СВ, в необычайно мощном трехволновом каскадном взаимодействии в три этапа термализуют и отклоняют поток СВ. Причем характерные частоты наблюдаемых нелинейных резонансов могут быть описаны МН как линейные затравки и/или множественные резонансы (хотя бы для тех возмущений, которые возбуждаются у МП). Заметим, что в работе [16], в отличие от [11], рассматривается единый синхронизированный процесс резонансов у УВ, МП и в МСЛ. Здесь мы приводим новые результаты би-спектрального анализа у МП, демонстрирующие роль нелинейных взаимодействий и каскадов в установлении взаимосвязи резонансов у МП и внутримагнитосферных волн вплоть до локальных резонансных частот силовых линий порядка 5-7 мГц [11, 17].

На рис. 6 даны вэйвлетные би-спектры  $|\mathbf{B}|$  на спутнике GEOTAIL, который выходил из магнито-сферы и фиксировал множественные разрывы МП



**Рис. 6.** 27.03.2005, см. [16]. Вэйвлетная би-когерентность  $|\mathbf{B}|$ , GEOTAIL, 03-16 UT. Стрелки на нижней панели (фрагменте верхней) показывает генерацию нелинейных гармоник на суммарных частотах и их дальнейшее трехволновое взаимодействие (максимумы)

под воздействием модулированных на изучаемых частотах плазменных струй [16]. Считается, что их модуляция возникает на деформированной резонансами ударной волне и что она синхронизована с резонансами на МП [8, 16]. Мы также предполагаем, что возбуждаются преимущественно частоты вблизи собственных (мембранных) резонансов МП короткими импульсами вектора Пойнтинга в сторону Солнца ([16], см. далее). «Накачка» с уровнем би-когерентности порядка 60%, по всей видимости, происходила на  $F2 \sim 0.15$  м $\Gamma$ ц, определяемой плазменными струями [8,16] (см. большое красное пятно в левом нижнем углу нижней панели). Нелинейные гармоники (на суммарной частоте, вплоть до четвертой) показаны стрелками. Они, в свою очередь, продолжают трехволновые взаимодействия как с исходным сигналом и между собой, так и с другими волнами (максимумы на нижней панели). Заметьте, горизонтальные и наклонный каскады (фиолетовые линии) качественно хорошо согласуются с рис. 2, 5. Верхняя панель показывает генерацию нелинейных каскадов (горизонтальные,  $F2 \sim \text{const}$ , протяженные максимумы) на частотах  $F1 \sim 3-7$  м $\Gamma$ ц, что попадает в область резонансов магнитных силовых линий [8, 11, 17]. Причем наиболее выделяющаяся нелинейная связь, обеспечивающая синхронизацию внешних и внутренних магнитосферных процессов, видна на второй (нелинейной) гармонике частоты накачки (см. горизонтальные максимумы на  $F2\sim0.3$  м $\Gamma$ ц). Эта частота близка к минимальной частоте табл. 2. Более точно частоту можно получить, слегка уменьшив  $r_0$ .

На нижней части рис. 6 основной горизонтальный нелинейный каскад вблизи  $0.15~\mathrm{m}\Gamma$ ц порождает также нелинейные гармоники вплоть до четвертой.

Таким образом, мы еще раз демонстрируем, что взаимосвязь внешнемагнитосферных и/или поверхностных МП-мод с внутримагнитосферными может происходить именно посредством нелинейных гармоник и трехволновых каскадов (см. также обсуждение рис. 2, 5).

#### 6. СЦЕНАРИИ РАЗВИТИЯ РЕЗОНАНСОВ

Как мы видели, и в теории, и в эксперименте существует множество гармоник и резонансов у МП (ср. [3, 8, 17] и ссылки там). Какие же резонансы реализуются и видны в эксперименте? Как мы показали, в различных погранслоях могут доминировать разные гармоники и/или резонансы с разными эффективными радиусами мембраны. Напомним, деление характерной альвеновской скорости на эффективный диаметр мембраны (пролет резонансной волны туда и обратно) дает частоты, близкие к предсказываемым МН для нулевых бесселевых гармоник.

Особое внимание надо обратить также на взаимодействие линейных и нелинейных гармоник. Пример резонанса на THA на частоте около 0.7 мГц (рис. 4) свидетельствует, что спектральные пики в СВ проникают под МП, скорее всего, через нулевую гармонику МН с  $r_0 \sim 10R_E$ , доминирующую вблизи подсолнечной точки, что вместе с альвеновским резонансом силовых линий ( [1–3,17], рис. 2) может приводить к «магическим» пикам, видимым вплоть до ионосферы.

Мы придерживаемся гипотезы: в спектрах мощности доминируют множественные резонансы гармоник, т. е., например, СВ, МН, альвеновские [1–3] (ср. рис. 2, 4), магнитозвуковые (волноводные или «waveguide modes» и Kruskal–Schwarzschild [4,5,17]), локальные [8,11,17], которые дорастают до нелинейных амплитуд. Спектральные пики в СВ стимулируют пики под МП, но не являются необходимыми. Для «сильных» транзиентных возмущений, вызывающих нелинейную реакцию МП, когда частота (или

обратный интервал между ними, см. [7]) в СВ совпадает с частотой бесселевой гармоники (в линейном приближении), на ней развивается первоначальный резонанс (затухающий) и при дорастании амплитуды до нелинейной его «обычные» гармоники, а при очень сильных возмущениях — и нелинейные на половине частоты, резонирующие с «накачкой», рис. 6. Далее возбуждаются нелинейные дискретные каскады (не путать с турбулентными) на разных гармониках различных резонансов [8,16]. В спектрах мощности также появляются максимумы при совпадении частот нескольких резонансов разной природы или имеющих разные масштабы области возбуждения (и в результате, приобретающие нелинейные амплитуды). На частотах в десятки мГц дискретный каскад размывается и превращается в непрерывный (за счет расширения и перекрытия резонансов в среде с высоким уровнем флуктуаций [8]). Его обычно и считают турбулентным.

#### 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Упрощенная мембранная неустойчивость (МН), а также элементарные времяпролетные оценки для резонансной волны дают неплохое совпадение с экспериментом вблизи подсолнечной точки и позволяет объяснить (качественно) структуру спектров мощности потока плазмы одновременно на разных участках погранслоев у МП, а также связать их с би-спектральными максимами. МН объясняет резонансы на частотах 0.05-0.5 мГц, несмотря на ограничения модели плоской мембраны. Рисунок 3h в [7] и рис. 1-3 демонстрируют сжимаемость резонансных волн у МП (ср. [11]), что означает невозможность возбуждения резонансов МП одними альвеновскими модами [1–3]. Мы предполагаем — как общий принцип — совпадение частот разных гармоник разных резонансов и рост их амплитуд до нелинейных уровней как условие усиления спектральных и биспектральных пиков у МП и их распространения в ионосферу («множественные резонансы»).

В противоположность одному из предположений [10] мы демонстрируем не только наличие резонансов у МП, но и регистрацию каскадного нелинейного распада и взаимодействия множественных нелинейных гармоник под МП, который обеспечивает возможность возбуждения магнитосферных резонансов на частотах  $0.1-25~\text{м}\Gamma\text{ц}$  без изначального точного совпадения частот с частотами гармоник линейных резонансов МП и силовых линий. Подобная связь может быть и между МН, альвеновски-

ми, Kruskal—Schwarzschild и волноводными модами («waveguide modes», ср. рис. 2 и [1–9,11,17]). Кроме того, продемонстрирован процесс нелинейного возбуждения альвеновского резонанса магнитных силовых линий [17] сжимаемыми волнами (рис. 2), включающий в себя нелинейные взаимодействия и генерацию большей части «магических» гармоник (1).

Наша простая мембранная модель, не являясь прямо применимой вдали от подсолнечной точки магнитопаузы, однако, показывает направление дальнейших исследований — как нужно пытаться упорядочить данные с разных спутников — и качественно объясняет резонансы вплоть до 0.05–0.5 мГц. Приведен пример возбуждения волноводной моды внутри магнитопаузы, по всей видимости, нелинейными волнами мембранной неустойчивости (рис. 2). Четырехволновой нелинейный анализ данных — предмет отдельного исследования.

Влагодарности. Авторы признательны за поддержку работы ISSI Team Savin/Wang, LPCEE (Orleans) за использование программы SWAN для вэйвлетного анализа, экспериментаторам CLUSTER, THEMIS, GEOTAIL, WIND, за данные через CDAWeb, CSDS и SPDF. Особая благодарность профессору Г. Н. Застенкеру за предоставление данных BMSW (SPEKTR-R) и многочисленные полезные консультации. Мы признательны рецензенту за его актуальные вопросы, ответы на которые позволили существенно улучшить доказательную базу статьи.

#### ЛИТЕРАТУРА

- F. Plaschke, K. H. Glassmeier, H. U. Auster, O. D. Constantinescu, W. Magnes, V. Angelopoulos, D. G. Sibeck, and J. P. McFadden, Geophys. Res. Lett. 36, L02104 (2009).
- F. Plaschke, K. H. Glassmeier, H. U. Auster, V. Angelopoulos, O. D. Constantinescu, K. H. Fornacon, E. Georgescu, W. Magnes, and J. P. McFadden, J. Geophys. Res. 114, A00C10 (2009).
- 3. F. Plaschke, K.-H. et al., Geophysical Monograph. American Geophys. Union & John Wiley and Sons. 216, 195 (2016).
- 4. J. C. Samson, B. G. Harrold, J. M. Ruohoniemi, R. A. Greenwald, and A. D. M. Walker, Geophys. Res. Lett. 19, 441 (1992).

- I. R. Mann, A. N. Wright, K. J. Mills, and V. M. Nakariakov, J. Geophys. Res. 104, 333 (1999).
- M. O. Archer and T. S. Horbury, Ann. Geophys. 31, 319 (2013).
- С. П. Савин, В. П. Будаев, Л. М. Зеленый, Э. Амата, Д. Сайбек, В. Н. Луценко, Н. Л. Бородкова, Х. Занг, В. Ангелопулос, Я. Шафранкова, З. Немечек, Я. Бленцки, Й. Бюхнер, Л. В. Козак, С. А. Романов, А. А. Скальский, В. Красносельских, Письма в ЖЭТФ 93, 837 (2011).
- S. Savin, E. Amata, V. Budaev, L. Zelenyi, E. A. Kronberg, J. Buechner, J. Safrankova, Z. Nemecek, J. Blecki, L. Kozak, S. Klimov, A. Skalsky, L. Lezhen, Письма в ЖЭТФ 99, 19 (2014).
- V. M. Nakariakov, V. Pilipenko, B. Heiliget, P. Jelínek, M. Karlický, D. Y. Klimushkin, D. Y. Kolotkov, D.-H. Lee, G. Nisticò, T. Van Doorsselaere, G. Verth, and I. V. Zimovets, Space Sci. Rev. 200, 75 (2016).
- В. А. Пилипенко, О. В. Козырева, Л. Бэддели, Д. Лорентцен, В. Б. Белаховский, Солнечно-земная физика 3, 17 (2017).

- **11.** M. O. Archer, H. Hietala, M. D. Hartinger, F. Plaschke, and V. Angelopoulos, Nat. Commun. **10**, 615 (2019).
- А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, Уравнения математической физики, Наука, Москва (1966).
- 13. V. V. Lyahov and V. M. Neshchadim, Advances in Space Research 65, 2782 (2020).
- 14. S. Savin, J. Büchner, G. Consolini, B. Nikutowski, L. Zelenyi, E. Amata, H. U. Auster, J. Blecki, E. Dubinin, K. H. Fornacon, H. Kawano, S. Klimov, F. Marcucci, Z. Nemecek, A. Pedersen, J. L. Rauch, S. Romanov, J. Safrankova, J. A. Sauvaud, A. Skalsky, P. Song, and Yu. Yermolaev, Nonlin. Proc. Geophys. 9, 443 (2002).
- M. O. Archer, T. S. Horbury, J. P. Eastwood, J. M. Weygand, and T. K. Yeoman, J. Geophys. Res. 118, 5454 (2013).
- **16**. S. Savin, E. Amata, L. Zelenyi et al., Письма в ЖЭТФ **110**, 323 (2019).
- 17. A. Keiling, D.-Hun Lee, and V. Nakariakov, *Low-Fre-quency Waves in Space Plasmas* (Geophysical Monograph Series), American Geophysical Union (2019).

### СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

#### М. Ю. Романовский\*

Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук 119991, Москва, Россия

МИРЭА— Российский технологический университет 119454, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2020 г., после переработки 9 октября 2020 г. Принята к публикации 12 октября 2020 г.

Рассматриваются системы многих частиц, содержащихся внутри других частиц (задача 1), а также системы частиц, отграниченных внутри других частиц, которые, в свою очередь, отграничены внутри третьих частиц (задача 2). При естественных предположениях о сохраняющихся величинах, таких как общее количество всех частиц, общей энергии и ряда других, изучается наивероятнейшие распределения частиц по энергии — истинные (внутренние) и внешние — наблюдаемые. Результаты задач 1 и 2 могут трактоваться как разделение частиц нижнего уровня на сорта с разными распределениями, наблюдаемыми в разных экспериментах. В одночастичных наблюдениях в полной вероятностной задаче 1 непротиворечивым образом возникает эффективный принцип Паули.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020140

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно [1, 2], что система тождественных неразличимых частиц с дискретным энергетическим спектром при естественных предположениях о конечном числе всех частиц и существовании средней энергии частицы дает в качестве наивероятнейшей экспоненциальную плотность вероятности распределения i нахождения частицы в определенном i энергетическом состоянии  $\epsilon_i$  вида

 $W(\epsilon_i) = \frac{1}{\tau} e^{-\epsilon_i/\tau},$ 

где  $\tau$  — нормировочный коэффициент, имеющий смысл некоторой средней энергии или эффективной температуры системы частиц. Статистические ха-

рактеристики конкретных физических систем находятся как частные случаи применения этого общего распределения (распределения Гиббса). Это достигается путем введения ограничений, вытекающих из физических свойств рассматриваемых систем. Например, функции распределения для идеальных газов Ферми и Бозе получаются при учете перестановочной симметрии частиц. Назовем этот результат «задачей 0». Термодинамические величины и законы в такой системе бесструктурных частиц хорошо известны. В настоящей работе в качестве конкретных объектов рассматриваются системы, состоящие из неразличимых частиц, имеющих внутреннюю структуру.

Такие более сложные системы, состоящие из неразличимых частиц, имеющих внутреннюю структуру, во-первых, модифицируют термодинамические соотношения, как, например, это происходит для плазмы [3], так и приводят к новым эффектам типа «отрицательного трения» [4] (такие частицы часто именуются «активными»). Поэтому естественно возникает вопрос, что будет происходить с распределениями частиц по энергии, если определенные группы частиц отграничены от других, или одни частицы (назовем их части-

<sup>\*</sup> E-mail: slon@kapella.gpi.ru

<sup>1)</sup> Далее для простоты мы будем именовать функции плотности вероятности распределения функциями распределения и просто распределением. Отметим также, что реально в работе под частицей понимается энергетическое состояние системы, более точно — какая-нибудь наблюдаемая характеристика, определяемая этим состоянием — дипольный момент, магнитный момент, и т. д., см. ниже. По-видимому, рассмотрение может быть применено и вовсе не к физическим системам.

цами верхнего уровня) содержат другие (нижнего уровня, также неразличимые). Здесь термин «отграничение» представляется наиболее адекватным для последующего анализа поведения иерархических систем частиц, аналогичным раскладыванию по коробкам (и отдельных коробок по еще большим коробкам, как в задаче 2, см. ниже), как это было сделано в работах [1,2].

Эта задача также рассматривалась (см., например, [1]). При дополнительном предположении об *а priori* разном количестве частиц нижнего уровня внутри частиц верхнего уровня, наивероятнейшее распределение дается большим каноническим ансамблем. Условие тождественности частиц верхнего уровня здесь не ставится. Назовем это «задачей 0'». Дело не обязательно ограничивается частицами и распределениями по энергии — можно рассматривать, например, системы, имеющие внутри определенные структуры, которые оказывают влияние на внешние проявления системы, в этом случае роль «распределения по энергии» частиц нижнего уровня играет распределение по какому-то свойству (или признаку) системы нижнего уровня.

Естественным является переход к задаче с учетом наблюдаемой неразличимости частиц верхнего уровня, назовем это «задачей 1». Здесь следует найти наивероятнейшие распределения частиц нижнего уровня по энергии. Нельзя исключить, что таких распределений может быть несколько. Во-первых, это «истинные» распределения по энергии частиц нижнего уровня в одной частице верхнего уровня. Следует при этом выяснить, являются ли они наблюдаемыми, и если да, то в каких экспериментах. Во-вторых, какие распределения будут наблюдаемыми, и в чем их отличие от истинных. Естественным пределом задачи 1 при наличии внутри частицы верхнего уровня только одной частицы нижнего является (при определенных условиях) задача 0.

Постановка задачи может быть и более сложной, когда частицы имеют внутреннюю структуру в виде других частиц, которые, в свою очередь, содержат внутри себя еще и третьи частицы, это можно назвать задачей 2. Здесь также следует определить истинные и наблюдаемые наивероятнейшие распределения частиц нижнего уровня по энергии. Достаточно общепринятым является представление о частицах, заключенных в коробки (см., например, [1]), или в коробки с перегородками [2]. Последние могут быть заключены в некоторые внешние коробки, тогда получается задача 2. Очевидные примеры задачи 2 (отнюдь не только физические) легко определит читатель.

Решение задачи 1 подсказывает комбинаторная проблема о количестве комбинаций при распределении одинаковых предметов по группам. Решение задачи 2 будет приведено далее.

#### 2. ЗАДАЧА 1

Пусть имеется набор  $(m_i)$  частиц верхнего уровня таких, что в  $m_1$  таких неразличимых частицах содержится по  $p_1$  частиц нижнего уровня<sup>2)</sup>, в  $m_2$  — по  $p_2$ , и т. д. вплоть до N-й частицы нижнего уровня. Здесь n — общее количество различных расстановок частиц нижнего уровня по частицам верхнего уровня. Полное количество N частиц нижнего уровня

$$N = \sum_{i=1}^{n} m_i p_i \tag{1}$$

распределено всего по M частицам верхнего уровня

$$M = \sum_{i=1}^{n} m_i. \tag{2}$$

При этом общее количество перестановок всех частиц нижнего уровня по всем частицам верхнего уровня есть  $W_{10}$  [5]:

$$W_{10} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{n} (p_i!)^{m_i}},$$
(3)

а при условии упомянутой неразличимости частиц верхнего уровня

$$W_{11} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{n} (p_i!)^{m_i} \prod_{i=1}^{n} (m_i!)}.$$
 (4)

Обычно пользуются выражением  $\ln W_{11}$ :

$$\ln W_{11} = \ln N! - \sum_{i=1}^{n} m_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^{n} \ln(m_i!).$$
 (5)

Заметим, что, если здесь  $m_i \equiv 1$ , то для задачи вычисления наивероятнейшего распределения, определяемого условиями (1), (2), (4), мы имеем формулировку, аналогичную формулировке задачи  $0^{3}$ .

<sup>2)</sup> Если вместо «частиц верхнего уровня» читать «связок», вместо «частиц нижнего уровня» читать «грибов», то получится формулировка задачи о сушке грибов [5], или задача о циклических перестановках [6].

 $<sup>^{3)}</sup>$  Если в задаче о получении большого канонического ансамбля допустить варьирование N, то ее можно свести к задаче 1. Это не было сделано (см., например, [6]).

Пусть каждая частица нижнего уровня может находиться в состоянии с какой-то энергией  $\epsilon_i$ . Для отыскания наивероятнейшего распределения по этим энергиям при произвольном  $m_i$  следует учесть, что, кроме выражения (3) или (4), и связей (1) и (2) еще имеются условия конечности полной энергии всей системы частиц

$$E = \sum_{i=1}^{n} m_i p_i \epsilon_i, \tag{6}$$

которое практически означает, что существует средняя «энергия» одной частицы нижнего уровня  $\langle \epsilon \rangle$ .

Решим задачу 1. Для этого сначала образуем вариацию от выражения (5) с учетом простейших связей (1), (2) и (6). Для этого в уравнение (5) надо в правую часть добавить члены  $\alpha N + \beta M + \gamma E$  с лагранжевыми множителями  $\alpha$ ,  $\beta$ , и  $\gamma$ :

$$\ln W_1 = \ln N! - \sum_{i=1}^n m_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^n \ln(m_i!) +$$

$$+ \alpha \sum_{i=1}^n m_i p_i + \beta \sum_{i=1}^n m_i + \gamma \sum_{i=1}^n m_i p_i \epsilon_i.$$
 (7)

Используем также первое приближение формулы Стирлинга по m! и p!, и проведем варьирование по  $\delta p_i$  и  $\delta m_i$ . Тогда получим для вариации наивероятнейшего распределения  $\ln W_1$ :

$$\delta \ln W_1 = \sum_{i=1}^{n} [-(\delta m_i) p_i (\ln p_i - 1) - (\delta p_i) m_i \ln p_i - (\delta m_i) \ln m_i + \beta (\delta m_i) + \alpha (\delta m_i) p_i + \alpha m_i (\delta p_i) + \gamma (\delta m_i) p_i \epsilon_i + \gamma (\delta p_i) m_i \epsilon_i] = 0.$$
(8)

Соберем члены при независимых вариациях  $\delta p_i$  и  $\delta m_i$ . Для первой вариации, сократив все слагаемые на ненулевые величины  $\delta p_i$  и  $m_i$ , получим первое уравнение системы:

$$ln p_i = \alpha + \gamma \epsilon_i.$$
(9)

Для второй вариации, сократив на ненулевую величину  $\delta m_i$  и использовав уравнение (9), получим

$$ln m_i = \beta + p_i.$$
(10)

Уравнения (9) и (10) дают решение задачи 1.

Решение уравнения (9) точно соответствует обычному распределению Гиббса (см. Введение, [1,2]) и решению задачи 0. Отличия же от решения задачи 0' заключаются в том, что в задаче 0' не осуществляется варьирование по числу частиц верхнего уровня. Решения системы (9) и (10) очевидны:

$$p_i = e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} \tag{11}$$

и, в свою очередь,

$$m_i = e^{\beta + p_i}. (12)$$

Таким образом, истинная функция наивероятнейшего распределения частиц нижнего уровня по энергии оказывается точно такой же, как и наивероятнейшая функция распределения в задаче 0 это вероятность найти частицы нижнего уровня в энергетическом состоянии  $\epsilon_i$ .

Однако эта функция не является прямо наблюдаемой и прямо измеримой. Для того чтобы измерить эту функцию распределения, следует иметь прибор, измеряющий  $p_i$  в зависимости от  $\epsilon_i$ . Сделать это в какой-то одной определенной частице верхнего уровня нельзя в силу неразличимости частиц  $m_i$ . Какие функции будут наблюдаемыми? Для выяснения этого перепишем систему (9) и (10), образовав простейшие линейные комбинации уравнений

$$\ln p_i \pm \ln m_i = \alpha \pm \beta + \gamma \epsilon_i \pm p_i =$$

$$= \alpha \pm \beta + \gamma \epsilon_i \pm e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}, \quad (13)$$

где мы воспользовались выражением (11). Таким образом, рассматриваться должны две функции —  $p_i m_i$  и  $p_i/m_i$ , которые являются решениями системы (9) и (10).

Для дальнейшего анализа нужно определить константы в (9) и (10). Определим константу  $\beta$ . Величина  $m_i$  изменяется от некоторого положительного значения  $e^{\beta+e^{\alpha}}$  при  $\epsilon_i=0$  до  $e^{\beta}$  при  $\epsilon_i\to\infty$ . При больших  $\epsilon_i$  ввиду очевидной отрицательности  $\gamma$ 

$$e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}} \simeq 1 + e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}$$
 (14)

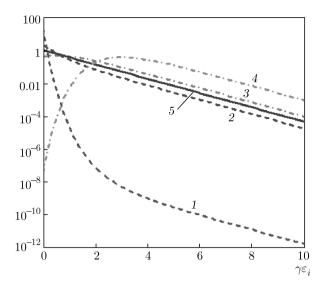
По смыслу задачи при больших энергиях частицы нижнего уровня вряд ли может быть много частиц верхнего уровня, содержащих такую энергичную частицу нижнего уровня, и естественным образом для задачи 1 можно положить, что  $\beta=0$  при  $\epsilon_i\to\infty$ , и  $m_i$  стремится к 1 при  $\epsilon_i\to\infty$ , т. е.  $\beta=0$ .

Очевидно, что функция  $p_i m_i$  потенциально должна наблюдаться, поскольку она описывает распределение числа частиц (1). Эта функция значительно отличается от  $p_i$  (см. рис. 1, определения функций 1—4 на этом рисунке см. ниже):

$$p_i m_i = e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}. (15)$$

Нормированная функция этого распределения

$$(p_i m_i)_{norm} = |\gamma| \frac{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}}{e^{e^{\alpha}} - 1}, \tag{16}$$



**Рис. 1.** Нормированные функции распределения  $p_im_i$  (штриховые кривые 1 и 2) и  $p_i/m_i$  (штрихпунктирные кривые 3 и 4) при различных параметрах нормировки  $\alpha$  (для кривых 1 и 4  $\alpha=3$ , для кривых 2 и 3  $\alpha=0.5$ , принято  $|\gamma|=1$ ), а также  $p_i=|\gamma|e^{\gamma\epsilon_i}$  (сплошная прямая 5). Полулогарифмический масштаб

для  $\alpha/|\gamma| = 0.5, 3$  и кривых 1, 2 приведена на рис. 1 в виде штриховых кривых. При увеличении  $\alpha/|\gamma|$ , т. е. например при уменьшении температуры при постоянном  $\alpha$ , значение функции (16) в нуле по сравнению с прямой 5 резко возрастает, а асимптотическое при умеренных и больших  $\epsilon_i$  — очень сильно падает (см. рис. 1). Таким образом, распределение  $p_i m_i$  (или  $(p_i m_i)_{norm}$ ) описывает, по-видимому, конденсацию частиц нижнего уровня при малых энергиях, которая оказывается очень значительной при низких эффективных температурах (далее эффективную температуру будем именовать температурой для краткости). Наблюдаемость этой функции лучше всего реализуется в многочастичных эффектах типа фазовых переходов, когда «все» частицы (верхнего уровня) участвуют в процессе. Здесь ситуация не зависит качественно от величины α. Следует, тем не менее, обратить внимание на значительное уменьшение  $p_i m_i$  при умеренных значениях энергии в сравнении с функцией  $p_i$  (на несколько порядков) уже при умеренных  $\alpha$ . Для восстановления истинного распределения  $p_i$  по  $p_i m_i$  и  $p_i/m_i$  следует прибегнуть к процедуре мультипликативного среднего (среднего геометрического):  $p_i = \sqrt{(p_i m_i)(p_i/m_i)}$ , что относительно несложно может быть реализовано в том числе экспериментально.

Вторая функция, являющаяся решением (13) — функция  $p_i/m_i$  — это распределение  $p_i$  в расчете на одну частицу верхнего уровня из набора  $m_i$ , она также представлена на рис. 1. Условия ее наблюдения очевидно отличаются от  $p_im_i$ . По-видимому, наиболее близкими по смыслу будут одночастичные измерения энергетических спектров (в широком смысле спектроскопические наблюдения).

Рассмотрим распределение частиц нижнего уровня по энергиям в «среднем» на одну частицу верхнего уровня  $p_i/m_i$ :

$$\frac{p_i}{m_i} = e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} e^{-e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}. (17)$$

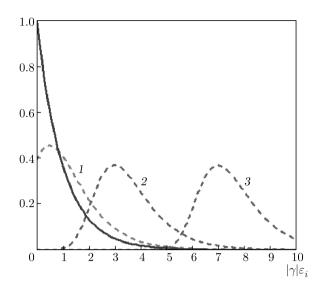
Здесь очевидно, что  $\gamma$  имеет смысл некоторой «обратной температуры» системы; нормировка на 1 распределения (17) дает множитель  $|\gamma|/(1-e^{-e^{\alpha}})$ , что уже при умеренном и тем более большом  $\alpha$  практически совпадает с  $|\gamma|$ . Функция (17) достигает максимума при  $\epsilon_i = \alpha/|\gamma|$ , а поскольку  $\alpha$  является лагранжевым множителем при полном числе частиц (1), модельный «физический» смысл  $\alpha$  (а точнее,  $\alpha/|\gamma|$ ) может состоять в том, что это химический потенциал частиц нижнего уровня  $\mu$ , а  $\alpha = |\gamma|\mu$ . Заметим, что плотность вероятности (17) совпадает с плотностью вероятности распределения Гумбеля (типа I) [7].

Если продвинуться к физическим приложениям рассматриваемой задачи 1, то, по-видимому, функции распределения (15) и (17) (а также нормированные функции распределения и функции распределения, возникающие в Задаче 2) следует понимать как распределение Гиббса (так как везде наличествует гиббсов фактор  $e^{\gamma \epsilon_i}$ ), возникающее в системах с определенным взаимодействием — отграничением, неразличимостью частиц всех уровней и связанной с этим иерархией. Такое взаимодействие приводит к появлению дополнительного фактора в (15) и (17), а также в функциях распределения, возникающих в Задаче 2. Этот фактор может быть отнесен на соответствующий термодинамический потенциал (см. [1,2])<sup>4</sup>).

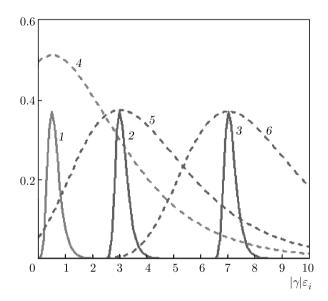
Для удобства расчетов приведем нормированное на 1 распределение  $p_i/m_i$ :

$$\left(\frac{p_i}{m_i}\right)_{norm} = \frac{|\gamma|}{1 - e^{-e^{\alpha}}} \frac{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}{e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}}.$$
(18)

<sup>4)</sup> Прозрачный способ получения функций распределений в зависимости от определенного потенциала взаимодействия частиц, не такой, как в предлагаемой статье, рассмотрен, например, в работах [8,9].



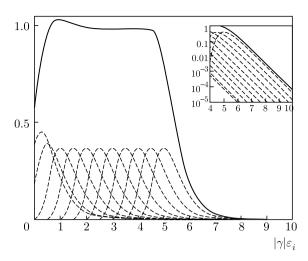
**Рис. 2.** Нормированные на 1 функции от  $\epsilon_i$  плотности вероятности нормированного распределения  $(p_i/m_i)_{norm}$  (18) при  $\alpha=0.5,3,7$  (штриховые кривые 1–3 соответственно). Сплошная кривая — распределение  $|\gamma|e^{(\gamma\epsilon_i)}$ . Равномерный масштаб  $|\gamma|$  принята равной 1



**Рис. 3.** Нормированные на 1 функции от  $\epsilon_i$  плотности вероятности нормированного распределения  $(p_i/m_i)_{norm}$  (18) при  $\alpha=0.5,3,7$ . Для штриховых кривых 1–3  $|\gamma|=0.5$ , для сплошных кривых 4–6  $|\gamma|=5$ . Равномерный масштаб

На рис. 2 приведена функция (18) для нескольких значений  $\alpha$ . Вместе с возрастанием  $\alpha$  (кривые 1–3 соответственно) нормировочный множитель в (18) стремится к 1, и распределение  $(p_i/m_i)_{norm}$  просто транслируется вдоль оси абсцисс в неизменном виде.

Зависимость (18) от коэффициента  $|\gamma|$ , т.е. от некоторой эффективной температуры, представле-



**Рис. 4.** Функции  $(p_i/m_i)_{norm}$  (штриховые кривые) с  $\alpha$  от 0.5 до 5 (через 0.5), а также сплошная кривая, представляющая сумму всех этих  $(p_i/m_i)_{norm}$ . На вставке в полулогарифмическом масштабе приведены значения этих функций для больших аргументов — видна экспоненциальная асимптотика суммарной функции. Принято  $|\gamma|=1$ 

на на рис. 3. Видно значительное «сужение» максимумов (18) при увеличении  $|\gamma|$ , т. е. при уменьшении эффективной температуры. Рисунки 2 и 3 показывают, что распределение (17) (и (18)) имеет выраженный максимум распределения, совпадающий с величиной химического потенциала  $\epsilon_i = \mu = \alpha/|\gamma|$ . Это означает, что при измерениях «на одну частицу» верхнего уровня частицы нижнего уровня могут присоединяться к (или отсоединяться от) частице верхнего уровня только в энергетические состояния, близкие  $\mu$ . При понижении температуры ширина функции распределения уменьшается, и при малых температурах функция распределения может стать настолько узкой, что в это состояние «поместится» уже не более одной частицы нижнего уровня.

Закономерен вопрос, в какие состояния уходят остальные частицы нижнего уровня. На рис. 4 изображена модельная ситуация, где присутствует ансамбль частиц верхнего уровня с разными  $\alpha$  (разными химическими потенциалами для частиц нижнего уровня).

В этом случае остальные частицы нижнего уровня разместятся в энергетических состояниях соответствующих распределений (штриховые кривые на рис. 4) с одинаковыми максимумами. При плотном распределении с  $\alpha_{min} < \alpha < \alpha_{max}$  ( $\alpha_{min}$  может быть и нулем) суммарное распределение (сплошная кривая на рис. 4) по энергии в этом случае будет выглядеть как постоянное до  $\epsilon < \alpha_{max}/|\gamma|$ , а затем экспоненциально убывать (см. врезку рис. 4).

Такое суммарное распределение будет практически полностью совпадать с распределением Ферми с  $\mu = \mu_{max} = \alpha_{max}/|\gamma|$ . Этот результат наиболее очевидно следует трактовать как проявление некоторого эффективного принципа Паули.

Для этого же вполне можно ограничиться, не прибегая к сложным построениям рис. 4, тем соображением, что при одночастичных измерениях состояния системы частиц всегда будет детектироваться некоторая энергия частицы нижнего уровня, причем при малых температурах частиц эта энергия может быть единственной — остальные значения могут просто не попасть «внутрь» кривых 1–3 рис. 3 в силу расстояния между уровнями дискретного энергетического спектра. Таким образом, одному энергетическому состоянию будет соответствовать только одна частица: это также можно истолковать как осуществление эффективного принципа Паули.

#### 3. ЗАДАЧА 2

Как указывалось во Введении, возможна постановка задачи о распределении по энергиям частиц нижнего уровня, содержащихся в наборе частиц среднего уровня, которые, в свою очередь, содержатся в наборе частиц верхнего уровня. На всех трех уровнях частицы являются неразличимыми $^{5}$ ). Обозначим количество частиц нижнего уровня, содержащихся в частице среднего уровня, через  $p_i$ , количество частиц среднего уровня с таким количеством частиц нижнего уровня в частицах среднего уровня  $m_i$ , и количество частиц верхнего уровня, в которые сложены частицы среднего уровня в количестве  $m_i$ , через  $t_i$ . В этом случае полное количество расстановок частиц нижнего уровня по всем частицам среднего уровня, и последних по частицам верхнего уровня запишется как

$$W_{21} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{n} (p_i!)^{m_i t_i} \prod_{i=1}^{n} (m_i!)^{t_i} \prod_{i=1}^{n} (t_i!)}.$$
 (19)

Здесь n — снова полное число различных расстановок частиц нижнего уровня по частицам среднего уровня, а тех — по частицам верхнего уровня. Есте-

ственно определяются теперь общее количество частиц нижнего уровня

$$N = \sum_{i=1}^{n} m_i p_i t_i, \tag{20}$$

общее количество частиц среднего уровня

$$M = \sum_{i=1}^{n} m_i t_i \tag{21}$$

и общее количество частиц верхнего уровня

$$T = \sum_{i=1}^{n} t_i. \tag{22}$$

Выражение для полной энергии соответствует

$$E = \sum_{i=1}^{n} m_i p_i t_i \epsilon_i. \tag{23}$$

По общему правилу образуем логарифм от этого количества расстановок

$$\ln W_{21} = \ln N! - \sum_{i=1}^{n} m_i t_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^{n} t_i \ln(m_i!) - \sum_{i=1}^{n} \ln(t_i!). \quad (24)$$

Соответственно, варьироваться должна величина (24) с наложенными связями (20)–(23) с необходимыми множителями Лагранжа  $\alpha, \beta, \gamma, \Delta$ , аналогичная (7):

$$\ln W_2 = \ln W_{21} + \alpha N + \beta M + \gamma E + \Delta T. \tag{25}$$

Переменные варьирования теперь  $p_i$ ,  $m_i$ ,  $t_i$ . При варьировании по  $p_i$  получаем первое уравнение, точно совпадающее с уравнением (7) (и с решением задачи 0):

$$ln p_i = \alpha + \gamma \epsilon_i.$$
(26)

Варьируя (25) по  $m_i$  и используя (26), имеем уравнение, точно совпадающее с уравнением (10):

$$ln m_i = \beta + p_i.$$
(27)

Наконец, варьируя (25) по  $t_i$  и используя (26) и (27), имеем третье уравнение задачи 2:

$$ln t_i = \Delta + m_i.$$
(28)

Сделаем некоторые замечания относительно величин  $\beta$  и  $\Delta$ . Последняя входит во все выражения

<sup>&</sup>lt;sup>5)</sup> На языке обобщенной «задачи о сушке грибов» это будет подсчет распределения длин связок грибов, которые, в свою очередь, объединены в пучки разной величины. Неразличимыми теперь являются не только связки, но и пучки, не говоря уже о самих грибах.

как простой множитель, т.е. нужна только в случае какой-то специальной нормировки, в первом же приближении ее можно считать равной нулю, хотя естественным было бы  $\Delta=-1$ , тогда  $t_i$  стремилась бы к 1 при  $\epsilon_i \to \infty$  (см. выше).

Величину  $\beta$  в задаче 2 в первом приближении можно считать совпадающей с  $\beta$  из задачи 1, т.е. тоже равной нулю. Анализ показывает, что неравная нулю  $\beta$  меняет вид распределений задачи 2, но только количественно. Она может описывать определенное число частиц нижнего уровня в частице среднего (верхнего в задаче 1) уровня, существующее при больших энергиях. Более полное выяснение физического смысла  $\beta \neq 0$  есть предмет отдельной работы.

Создадим, как в задаче 1, простейшую линейную комбинацию уравнений (26)–(28) и воспользуемся их решениями. Получим

$$\ln p_i \pm \ln m_i \pm \ln t_i = \alpha \pm \beta \pm \Delta + \gamma \epsilon_i \pm \pm e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} \pm e^{\beta + e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}.$$
 (29)

По аналогии с задачей 1, решениями (29) и функциями распределения теперь являются выражения  $p_i/m_i t_i$ ,  $p_i m_i/t_i$ ,  $p_i m_i t_i$ , а также  $p_i t_i/m_i$ . Третья функция описывает рассмотренные многочастичные измерения с эффектом конденсации частиц при малых энергиях, еще более сильной, чем аналогичная конденсация в задаче 1. Первые же два соотношения описывают некоторые, измеренные либо на одну частицу среднего уровня, либо на одну частицу верхнего уровня, функции, имеющие выраженный максимум. Теперь, однако, этот максимум не совпадает с величиной  $\alpha$ , а превышает ее: для  $p_i/m_i t_i$ примерно на 1 в условиях рис. 5 (соответствует приметно одной единице эффективной температуры), и на 0.2 (соответствует приметно 0.2 единиц эффективной температуры) для  $p_i m_i / t_i$ .

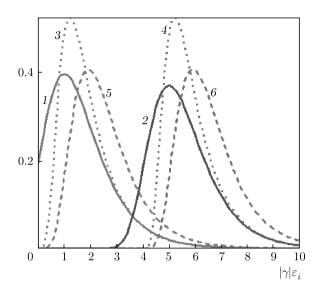
Нормированные распределения суть

$$\left(\frac{p_i m_i}{t_i}\right)_{norm} = \frac{|\gamma|}{1/e - e^{-e^{\epsilon \alpha}}} \frac{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}}{e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}} \tag{30}$$

И

$$\left(\frac{p_i}{m_i t_i}\right)_{norm} = \frac{|\gamma|}{1/e - E_1(e^{e^{\alpha}}) + E_1(1) - e^{e^{\alpha}} e^{-e^{\alpha}}} \times \frac{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i} e^{-e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}}{e^{e^{\alpha + \gamma \epsilon_i}}}, \quad (31)$$

где  $E_1(x)$  — интегральная показательная функция, изображены на рис. 5 (кривые 3 и 4 для (30) и 5

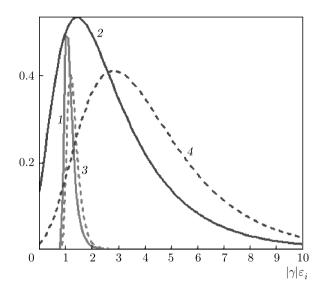


**Рис. 5.** Нормированные на 1 функции от  $\epsilon_i$  плотности вероятности распределения  $p_i/m_it_i$  (кривая 5 для  $\alpha=1$  и кривая 6 для  $\alpha=5$ ),  $p_im_i/t_i$  (кривая 3 для  $\alpha=1$  и кривая 4 для  $\alpha=5$ ). Для сравнения приведены распределения (18) (кривая 1 для  $\alpha=1$  и кривая 2 для  $\alpha=5$ ). Равномерный масштаб,  $|\gamma|$  принята равной 1

и 6 для (31)). Так же, как и для задачи 1, функции (30) и (31) являются некоторыми измеренными на одну частицу верхнего уровня «средними» функциями. На рис. 6 представлено поведение нормированных распределений (30), (31) в зависимости от эффективной температуры, кривые 1 и 3 — для сравнительно более малой температуры  $|\gamma| = 5$ , кривые 2 и 4 — для большей  $|\gamma| = 0.5$ . Видно превышение абсцисс максимумов распределений (30), (31) над величиной химического потенциала. Истинная функция распределения  $p_i$  опять выражается через среднее геометрическое наблюдаемых  $p_i = \sqrt[4]{(p_i/m_it_i)(p_im_it_i)(p_im_it_i/m_i)}$ .

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты задач 1 и 2 можно интерпретировать как зависящие от способа наблюдения. Все наблюдения в спектроскопических экспериментах (не обязательно оптических, вообще большинства измерений спектров энергии) дают некоторые отнесенные к одной частице верхнего уровня функции распределения. Основным результатом задачи 1 является обнаружение максимума распределения частиц по энергиям при одночастичном наблюдении. В самом простом подходе к описанию этот максимум совпадает с химическим потенциалом частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня — энергией при-



**Рис. 6.** Нормированные на 1 функции от  $\epsilon_i$  плотности вероятности распределения  $(p_im_i/t_i)_{norm}$  (30) при  $\alpha=1$ , для сплошной кривой 1  $|\gamma|=5$ , для сплошной кривой 2  $|\gamma|=0.5$ . Вероятности нормированного распределения  $(p_i/m_it_i)_{norm}$  (31) при  $\alpha=1$ , для штриховой кривой 3  $|\gamma|=5$ , для штриховой кривой 4  $|\gamma|=0.5$ 

соединения/отсоединения частицы нижнего уровня от остальных таких частиц в частице верхнего уровня. При этом простом подходе все частицы нижнего уровня с энергиями меньше химического потенциала должны интерпретироваться как связанные. Отношение доли связанных состояний к несвязанным состояниям в общем количестве всех состояний частиц нижнего уровня описывается соотношением  $(1-e^{1-e^{\alpha}})/(e-1)$ .

Как уже указывалось, при малых эффективных температурах функция плотности вероятности найти частицу нижнего уровня в одночастичном измерении в состоянии  $\epsilon_i$  имеет очень узкий максимум (см. рис. 3). Это значит, что при определенной малой (и еще меньшей) температуре это состояние занимает не более одной частицы. Подобный результат может быть истолкован как реализация эффективного принципа Паули — когда одно энергетическое состояние занимает одна частица определенного сорта, соответствующая знаку «-» в левой части (13). Некоторая модификация задачи 1, в которой возникает набор функций  $p_i/m_i$  с различными  $\alpha$ , приводит при суммировании этих функций к функции, практически точно совпадающей с распределением Ферми. Это еще одна возможная реализация эффективного принципа Паули, появляющаяся в результате решения задачи 1.

Поведение другой наблюдаемой функции задачи  $1, p_i m_i$ , также определяется температурой. Уже при умеренных значениях  $\alpha \simeq 6$  доля частиц нормированного распределения (13) с энергиями большими соответствующего значения химического потенциала  $10^{-180}$ , т.е. таких (свободных?) частиц, весьма вероятно нет во всей Вселенной. Вообще наивная интерпретация результатов задачи 1 с двумя функциями распределения,  $p_i m_i$  и  $p_i/m_i$ , состоит в том, что мы имеем дело с частицами двух сортов — псевдобозонов для первой функции (так как она дает конденсацию в низкоэнергетических состояниях при малой температуре), и псевдофермионов (так как при малых температурах одно энергетическое состояние занимает одна такая частица).

Такая же интерпретация результатов задачи 2 приводит к 4 сортам частиц. Псевдобозоны с еще более выраженным эффектом конденсации описываются функцией  $p_i m_i t_i$ , частиц с энергиями большими химического потенциала здесь нет вовсе. Похожие результаты дает функция  $p_i t_i/m_i$ , но эффект конденсации в ней выражен меньше. Напротив, частицы верхнего уровня, описываемые функциями  $p_i/m_i t_i$ ,  $p_i m_i/t_i$ , в основном содержат частицы нижнего уровня в энергетических состояниях выше химического потенциала. Простейшая интерпретация этого — они не связаны в частицах среднего уровня, но связаны и «обобщены» в частицах верхнего уровня.

Несомненно, распределение по энергетическим уровням полной системы, объединяющей частицы всех уровней, подчиняется распределению Гиббса. Однако, как отмечалось выше, эти вероятности совсем не те величины, которые наблюдаются в реальных экспериментах. Наблюдаемые характеристики системы — дипольный момент, магнитный момент, момент инерции или, возможно, в ряде случаев, частота излучения — как раз и определяются распределениями высшего уровня, рассмотренными в данной работе. Очевидно, что это коллективные характеристики, и говорить о «чистых» бозонах или фермионах не следует. С другой стороны, фермиподобные функции распределения возникают в статистической физике вполне классических систем с большим числом локальных минимумов энергии, самая известная — это так называемая КРХ (струна на случайном рельефе), сводящаяся к уравнению Бюргерса со случайным шумом, в которой возникает нечто вроде ударных волн в пространстве вероятностей. Проследить за явным возникновением такой функции можно в работе [10].

**Благодарности.** Автор признателен И. В. Колоколову за полезное обсуждение результатов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- А. Исихара, Статистическая физика, Мир, Москва (1973).
- **2.** Ю. Б. Румер, М. С. Рывкин, *Термодинами-ка*, *статистическая физика и кинетика*, 2-е изд., Изд-во Новосибирского университета, Новосибирск (2000).
- **3**. M. Yu. Romanovsky and W. Ebeling, Contrib. Plasma Phys. **46**, 260 (2006).

- P. Romanczuk, M. Baer, W. Ebeling et al., Eur. Phys. J. Special Topics 202, 1 (2012).
- 5. Н. Я. Виленкин, *Комбинаторика*, Наука, Москва (1969); Н. Я. Виленкин, *Популярная комбинаторика*, Наука, Москва (1975).
- **6.** R. P. Stanley, *Enumerative Combinatorics*, Vol. 1, Cambridge University Press (1997).
- 7. Э. Гумбель, Статистика экстремальных значений, Мир, Москва (1965).
- 8. M. Yu. Romanovsky, Physica A 265, 264 (1999).
- 9. M. Yu. Romanovsky, Physica A 287, 450 (2000).
- **10**. И. В. Колоколов, К. С. Турицын, ЖЭТФ **121**, 1390 (2002).

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ БЕНАРА – МАРАНГОНИ В ИСПАРЯЮЩИХСЯ ЛЕТУЧИХ КАПЛЯХ НА НАГРЕТОЙ ПОДЛОЖКЕ

 $A.\ A.\ \Gamma$ аврилина  $^{a,b},\ \mathcal{J}.\ \mathit{HO}.\ \mathsf{Бараш}$   $^{b^*}$ 

 $^a$  Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  $101000,\ Mocква,\ Poccus$ 

<sup>b</sup> Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> Поступила в редакцию 24 августа 2020 г., после переработки 14 сентября 2020 г. Принята к публикации 28 сентября 2020 г.

Изучаются нестационарные внутренние течения в лежащей на нагретой подложке капле капиллярного размера, испаряющейся в режиме пиннинга контактной линии. Проведено трехмерное моделирование внутренних течений в испаряющихся каплях этанола и силиконового масла. Показано, что для описания потоков Марангони необходимо учитывать диффузию паров в воздухе, теплопередачу во всех трех фазах и тепловое излучение. Уравнения были решены численно методом конечных элементов с использованием программного обеспечения ANSYS Fluent. В результате проведенных вычислений получено нестационарное поведение неустойчивостей Бенара – Марангони (БМ). На первом этапе появляется цветочная структура ячеек БМ вблизи контактной линии. Для меньших контактных углов ячейки увеличиваются и занимают центральную область поверхности капли. Полученные результаты тесно связаны с недавними экспериментальными и теоретическими исследованиями и помогают проанализировать и разрешить связанные с этим вопросы.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020152

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Вопросы испарения капель привлекли значительное внимание не только с теоретической точки зрения, но и в связи с развитием новых приложений, таких как образование структур на поверхностях, подготовка сверхчистых поверхностей, нанесение микроматриц молекул ДНК и РНК, кристаллография белков, сгорание капель топлива в двигателе, диагностика заболеваний, разработка современных методов печати для струйных принтеров, производство новых электронных и оптических устройств и др. [1–6].

Неоднородный тепломассоперенос при испарении капли имеет решающее влияние на кинетику испарения. В частности, он приводит к изменению распределения температуры вдоль поверхности капли и может вызывать термокапиллярную конвекцию в

капле из-за зависящего от температуры поверхностного натяжения. Осесимметричные потоки Марангони можно наблюдать при комнатной температуре и атмосферном давлении [7–10].

Термокапиллярный поток жидкости с нарушенной осевой симметрией может самопроизвольно возникать внутри сильно нагретой капли с интенсивным испарением и достаточно высокой скоростью жидкости. В нагретой капле неустойчивость Марангони, возникающая из-за неоднородного распределения температуры, может приводить к движениям жидкости, таким как продольные рулоны и гидротермальные волны (ГТВ), что было впервые продемонстрировано в [11] и подтверждено в многочисленных последующих исследованиях [12–19]. ГТВ — это распространяющиеся в жидкости периодические во времени волны, вызванные неустойчивостями в стационарной конвекции Марангони. ГТВ были первоначально предсказаны для жидкого слоя на твердой пластине Смитом и Дэвисом [20,21], а затем наблюдались в [22, 23]. Согласно Смиту и Дэви-

<sup>\*</sup> E-mail: barash@itp.ac.ru

су [20,21], возбуждение распространяется перпендикулярно градиенту повехностной температуры при малых числах Прандтля и в направлении против течения при больших числах Прандтля [20,21]. Для плоского слоя жидкости ГТВ и конвекция Бенара – Марангони (БМ) обычно происходят при качественно разных условиях. В то время как эффект БМ становится более выраженным с увеличением вертикального градиента температуры в плоских пленках, появление ГТВ связано с горизонтальным градиентом температуры (например, они могут возникать при боковом нагреве). В случае испарения лежащих капель конкуренция между ГТВ и конвекцией БМ более сложная.

Первоначально ГТВ в каплях были идентифицированы Сефианом и др. в 2008 г. [11] при исследовании испарения лежащих капель этанола, метанола, воды и флюоринерта FC-72. Позднее были опубликованы более подробные наблюдения ГТВ для капель этанола на четырех разных подложках с различной теплопроводностью [12]. ГТВ, движущиеся в азимутальном направлении, наблюдались для летучих капель этанола и метанола. Для FC-72 конвективные ячейки возникали около вершины капли и двигались к контактной линии. Было обнаружено, что количество волн возрастает с увеличением теплопроводности подложки и ее температуры и убывает с уменьшением высоты капли. В то же время гидротермальная неустойчивость в испаряющихся каплях воды не была обнаружена.

В работе [13] в каплях метанола, этанола и FC-72 на подложке из политетрафторэтилена выделены три стадии процесса испарения с термоконвективными неустойчивостями: нагрев капли (которая почти достигает температуры подложки), испарение с термоконвективными неустойчивостями (тепловой поток на этом этапе максимален) и испарение без термоконвективных структур (капля на этом этапе больше похожа на пленку). Основная фаза характеризуется наличием конвективных ячеек, а движение ячеек связано с разностью температур между нагретой подложкой и температурой окружающей среды. Временная эволюция ГТВ была также описана посредством одновременных наблюдений потоков тепла и жидкости в испаряющейся капле этанола на нагретой подложке [14]. Было продемонстрировано, что ГТВ, распространяющиеся в азимутальном направлении в капле этанола, имеют место как в условиях нормальной силы тяжести, так и в условиях микрогравитации, так что влияние гравитации на поведение ГТВ невелико [15].

Сефиан и др. [16] продемонстрировали, что ГТВ в каплях FC-72 представляют собой волны, которые распространяются по всему объему капли. Кроме того, в работе [16] было изучено влияние ГТВ на теплопередачу в твердой подложке и на пространственное распределение скорости испарения. Особый вид ГТВ был определен Карапецасом и др. в [17], где наблюдались трехмерные спиралевидные периодические во времени бегущие волны, организованные радиально и однородные по азимутальному углу. Ши и др. [24] определили критические числа Марангони для возникновения неустойчивости Марангони в лежащей на нагретой подложке капле с низкой летучестью с помощью серии расчетов трехмерного компьютерного моделирования.

Новые особенности рассматриваемой проблемы были выявлены Семеновым и др. [25], они обнаружили, что ячеистые структуры, найденные в капле с большим числом Прандтля, представляют собой ячеистую структуру БМ, а не ГТВ. Авторы наблюдали неустойчивость Марангони в капле этанола капиллярного размера на нагретой подложке с высокой теплопроводностью. Они также выполнили численное моделирование при помощи односторонней модели, описанной в [26], где учтены, в частности, нестационарное испарение в диффузионной модели для неизотермической лежащей капли в режиме пиннинга контактной линии и стефановское течение в газе. Структуры, полученные при помощи решения уравнения теплопроводности в капле и проведения численного моделирования, были в хорошем согласии с данными эксперимента для контактного угла  $\theta \approx 29.3^{\circ}$ . На первом этапе появлялся тороидальный рулон, примыкающий к контактной линии; позже он дестабилизировался и распадался на несколько трехмерных нестационарных ячеек БМ, занимающих всю каплю. На третьей стадии ячейки БМ сносились к контактной линии, где силы Марангони сильнее, и наблюдалась цветочная структура примерно с 15 ячейками БМ вдоль окружности, что соответствует пространственному периоду, примерно в два раза превышающему локальную толщину жидкости. Авторы обнаружили, что количество ячеек БМ увеличивается с уменьшением высоты капли.

Взаимодействие конвективных ячеек БМ и ГТВ наблюдалось в недавней работе [27] в лежащей летучей капле силиконового масла на медной подложке в режиме пиннинга контактной линии в широком диапазоне температур подложки. Когда температура подложки была выше комнатной, наблюдалась квазистационарная конвективная ячеистая структу-

ра БМ, переходящая в осциллирующее состояние по мере испарения. Когда подложка была холоднее окружающего воздуха, осциллирующие ячейки БМ наблюдались, только когда температура подложки превышала 10.6 °C. Размер ячеек становился больше, а их количество уменьшалось, когда температура подложки была выше температуры окружающего газа. Для температуры подложки, превышающей 14.3 °C, наблюдается сосуществование распространяющихся гидротермальных волн и колебательной конвекции БМ. В статье приведены критические значения краевого угла, при которых происходит переход между различными типами конвекции.

В частности, авторы [27] рассмотрели случай, когда температура подложки на 7.81 °C выше температуры окружающей среды. В этом случае на первом этапе появляется цветочная структура ячеек БМ вблизи контактной линии. С уменьшением контактного угла ячейки увеличивались в размерах и занимали центральную область поверхности капли (рис. 4 в [27]).

Качественно похожие цветочные структуры ячеек БМ вблизи контактной линии на промежуточной стадии испарения капли наблюдались в обеих публикациях [25, 27]. В то же время пространственные структуры ячеек БМ при достаточно малых углах смачивания, которые наблюдались в [27] и численно получены в [25], существенно различаются. Ожидается сходство результатов, полученных в [25,27], поскольку параметры капель, рассматриваемые в двух статьях, близки друг к другу. Также схожи релевантные физические свойства 0.65 сСт силиконового масла и этанола, и в обеих работах используются нагретые подложки с высокой теплопроводностью и близкими значениями температуры. Поэтому удивительно, что результаты на поздней стадии испарения капли сильно различаются. Целью настоящей работы является анализ поведения нестационарных ячеек БМ в лежащих летучих каплях на нагретых подложках, включая стадию сравнительно малых углов смачивания. Также представляет интерес определение основных физических механизмов, которые ответственны за исследуемое поведение и должны учитываться при моделировании.

Мы теоретически исследовали структуры неустойчивости Марангони в испаряющихся лежащих каплях этанола и силиконового масла для параметров, соответствующих каждому из экспериментов [25, 27]. На основе трехмерного численного моделирования описаны потоки жидкости и геометрические характеристики структур БМ в капле. Разработана математическая мо-

дель, которая учитывает теплопередачу во всех трех фазах, гидродинамику, диффузию паров в воздухе, стефановское течение в газе и тепловое излучение. С помощью программного комплекса конечно-элементного анализа ANSYS Fluent выполнено трехмерное компьютерное моделирование и получены нестационарные распределения температуры и поля скоростей в капле. В результате расчетов мы получили как цветочную структуру ячеек ВМ около контактной линии для достаточно больших контактных углов, так и структуру, в которой более крупные ячейки ВМ занимают границу раздела жидкость—газ для меньших контактных углов.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 описываются математическая модель и метод численного решения. Значимость различных физических эффектов для рассматриваемых задач также анализируется в разд. 2. В разд. 3 представлены результаты и обсуждение. Раздел 4 содержит заключение.

#### 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим трехмерную нестационарную задачу для осесимметричной капли, лежащей на нагретой твердой подложке. Будем использовать приближение поверхности капли сферической чашей. Это приближение допустимо при условии  $\mathrm{Bo} \ll 1$ , т. е. когда влияние гравитации на форму поверхности мало. Здесь  $\mathrm{Bo} = \rho g h_0 R/(2\sigma \sin\theta)$  — число Бонда,  $h_0$  — высота капли. Мы используем обозначения из таблицы.

#### 2.1. Диффузия паров в воздухе

Динамика концентрации пара u в окружающей атмосфере описывается уравнением диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u. \tag{1}$$

Используются следующие граничные условия:  $u=u_s$  на поверхности капли, u=0 вдали от капли,  $\partial u/\partial r=0$  и  $\partial u/\partial z=0$  на осях соответственно r=0 и z=0.

Семенов и др. выводят в [26] и используют в [25] аналитические уравнения для диффузионной модели нестационарного испарения лежащих капель, которые согласуются с численными результатами из [28]. Однако эти нестационарные эффекты малы на временных масштабах, превышающих время, необходимое броуновской частице для прохождения

Обозначение	Величина	Единица	Этанол	0.65 сСт	
Ооозначение	Беличина	измерения	Этанол	силиконовое масло	
R	Радиус контактной линии	MM	2.95	2.09	
$\theta$	Контактный угол	градусы	$29.2^{\circ}, 20^{\circ}, 10^{\circ}$	$28.39^{\circ}, 20.49^{\circ}, 17.18^{\circ}$	
$T_s$	Температура подложки	K	307.05	302.69	
$T_a$	Температура окружающего	K	297.55	294.88	
	воздуха				
$\rho$	Плотность	${ m K}\Gamma/{ m M}^3$	772.24	760	
$c_p$	Удельная теплоемкость	Дж $/(\kappa \Gamma \cdot K)$	2602.3	2000	
k	Теплопроводность	$\mathrm{Br/(M{\cdot}K)}$	0.14	0.1	
$\kappa = k/(\rho c_p)$	Температуропроводность	$\mathrm{m}^2/\mathrm{c}$	$6.97 \cdot 10^{-8}$	$6.58 \cdot 10^{-8}$	
$k_{air}$	Теплопроводность воздуха	$\mathrm{Br/(M{\cdot}K)}$	0.026	0.026	
$\eta$	Динамическая вязкость	$\kappa_{\Gamma}/(\mathrm{M\cdot c})$	$1.095 \cdot 10^{-3}$	$4.94 \cdot 10^{-4}$	
$\sigma$	Поверхностное натяжение	$_{ m MH/M}$	$2.062 \cdot 10^{-2}$	$1.54 \cdot 10^{-2}$	
$\sigma_T$	Производная поверхностного	$\mathrm{H/(M\cdot K)}$	$-8.979 \cdot 10^{-5}$	$-8 \cdot 10^{-5}$	
	натяжения по температуре				
L	Удельная теплота	Дж/кг	918600	223000	
	парообразования				
D	Коэффициент диффузии	$\mathrm{m}^2/\mathrm{c}$	$11.81 \cdot 10^{-6}$	$5.6\cdot10^{-6}$	
	паров в воздухе				
$u_s$	Плотность насыщенных паров	${ m K}\Gamma/{ m M}^3$	0.219664	0.469145	
$\varepsilon$	Коэффициент излучения		0.92	0.91	

Таблица. Обозначения и значения параметров, используемые в вычислениях

характерной длины R, т. е. при  $t\gtrsim R^2/D\approx 0.7$  с, для рассматриваемых задач. Поэтому кинетику испарения можно рассматривать как стационарный процесс и использовать квазистационарное приближение

$$\Delta u = 0 \tag{2}$$

с теми же граничными условиями вместе с приближением сферической чаши.

Последняя задача математически эквивалентна задаче об электростатическом потенциале заряженного проводника, форма которого определяется двумя пересекающимися сферами. Такая задача была решена аналитически в [29] в тороидальных координатах. На основе этого аналитическое решение уравнения (2) с указанными выше граничными условиями, которое описывает плотность неоднородного потока испарения J(r) с поверхности испаряющейся капли, было представлено в работе [30] в виде

$$J(r) = |D\nabla u| = \frac{Du_s}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta)^{3/2} \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\cos \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r) + \cos \theta) \right) \times \frac{1}{R} \left( \frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(r)$$

$$\times \int_{0}^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(\theta\tau)}{\operatorname{ch}(\pi\tau)} \tau \operatorname{th}((\pi-\theta)\tau) P_{-1/2+i\tau}(x(r)) d\tau \right), \quad (3)$$

где

$$x(r) = \frac{r^2 \cos \theta / R^2 + \sqrt{1 - r^2 \sin^2 \theta / R^2}}{1 - r^2 / R^2}$$
(4)

и  $P_{-1/2+i\tau}(x)$  — полином Лежандра. Выражение (3) удобно аппроксимировать как [30,31]

$$J(r) = J_0(\theta) \left( 1 - \frac{r^2}{R^2} \right)^{-\lambda(\theta)}, \tag{5}$$

где  $\lambda(\theta) = 1/2 - \theta/\pi$ . Коэффициент  $J_0(\theta)$  в (5) может быть найден следующим образом:

$$\frac{J_0(\theta)}{1 - \Lambda(\theta)} = J_0(\pi/2)(0.27\theta^2 + 1.3),\tag{6}$$

$$\Lambda(\theta) = 0.22(\theta - \pi/4)^2 + 0.36,\tag{7}$$

$$J_0(\pi/2) = \frac{Du_s}{R},\tag{8}$$

где  $u_s$  — плотность насыщенного пара на свободной поверхности капли. В работе [31] численно найдено, что уравнения (5)–(8) представляют собой весьма точную аппроксимацию решения уравнения (2) с указанными выше граничными условиями в приближении сферической чаши. Это было подтверждено для широкого диапазона углов смачивания. При этом точность аппроксимации не зависит от таких параметров, как D и R. По этой причине мы используем уравнения (5)–(8) при моделировании.

Давление насыщенного пара определяется уравнением Антуана (с  $p_s$  [Па] и T [K]):

$$\log_{10} p_s(T) = A - \frac{B}{C+T},\tag{9}$$

где A,B,C — эмпирические константы. Мы используем  $A=10.247,\,B=1599.039,\,C=-46.391$  для этанола [32] и  $A=9.418,\,B=1509,\,C=-31.55$  для 0.65 сСт силиконового масла [18].

Концентрация пара  $u_s$  на поверхности капли рассчитывается по закону идеального газа и определяется по формуле

$$u_s(T) = \frac{Mp_s(T)}{\bar{R}T},\tag{10}$$

где  $\bar{R}$  — универсальная газовая постоянная, M — молярная масса пара.

Из выражения (5) следует, что потеря массы в результате испарения происходит неравномерно вдоль свободной поверхности жидкого слоя, значительно увеличиваясь вблизи закрепленной контактной линии. Неоднородный поток массы во время испарения и соответствующая теплопередача изменяют распределение температуры вдоль поверхности капли и вызывают силы Марангони из-за зависящего от температуры поверхностного натяжения. Эти силы приводят к термокапиллярной конвекции внутри капли.

#### 2.2. Стефановское течение

Поскольку концентрация насыщенного пара не является величиной, намного меньшей плотности воздуха (см. таблицу), естественно учесть в рассматриваемой задаче вклад стефановского течения в газовой фазе [33].

В результате конвективного массопереноса в газе скорость испарения увеличивается следующим образом [26]:

$$\tilde{J}(r) = \frac{u_g}{u_s} \ln \left( \frac{u_g}{u_q - u_s} \right) J(r), \tag{11}$$

где  $u_g = M_g p_g/(\bar{R}T), \ p_g$  — атмосферное давление,  $M_g = M_{air}(1-X_v) + M_v X_v$  — молярная масса газа, находящегося рядом со свободной поверхностью капли,  $M_{air}$  и  $M_v$  — молярные массы воздуха и пара,  $X_v = u_s \bar{R}T/(M_v p_g)$  — мольная доля пара. Здесь температура поверхности T является функцией r.

Отсюда следует, что стефановское течение в газе увеличивает скорость испарения примерно на  $10\,\%$  и  $18\,\%$  для капель этанола и 0.65 сСт силиконового масла соответственно.

Результаты, приведенные ниже в разд. 3, не учитывают стефановское течение. Однако наши предварительные численные расчеты для капли 0.65 сСт силиконового масла с параметрами, указанными в таблице, и краевым углом 20.49° показывают, что влияние стефановского течения на распределение температуры на поверхности капли весьма мало.

#### 2.3. Гидродинамика

Основными уравнениями гидродинамики внутри капли являются уравнения Навье—Стокса и уравнение непрерывности для несжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \text{ grad } p = \nu \Delta \mathbf{v}, \tag{12}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \tag{13}$$

Здесь  $\nu = \eta/\rho$  — кинематическая вязкость,  $\mathbf{v}$  — скорость жидкости, p — давление.

Граничные условия для уравнений (12), (13) включают условие прилипания  $\mathbf{v}=0$  на границе раздела подложка—жидкость и условие на границе раздела жидкость—газ, включающее силы Мараногони, связанные с температурной зависимостью поверхностного натяжения. Вообще говоря, последнее граничное условие можно выразить как [34]

$$\left(p - p_v - \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)\right) n_i = 
= \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right) n_k - \frac{\partial \sigma}{\partial x_i}, \quad (14)$$

где единичный вектор  $\mathbf{n}$  направлен в сторону пара вдоль нормали к поверхности. Взяв тангенциальную составляющую этого уравнения, находим

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \eta \left( \frac{\partial v_{\tau}}{\partial n} + \frac{\partial v_{n}}{\partial \tau} - v_{\tau} \frac{d\varphi}{d\tau} \right). \tag{15}$$

Здесь  $d\sigma/d\tau = \sigma_T dT/d\tau$ ,  $\tau_i$  — компоненты единичного вектора  $\tau$ , тангенциального к поверхности,  $\varphi$  —

угол между нормалью к поверхности капли и вертикальной осью. Отметим, что пакет моделирования ANSYS Fluent позволяет напрямую задавать напряжение Марангони на свободной поверхности капли, поэтому уравнение (15) уже реализовано в программном обеспечении, и пользователю не нужно его задавать.

#### 2.4. Теплопередача в капле

Распределение температуры вычисляется с помощью уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \kappa \Delta T. \tag{16}$$

Теплопроводность внутри подложки определяется уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \Delta T. \tag{17}$$

Граничные условия для уравнения теплопроводности включают изотермическое граничное условие на нижней границе подложки  $T=T_s$ , адиабатическое граничное условие на границе раздела подложка—газ  $\partial T_s/\partial n=0$  и непрерывность теплового потока на границе раздела подложка—жидкость  $k_s\partial T_s/\partial z=k\partial T_L/\partial z$ . Здесь  $T_L$  и  $T_s$  соответствуют температуре жидкости и температуре подложки, k и  $k_s$  — теплопроводности жидкости и подложки соответственно.

Согласно экспериментальным условиям [25, 27], в расчетах в настоящей работе используется подложка с высокой теплопроводностью. В этом случае граничные условия могут быть записаны просто как  $T=T_s$  на границе раздела подложка-жидкость.

Граничное условие для потока тепла на поверхности капли имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial n} = -\frac{Q_0(r)}{h},\tag{18}$$

где

$$Q_0(r) = -k_{air} \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{air} + L\tilde{J}(r) + \dot{q}_r \qquad (19)$$

представляет собой полный тепловой поток на поверхности капли, который включает скрытую теплоту парообразования, эффекты теплопроводности в газе и тепловое излучение. Приведенные ниже оценки показывают, что все эти эффекты важны для капель, испаряющихся с нагретых подложек. Здесь  $\mathbf{n}$  — вектор нормали к свободной поверхности капли,  $k_{air} \left( \partial T / \partial n \right)_{air}$  — тепловой поток, связанный с неоднородным распределением температуры

в окружающем газе,  $k_{air}$  — теплопроводность воздуха, J(r) — локальная скорость испарения, определяемая выражением (5),

$$\dot{q}_r = \sigma_B \varepsilon (T^4 - T_a^4) \tag{20}$$

— поток излучения между каплей и окружающей средой,  $\sigma_B$  — постоянная Стефана – Больцмана,  $\varepsilon$  — коэффициент излучения, T и  $T_a$  — температура поверхности капли и температура окружающего газа соответственно.

Соотношение (20) можно использовать при следующих условиях. Во-первых, важно, чтобы размер капли был намного больше характерных длин волн теплового излучения, которые определяются распределением Планка. При этом условии излучательная способность практически не зависит от частоты [35]. И наоборот, для объектов, размеры которых намного меньше тепловой длины волны, возможна суперпланковская теплопередача излучением в дальней зоне [36,37]. Во-вторых, важно, чтобы изменение температуры внутри капли было намного меньше, чем разница температур капли и окружающего газа.

Получим теперь соотношение для  $(\partial T/\partial n)_{air}$ . Квазистационарное распределение температуры в газовой фазе определяется уравнением

$$\Delta T = 0 \tag{21}$$

с граничными условиями:  $T=T_s$  на поверхности капли (в предположении, что разница температур внутри капли намного меньше, чем разница температур капли и окружающего газа),  $T=T_a$  вдали от капли. Эта задача математически эквивалентна уравнению (2) с соответствующими граничными условиями, поэтому можно использовать те же формулы для аналитического решения. Из (5)–(8) следует, что величина  $J(r)/(Du_s)$  зависит только от геометрии задачи. Из математической эквивалентности следует, что

$$\frac{J(r)}{Du_s} = \frac{1}{T_s - T_a} \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{air}.$$
 (22)

Следовательно, основное граничное условие на поверхности капли принимает вид (19), где  $(\partial T/\partial n)_{air}$  вычисляется при помощи формул, аналогичных (5)–(8):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{qir} = J_1(\theta) \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{-\lambda(\theta)},\tag{23}$$

$$\frac{J_1(\theta)}{1 - \Lambda(\theta)} = J_1(\pi/2)(0.27\theta^2 + 1.3),\tag{24}$$

$$J_1(\pi/2) = \frac{T - T_a}{R}. (25)$$

#### 2.5. Теплопередача в газовой фазе

Оценим относительную силу тепловых потоков LJ(r) и  $k_{air} (\partial T/\partial n)_{air}$ , которые являются слагаемыми в (19). Из (22) следует, что тепловые потоки равны, когда

$$T_s - T_a = \frac{LDu_s}{k_{coir}}. (26)$$

Следовательно, вклад эффекта теплопроводности в воздухе соответствует тепловому потоку, связанному с испарением, для

$$T_s - T_a pprox$$
 
$$pprox \left\{ egin{array}{ll} 60.91 \, {
m K} & {
m для} \ {
m этанола}, \\ 0.94 \, {
m K} & {
m для} \ {
m гексанола}, \\ 22.53 \, {
m K} & {
m для} \ {
m силиконового} \ {
m масла}. \end{array} 
ight. \eqno(27)$$

В данной работе рассматривается случай  $T_s-T_a\approx \approx 10~{\rm K}$  для капель этанола и силиконового масла, поэтому рассмотрение эффекта теплообмена в газовой фазе целесообразно для получения количественных результатов.

#### 2.6. Тепловое излучение

Оценим относительную силу теплового потока LJ(r) испарительного охлаждения и теплового потока теплового излучения (20) между каплей и окружающей средой.

Из уравнений (5)–(8) следует, что тепловые потоки примерно равны при

$$T \sim \left(\frac{LDu_s}{\sigma_B \varepsilon R} + T_a^4\right)^{1/4}.$$
 (28)

Следовательно, вклад эффекта теплового излучения соответствует тепловому потоку испарительного охлаждения для

$$T_s - T_a pprox$$
 
$$pprox \left\{ egin{array}{ll} 70.6 \, {
m K} & {
m для} \ {
m этанола}, \\ 1.61 \, {
m K} & {
m для} \ {
m гексанола}, \\ 30.69 \, {
m K} & {
m для} \ {
m силиконового} \ {
m масла}. \end{array} 
ight. \eqno(29)$$

В данной работе рассматривается случай  $T_s-T_a\approx 10~{\rm K}$  для капель этанола и силиконового масла, поэтому учет влияния теплового излучения целесообразен для получения количественных результатов.

#### 2.7. Численное моделирование

Мы решаем уравнение теплопроводности и уравнения Навье – Стокса методом конечных элементов с использованием программного пакета моделирования гидродинамики ANSYS Fluent. Моделирование включает несколько шагов.

• Построение геометрии и сетки.

Создаем трехмерную геометрию осесимметричной капли. Радиус кривизны поверхности и высота капли равны соответственно  $R/\sin\theta$  и  $R(1/\sin\theta-{\rm ctg}\,\theta)$ . Следующим шагом является разделение области моделирования на малые вычислительные ячейки. Используем количество ячеек от 200 до 500 тысяч в зависимости от угла смачивания.

• Определение модели и настройка параметров.

Выбираем тип решателя со связью по давлению, нестационарный режим, вязкое (ламинарное) течение и включаем расчет энергии в модели. Указываем физические свойства жидкости: плотность, вязкость и температурную производную поверхностного натяжения  $\sigma_T$ , позволяющую задавать напряжения Марангони и т. д.

• Установка граничных условий и метода решения.

Граничные условия устанавливаются в соответствии с разд. 2. Скорость потери тепла (19) указывается с помощью пользовательской функции (UDF), написанной на языке программирования Си. Используется алгоритм решения SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations — полунеявный метод для уравнений со связью по давлению) метода Патанкара [38], доступный в пакете Fluent. Основной особенностью этого метода является использование зависимости между поправками к скорости и давлению для обеспечения сохранения массы и вычисления поля давления. Алгоритм написан таким образом, что уравнение неразрывности выполняется автоматически.

• Последующая обработка.

Мы отображаем результаты моделирования: поле скорости, абсолютные значения скорости и распределение температуры, и затем анализируем вихревую структуру и волновые картины.

#### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 показаны экспериментальные результаты из рис. 4 работы [27] и наши численные результаты для высыхающей капли 0.65 сСт силиконового масла. Здесь  $T_s=302.69$  K,  $T_a=294.88$  K, R=2.09 мм, а угол смачивания капли составляет

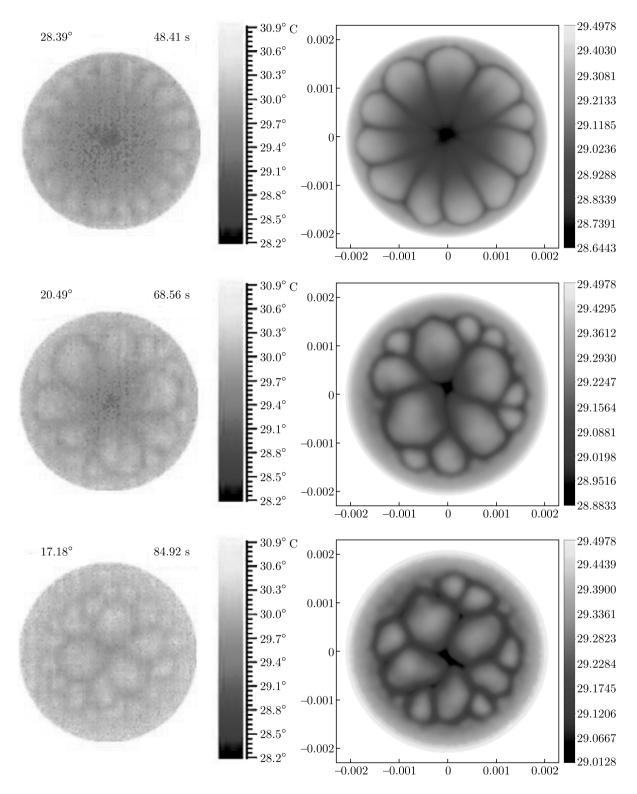
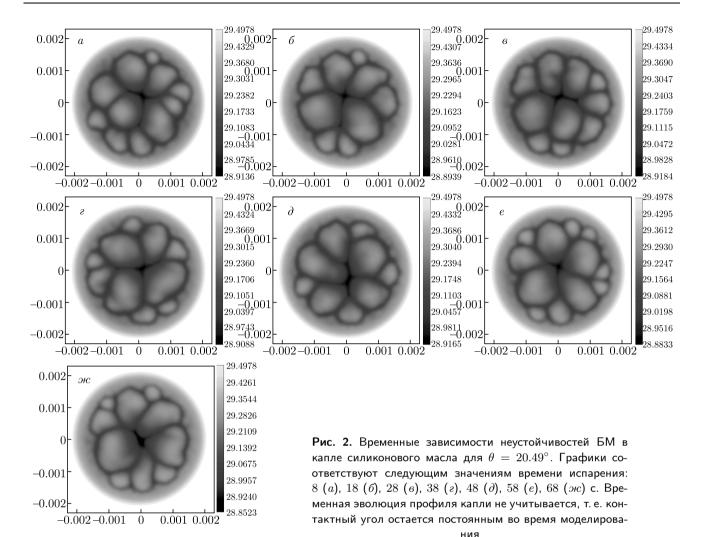


Рис. 1. Эволюция структур в распределении температуры на поверхности капли силиконового масла. В левой части рисунка показаны экспериментальные данные, перепечатанные из работы [27] с разрешения правообладателя (Copyright 2019 Elsevier). Правая панель показывает соответствующие температурные структуры на поверхности капли, полученные с помощью компьютерного моделирования с использованием параметров из таблицы



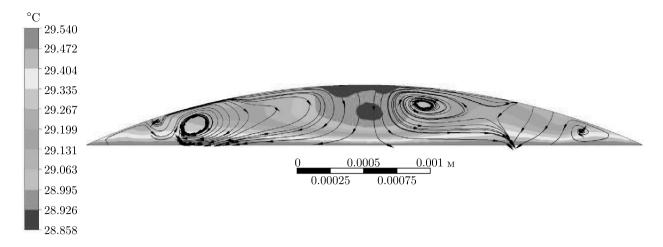
28.39°, 20.49° и 17.18°. Диффузия паров в воздухе, гидродинамика в капле, эффекты теплопроводности во всех трех фазах и тепловое излучение учитывались в численных расчетах в соответствии с обсуждением в разд. 2.

Полученное поведение ячеек БМ качественно согласуется с экспериментальными данными: при большом угле смачивания наблюдается цветочная структура, а при малых контактных углах ячейки БМ занимают всю поверхность капли. При моделировании не учитывалась временная динамика формы поверхности капли, поэтому детальные количественные результаты, такие как число ячеек БМ, могут отличаться.

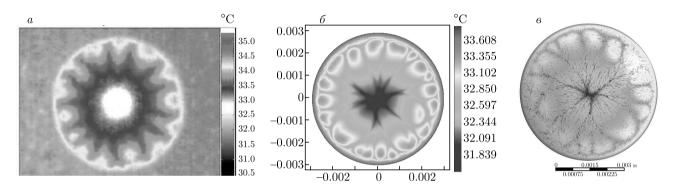
Отметим, что число Прандтля довольно велико для рассматриваемых задач, поэтому механизм неустойчивости ГТВ [20,21] имеет тенденцию перемещать ячейки БМ в направлении от вершины капли к контактной линии.

Из рис. 2 видно, что осцилляции структуры ячеек являются очень медленными по сравнению с характерными частотами ГТВ в [11, 12]. Таким образом, полученные результаты подтверждают в данном случае наличие нерегулярной осциллирующей конвекции БМ, а не ГТВ. Ячейки конвекции Марангони являются достаточно глубокими и практически достигают дна капли, как показано на рис. 3.

Рисунок 4 был получен для испаряющейся капли этанола. Здесь  $T_s=307.05~\mathrm{K},~T_a=297.55~\mathrm{K},~R=2.95~\mathrm{mm},~\theta=29.2^\circ.$  Временная динамика профиля капли не учитывалась. Численные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными. Мы получили 20 ячеек БМ, что согласуется с численными результатами работы [25], полученными другим методом. Мы подтверждаем результат [25] о том, что полученная неустойчивость должна быть описана как нестационарная конвекция БМ, а не как  $\Gamma$ TB.



**Рис. 3.** Вид сбоку для моделирования капли силиконового масла с  $\theta = 20.49^\circ$ 



**Рис. 4.** Структуры в распределении температуры на поверхности и график векторного поля скорости для капли этанола с  $\theta=29.2^{\circ}$ . a) Экспериментальные данные, перепечатанные из работы [25] с разрешения правообладателя (Copyright 2017 AIP Publishing).  $\delta$ ) Соответствующая картина температуры поверхности, полученная с помощью компьютерного моделирования с использованием параметров из таблицы.  $\epsilon$ ) График векторного поля скорости на поверхности капли, полученный численно

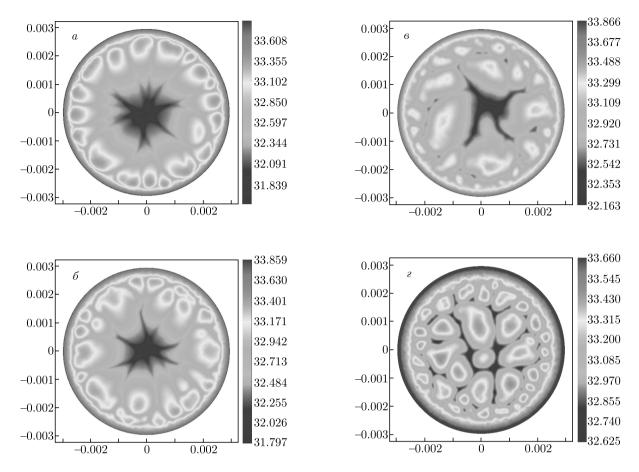
Мы не рассчитывали инфракрасное изображение с помощью уравнения (31) из [25], поскольку считаем, что это уравнение неверно. В частности, уравнение написано в предположении, что тепловое излучение распространяется только в вертикальном направлении. Кроме того, используется выражение Стефана – Больцмана, при этом не учитывается, что максимум распределения Планка находится за пределами диапазона длин волн, видимого инфракрасной камерой, т. е. инфракрасная камера пропускает значительную часть излучения.

На рис. 5 показаны вычисленные распределения температуры на поверхности капли для разных значений  $\theta$ . Для большого контактного угла наблюдается цветочная структура ячеек БМ. В то же время ячейки занимают всю поверхность капли при достаточно малых углах смачивания. Такая ситуация

отличается от полученной численно в [25], где ячейки БМ располагались только вблизи контактной линии, и их количество увеличивалось с уменьшением высоты капли. Зависимости расположения ячеек БМ от угла смачивания на рис. 1 и 5 похожи, что естественно, поскольку соответствующие физические параметры довольно близки.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы выполнили трехмерное компьютерное моделирование нестационарных неустойчивостей Марангони в испаряющихся лежащих каплях этанола и силиконового масла капиллярного размера на нагретой подложке с высокой теплопроводностью. Мы проанализировали, насколько существенны различные физические эффекты в этой задаче и обнаружили, что, помимо нестационарной трехмерной теп-



**Рис. 5.** Структуры в распределениях температуры на поверхности капли, полученные при помощи компьютерного моделирования капли этанола для  $\theta = 29.2^{\circ}$  (a),  $24^{\circ}$  (b),  $20^{\circ}$  (c),  $15^{\circ}$  (c)

лопроводности в капле, нестационарной трехмерной динамики несжимаемой жидкости и диффузии паров в воздухе, также необходимо учитывать поток излучения между каплей и окружающей средой и теплопередачу в газовой фазе. Однако вклад таких явлений, как нестационарные эффекты диффузии паров в воздухе незначителен.

Интересно, что хорошо известное аналитическое решение для скорости испарения в диффузионной модели испарения [30], которое значительно упрощает расчет теплопередачи в капле, также может быть использовано для расчета теплопроводности в газовой фазе.

Наши результаты хорошо согласуются с экспериментальными результатами [25, 27]. Мы подтверждаем вывод этих работ о том, что неустойчивость в данном случае представляет собой нестационарную конвекцию БМ, а не ГТВ.

Также проясняется поведение неустойчивостей БМ при уменьшении краевого угла. Мы обнаружили, что уменьшение краевого угла приводит к увеличению размера ячеек БМ, что в конечном итоге превращает цветочную пространственную структуру в структуру, в которой ячейки БМ занимают всю каплю. Такое поведение наблюдалось экспериментально в [27], но, насколько нам известно, до сих пор не было получено численно. Мы обнаружили, что это поведение применимо и к испаряющейся капле этанола [25]. Это устраняет несоответствие между поведением ячеек БМ в [27] и в [25].

Наши результаты также согласуются с недавними экспериментальными результатами [39], которые показывают, что гидротермальные волны в капле возникают только при относительно больших углах смачивания.

Мы полагаем, что полученные результаты представляют собой полезный шаг на пути к лучшему пониманию термокапиллярной неустойчивости в испаряющихся каплях.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-71-10061).

#### ЛИТЕРАТУРА

- D. Brutin and V. Starov, Chem. Soc. Rev. 47, 558 (2018).
- 2. R. G. Larson, AIChE J. 60, 1538 (2014).
- **3**. H. Y. Erbil, Adv. Colloid Interf. Sci. **170**(1–2), 67 (2012).
- 4. D. Zang, S. Tarafdar, Yu. Yu. Tarasevich, M. Du. Choudhury, and Tapati Dutta, Phys. Rep. 804, 1 (2019).
- F. Giorgiutti-Dauphiné and L. Pauchard, Eur. Phys. J. E 41(3), 32 (2018).
- X. Shao, F. Duan, Y. Hou, and X. Zhong, Adv. Colloid Interf. Sci. 275, 102049 (2020).
- 7. R. Savino and S. Fico, Phys. Fluids 16, 3738 (2004).
- K. H. Kang, S. J. Lee, C. M. Lee, and I. S. Kang, Meas. Sci. Technol. 15, 1104 (2004).
- H. Hu and R. G. Larson, J. Phys. Chem. B 110, 7090 (2006).
- W. D. Ristenpart, P. G. Kim, C. Domingues, J. Wan, and H. A. Stone, Phys. Rev. Lett. 99, 234502 (2007).
- K. Sefiane, J. R. Moffat, O. K. Matar, and R. V. Craster, Appl. Phys. Lett. 93, 074103 (2008).
- K. Sefiane, A. Steinchen, and R. Moffat, Colloids Surf. A 365, 95 (2010).
- D. Brutin, B. Sobac, F. Rigollet, and C. Le Niliot, Exp. Therm. Fluid Sci. 35, 521 (2011).
- **14**. B. Sobac and D. Brutin, Phys. Fluids **24**, 032103 (2012).
- F. Carle, B. Sobac, and D. Brutin, J. Fluid Mech. 712, 614 (2012).
- K. Sefiane, Y. Fukatani, Y. Takata, and J. Kim, Langmuir 29(31), 9750 (2013).
- G. Karapetsas, O. K. Matar, P. Valluri, and K. Sefiane, Langmuir 28(31), 11433 (2012).
- P. J. Sáenz, P. Valluri, K. Sefiane, G. Karapetsas, and O. K. Matar, Phys. Fluids 26, 024114 (2014).
- J.-L. Zhu, W.-Y. Shi, and L. Feng, Int. J. Heat Mass Transfer 134, 784 (2019).

- M. K. Smith and S. H. Davis, J. Fluid Mech. 132, 119 (1983).
- 21. M. K. Smith. Phys. Fluids 29, 3182 (1986).
- **22**. D. Schwabe, U. Möller, J. Schneider, and A. Scharmann, Phys. Fluids A **4**, 2368 (1992).
- **23**. R. J. Riley and G. P. Neitzel, J. Fluid Mech. **359**, 143 (1998).
- 24. W.-Y. Shi, K.-Y. Tang, J.-N. Ma, Y.-W. Jia, H.-M. Li, and L. Feng, Int. J. Therm. Sci. 117, 274 (2017).
- S. Semenov, F. Carle, M. Medale, and D. Brutin, Appl. Phys. Lett. 111, 241602 (2017).
- S. Semenov, F. Carle, M. Medale, and D. Brutin, Phys. Rev. E 96, 063113 (2017).
- T.-S. Wang and W.-Y. Shi, Int. J. Heat Mass Transfer 131, 1270 (2019).
- L. Yu. Barash, T. P. Bigioni, V. M. Vinokur, and L. N. Shchur, Phys. Rev. E 79, 046301 (2009).
- **29**. Н. Н. Лебедев, Специальные функции и их приложения, Физматлит, Москва-Ленинград (1963).
- 30. R. D. Deegan, O. Bakajin, T. F. Dupont, G. Huber, S. R. Nagel, and T. A. Witten, Phys. Rev. E 62, 756 (2000).
- **31**. H. Hu and R. G. Larson, J. Phys. Chem. B **106**, 1334 (2002).
- **32**. D. Ambrose and C. H. S. Sprake, J. Chem. Thermodyn. **2**, 631 (1970).
- **33**. Н. А. Фукс, Испарение и рост капель в газообразной среде, Изд-во АН СССР, Москва (1958).
- **34**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 6, *Гидродинамика*, Наука, Москва (1988).
- **35**. G. W. Kattawar and M. Eisner, Appl. Opt. **9**, 2685 (1970).
- 36. D. Thompson, L. Zhu, R. Mittapally, S. Sadat, Z. Xing, P. McArdle, M. M. Qazilbash, P. Reddy, and E. Meyhofer, Nature 561, 216 (2018).
- 37. V. Fernández-Hurtado, A. I. Fernández-Domínguez, J. Feist, F. J. García-Vidal, and J. C. Cuevas, Phys. Rev. B 97, 045408 (2018).
- **38**. S. V Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, CRC Press (2018).
- **39**. T.-S. Wang and W.-Y. Shi, Int. J. Heat Mass Transfer **148**, 119138 (2020).

# КОНВЕКЦИЯ КОЛЛОИДНОЙ СУСПЕНЗИИ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ ПРИ НАГРЕВЕ СНИЗУ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ

И. Н. Черепанов, Б. Л. Смородин\*

Пермский государственный национальный исследовательский университет 614990, Пермь, Россия

Поступила в редакцию 17 сентября 2020 г., после переработки 7 октября 2020 г. Принята к публикации 8 октября 2020 г.

В случае горизонтального слоя коллоидной суспензии изучены линейная неустойчивость и двумерные нелинейные конвективные течения стратифицированной в поле тяжести коллоидной суспензии при учете взаимодействия частиц. Получены зависимости порога возникновения колебательной конвекции, частоты нейтральных колебаний и критического волнового числа от среднего значения объемной доли примеси. Нелинейные слагаемые в диффузионном и седиментационном потоках, отражающие взаимодействие наночастиц, приводят к понижению среднего поперек слоя градиента концентрации и снижению порога возникновения конвекции и частоты нейтральных колебаний по сравнению с идеальным коллоидным раствором. Проведено численное моделирование конечно-амплитудного течения в виде бегущей волны. В отличие от случая молекулярных жидкостей и идеальных коллоидных растворов пространственная структура поля концентрации хорошо описывается первой гармоникой и имеет слабый пространственный ангармонизм.

#### **DOI:** 10.31857/S0044451021020164

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

В однородной жидкости, заполняющей горизонтальный слой, под влиянием вертикального градиента температуры возможно состояние механического равновесия, когда макроскопическое движение жидкости отсутствует, а передача тепла осуществляется только за счет молекулярного переноса. При нагреве снизу и достаточно большой разности температуры данное состояние становится неустойчивым, возникающая неоднородность плотности благодаря силам плавучести приводит к формированию конвективного течения [1,2].

В случае неоднородных по составу жидкостей (молекулярных смесей и коллоидных суспензий) появляется дополнительный механизм формирования неоднородности плотности за счет перераспределения их компонент [1–4]. Благодаря тому, что в коллоидных суспензиях коэффициент диффузии на несколько порядков меньше, чем в молекулярных растворах, во многих исследованиях конвекции в подобных средах они рассматриваются как однородные, поскольку предполагается, что существенные неоднородности в распределении примеси, обусловленные термодиффузией, магнитофорезом и седиментацией наночастиц примеси возникают только на диффузионных временах, значительно превышающих тепловое характерное время. Тем не менее имеются экспериментальные данные по конвективным течениям коллоидных суспензий, которые нельзя объяснить с точки зрения модели однородной жидкости [5–7].

Теоретический анализ конвекции в плоском слое коллоида проведен в работах [8,9]. Однако он справедлив только для слабоконцентрированных растворов. Как показывают исследования, в коллоидах проявляется довольно сильная зависимость вязкости от концентрации [10], а также значительное отклонение закона диффузии от классического закона Фика [11,12]. Анализ влияния концентрационной зависимости вязкости на конвекцию коллоидного раствора в плоском слое при подогреве снизу был проведен в работе [13]. Учет неоднородности вязкости смеси приводит к понижению порога кон-

<sup>\*</sup> E-mail: bsmorodin@yandex.ru

вективной устойчивости. Несмотря на сильную зависимость вязкости от концентрации, влияние данного эффекта на порог устойчивости механического равновесия оказался слабым. Значительные отклонения критического числа Рэлея от модели с постоянной вязкостью наблюдаются только при очень большой неоднородности смеси.

Теоретическое исследование диффузии твердых частиц представлено в работе [14], в которой полагается, что энергия Гиббса раствора в целом должна определяться конфигурационным интегралом частиц примеси, который может быть вычислен для частиц в пустоте. Данная теория была развита в работах [15, 16].

Сравнительный анализ различных моделей газа твердых сфер, проведенный в работе [17], показал, что в области умеренных значений объемной доли частиц  $\varphi$  вириальное разложение и приближение Карнагана – Стерлинга дают практически идентичные результаты.

Рассмотрение коллоидов с точки зрения теории слабых растворов проведено в работе [12]. Отличие данной теории от подхода [14] заключается в том, что проводится разложение энергии Гиббса по степеням концентрации частиц примеси без учета рассмотрения конкретных видов межчастичных взаимодействий. Последовательное применение теории слабых растворов [12] с учетом характерных особенностей твердых частиц приводит к уравнениям, дающим распределения концентрации, схожие с приведенными в [14]. Однако стоит отметить ряд отличий. В теории [12] в химическом потенциале частиц примеси добавочное слагаемое зависит от плотности смеси как целого, что приводит к появлению дополнительного множителя  $(1-\varphi)$ .

Данная работа посвящена исследованию конвекции коллоидной суспензии в горизонтальном слое с учетом нелинейного закона диффузионного и седиментационного потоков наночастиц, предложенного в [12].

#### 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим горизонтальный слой толщиной h, заполненный коллоидным раствором (коллоидной суспензией), расположенный в поле тяжести  $\mathbf{g} = -g\mathbf{n}$  ( $\mathbf{n}$  — единичный вектор, направленный вверх) и подогреваемый снизу. На горизонтальных идеально теплопроводных и непроницаемых для примеси границах слоя выполняется условие прилипания смеси. Ось x декартовой системы ко-

ординат направлена вдоль горизонтальных границ слоя, ось z — перпендикулярно им. В поле тяжести возникает поток примеси наночастиц, направленный к нижней границе. Поскольку к горизонтальным границам слоя приложен градиент температур  $\delta\Theta/h=(\theta_{bottom}-\theta_{top})/h>0$ , в смеси при достаточно большом его значении действует и другой (конвективный) механизм транспорта наночастиц. Плотность коллоидного раствора зависит от объемной доли  $\varphi$  примеси по закону

$$\rho = \rho_f(1 - \varphi) + \rho_p \varphi, \tag{1}$$

где  $\rho$  — плотность смеси в целом,  $\rho_f$  — плотность жидкости носителя,  $\rho_p$  — плотность частиц. Уравнение состояния коллоидной суспензии при слабом отклонении температуры  $\theta$  и объемной концентрации  $\varphi$  от некоторых средних значений  $\theta_0$ ,  $\varphi_0$  можно аппроксимировать линейной зависимостью:

$$\rho = \rho_0 \left( 1 - \alpha(\theta - \theta_0) + \beta(\varphi - \varphi_0) \right), \tag{2}$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — положительные коэффициенты теплового и концентрационного расширения смеси соответственно:

$$\alpha = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial T}, \quad \beta = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial \varphi} = \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_0}.$$
 (3)

В концентрированных коллоидах поток частиц не подчиняется классическому закону Фика, в котором полагается линейная зависимость потока частиц от градиента концентрации. Для описания потоков частиц используем модель, предложенную в [12], в которой поток частиц для случая умеренных концентраций ( $\varphi^3 \ll 1$ )) имеет вид

$$\mathbf{J}_{\varphi} = -D \left[ (1 + p\varphi)\nabla\varphi + \frac{1}{l_{sed}}\varphi(1 - \varphi)\mathbf{n} \right], \quad (4)$$

где D — коэффициент диффузии наночастиц, p — параметр, определяемый свойствами суспензии,  $l_{sed}=\frac{k_bT}{\delta\rho Vg}$  — длина седиментации [18], V — объем частиц,  $k_b$  — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура,  $\delta\rho=\rho_p-\rho_f$ . Для коллоидных растворов  $p\approx 8$ .

Система уравнений тепловой конвекции коллоидной суспензии примет вид

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \mathbf{v} + 
+ (1 - \alpha(\theta - \theta_0) + \beta(\varphi - \varphi_0)) \mathbf{g}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\theta = \chi \Delta \theta, \tag{6}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{v}) = -D\nabla \mathbf{J}_{\varphi},\tag{7}$$

где  ${\bf v}$  — скорость течения, P — давление,  $\chi$  — температуропроводность, D — коэффициент диффузии наночастиц. Несмотря на неоднородность плотности, создаваемую за счет перепадов концентрации, жидкость можно считать несжимаемой. Для подтверждения этого рассмотрим уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{8}$$

Учтем зависимость плотности от температуры и концентрации (2) и, пользуясь уравнениями (6), (7), (16), получим

 $\operatorname{div} \mathbf{v} \simeq \alpha \chi \Delta \theta - \beta D \times$ 

$$\times \operatorname{div}\left[ (1 + p\varphi)\nabla\varphi + \frac{1}{l_{sed}}\varphi(1 - \varphi)\mathbf{n} \right].$$
 (9)

Учитывая, что div  ${\bf v}$  при конвективных течениях имеет значения порядка  $\chi/h^2$ , лапласиан температуры — значения порядка  $\delta\Theta/h^2$ , а слагаемые в правой части, отвечающие за пространственное распределение концентрации, — порядка  $\varphi_0/h^2$  и  $\varphi_0/(hl_{sed})$ , найдем условие применимости модели несжимаемой жидкости (div  ${\bf v}=0$ ):

$$\alpha\delta\Theta \ll 1, \quad \frac{\beta D\varphi_0}{\chi} \ll 1, \quad \frac{\beta D\varphi_0}{hl_{sed}} \ll 1.$$
 (10)

Тепловые возмущения не вызывают существенного нарушения условия несжимаемости жидкости даже при разности температур в сотню градусов ввиду малости коэффициента теплового расширения  $\alpha \sim 10^{-4} - 10^{-3}$ . В случае переноса частиц примеси концентрационный коэффициент плотности, определенный по объемной концентрации частиц, может быть существенно больше:  $\beta \approx 1$ –5, однако ввиду малости коэффициента диффузии для коллоидных суспензий ( $D \sim 10^{-7}~{\rm cm}^2/{\rm c}$ ) по сравнению с коэффициентом температуропроводности ( $\chi \sim 10^{-3}~{\rm cm}^2/{\rm c}$ ) они не способны вызвать значительные отклонения поля скорости от соленоидального вида div  ${\bf v}=0$ , даже при сильной концентрации суспензии.

Поскольку задача (5)–(7) изотропна в плоскости слоя, плоские (двумерные) и пространственные (трехмерные) возмущения одинаково опасны. В дальнейшем будем рассматривать двумерные возмущения и эволюцию двумерных течений.

Введем функцию тока и завихренность жидкости соотношениями

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = v_z, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = -v_x, \quad \Phi = (\operatorname{rot} \mathbf{v})_y$$
 (11)

и запишем уравнения конвекции в безразмерном виде, используя следующие масштабы: длины -h, времени —  $h^2/\chi$ , скорости —  $\chi/h$ , температуры —  $\delta\Theta$ , концентрации —  $\varphi_0$ , давления —  $\rho\chi^2/h^2$ . Тогда

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 
= \Pr \left[ \Delta \Phi + R \frac{\partial \theta}{\partial x} - B l \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right], \quad (12)$$

$$\Phi = \Delta\Psi,\tag{13}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \Delta \theta, \tag{14}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\text{Le}\nabla \mathbf{j}_{\varphi}. \tag{15}$$

$$\mathbf{j}_{\varphi} = -\left[ (1 + p\varphi_0 \varphi) \nabla \varphi + \frac{1}{l} \varphi (1 - \varphi_0 \varphi) \mathbf{n} \right]. \tag{16}$$

Здесь  $R = \alpha g h^3 \delta \Theta / \nu \chi$ ,  $B = \beta g h^4 \varphi_0 / (\nu \chi l_{sed})$ , Le =  $=D/\chi$ ,  $Pr=\nu/\chi$ ,  $l=h/l_{sed}$  — соответственно тепловое число Рэлея, число Больцмана, число Льюиса, число Прандтля, безразмерная длина седиментации, а также два дополнительных параметра (по сравнению с задачей [8,9]): p — коэффициент, характеризующий зависимость диффузии от концентрации,  $\varphi_0$  — среднее значение концентрации. Отметим, что число Больцмана, используемое при описании конвекции коллоидной суспензии, связано с концентрационным числом Рэлея  $R_D = \beta g h^3 \varphi_0 / \nu \chi$  следующим образом:  $B = R_D/l$ . Граничные условия к задаче (12)-(16), соответствующие идеально теплопроводным непроницаемым горизонтальным границам, на которых отсутствует проскальзывание, запишутся в виде

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(1) = 0,$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)_0 = 0, \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)_1 = 0,$$

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(1) = 0,$$

$$z = 0, 1 : (\mathbf{j}_{\varphi})_z = 0.$$
(17)

### 3. МЕХАНИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ

При подогреве горизонтального слоя жидкости снизу возможно состояние механического равновесия, когда макроскопические течения отсутствуют ( $\mathbf{v}=0$ ). При этом распределение температуры является линейной функцией вертикальной координаты:

$$\theta_s = 1 - z. \tag{18}$$

Распределение концентрации в горизонтальном слое в стационарном случае механического равновесия

 $\varphi_s(z)$  определяется решением уравнения для эволюции примеси (15) с учетом (16), в котором левая часть равна нулю:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( (1 + p\varphi_0 \varphi_s) \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} + \frac{\varphi_s}{l} (1 - \varphi_0 \varphi_s) \right) = 0 \tag{19}$$

или

$$(1 + p\varphi_0\varphi_s)\frac{\partial^2\varphi_s}{\partial z^2} + p\varphi_0\left(\frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\right)^2 + \frac{1 - 2\varphi_0\varphi_s}{l}\left(\frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\right) = 0. \quad (20)$$

Решение имеет вид

$$\varphi_s = 1 + \frac{G}{\varphi_0 p} W\left(A \exp\left(-\frac{z}{r}\right)\right) - \frac{1 - \varphi_0}{1 - 2\varphi_0},$$
 (21)

где W-функция Ламберта и введены обозначения

$$G = 1 + \frac{p\varphi_0^2}{1 - 2\varphi_0}, \quad r = \frac{lG}{1 - 2\varphi_0}.$$
 (22)

Константа A находится из условия постоянства средней концентрации

$$\int_{0}^{1} \varphi_s = 1. \tag{23}$$

Уравнение (23) не имеет аналитического решения для A в общем виде, однако может быть решено численно при задании конкретных значений параметров  $l, p, \varphi_0$ .

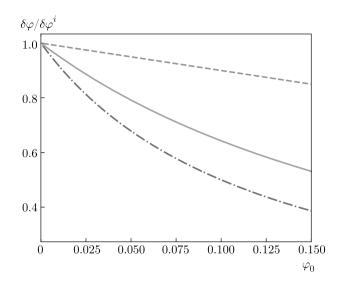
В случае идеального слабого раствора  $(p=0,\varphi_0\to 0)$  распределение концентрации описывается классическим барометрическим распределением

$$\varphi_s^i = \frac{1}{l} \frac{\exp(-z/l)}{1 - \exp(-1/l)} - 1,$$
(24)

а разность концентраций на верхней и нижней границах имеет вид

$$\delta \varphi_s^i = \varphi_s^i(z=0) - \varphi_s^i(z=1) = \frac{1}{I}.$$
 (25)

Поведение величины  $\delta\varphi/\delta\varphi_s^i$ , характеризующей отношение среднего градиента концентрации в слое к соответствующему значению для идеально слабого раствора, в зависимости от средней концентрации  $\varphi_0$  показано на рис. 1. Учет взаимодействия наночастиц в коллоидной суспензии приводит к уменьшению разности концентраций  $\delta\varphi$  на границах слоя по сравнению со случаем идеального раствора. Так, при объемной доле частиц порядка 10% градиент концентрации уменьшается практически вдвое.



**Рис. 1.** Зависимости разности концентраций на верхней и нижней границах слоя от среднего значения концентрации при l=10. Штриховая линия соответствует p=0, сплошная — p=4, штрихпунктирная — p=8

### 4. АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ

Рассмотрим малые возмущения функции тока  $\psi,$  температуры  $\theta$  и концентрации  $\tilde{\varphi}$  от соответствующих равновесных значений:

$$\theta = \theta_s + \vartheta,$$
  

$$\varphi = \varphi_s + \tilde{\varphi}.$$
(26)

Будем искать решение в виде плоских нормальных возмущений:

$$\psi(x, z, t) = \psi(z) \exp(-\lambda + ikx), 
\vartheta(x, z, t) = \vartheta(z) \exp(-\lambda t + ikx), 
\tilde{\varphi}(x, z, t) = \tilde{\varphi}(z) \exp(-\lambda t + ikx),$$
(27)

где k — волновое число,  $\lambda$  — комплексный декремент затухания.

Тогда уравнения для эволюции малых возмущений функции тока, температуры и концентрации запишутся в виде

$$-\lambda \Delta \psi = \Pr\left(\Delta \Delta \psi + ikR\vartheta - ikBl\tilde{\varphi}\right),\tag{28}$$

$$-\lambda \vartheta - ik\psi = \Delta \vartheta, \tag{29}$$

$$-\lambda \tilde{\varphi} + ik\psi \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} = \operatorname{Le}\left(\frac{\partial j_{\varphi z}}{\partial z} - k^2 (1 + p\varphi_0 \varphi_s) \tilde{\varphi}\right), \quad (30)$$

где  $j_{\varphi z}-z$ -компонента потока частиц, связанная с возмущениями концентрации  $\tilde{\varphi},$ 

$$j_{\varphi z} = (1 + p\varphi_0 \varphi_s) \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial z} + p\varphi_0 \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} \tilde{\varphi} + \frac{\tilde{\varphi}}{l} (1 - 2\varphi_0 \varphi_s). \quad (31)$$

Выражение для  $j_{\varphi z}$  заметно упрощается, если использовать замену

$$\tilde{\varphi} = \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} \phi, \tag{32}$$

как это ранее делалось в более простом случае слабой концентрации коллоидной суспензии [19]. После подстановки (32) в уравнение (31) и явного вычисления производной получим выражение

$$j_{\varphi z} = (1 + p\varphi_0\varphi_s)\frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\frac{\partial\phi}{\partial z} + \left((1 + p\varphi_0\varphi_s) \times \frac{\partial^2\varphi_s}{\partial z^2} + p\varphi_0\left(\frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\right)^2 + \frac{1 - 2\varphi_0\varphi_s}{l}\frac{\partial\varphi_s}{\partial z}\right)\phi, \quad (33)$$

в котором благодаря (20) второе слагаемое обращается в нуль. Для вертикального потока наночастиц окончательно получим

$$j_{\varphi z} = (1 + p\varphi_0 \varphi_s) \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z}.$$
 (34)

Вычисляя далее производную

$$\frac{\partial j_{\varphi z}}{\partial z} = (1 + p\varphi_0\varphi_s)\frac{\partial \varphi_s}{\partial z}\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + 
+ (1 + p\varphi_0\varphi_s)\frac{\partial^2 \varphi_s}{\partial z^2}\frac{\partial \phi}{\partial z} + p\varphi_0\left(\frac{\partial \varphi_s}{\partial z}\right)^2\frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (35)$$

и еще раз используя соотношение (20), получим

$$\frac{\partial j_{\varphi z}}{\partial z} = (1 + p\varphi_0 \varphi_s) \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1 - 2\varphi_0 \varphi_s}{l} \frac{\partial \varphi_s}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z}.$$
(36)

Подставляя  $\tilde{\varphi}$  в виде (32) и  $\partial j_{\varphi_z}/\partial z$  в систему (28)–(30) и сокращая множитель  $\partial \varphi_s/\partial z$  в уравнении (30), получим систему уравнений для эволюции возмущений в окончательном виде:

$$-\lambda \Delta \psi = \Pr\left(\Delta \Delta \psi + ikR\vartheta - ikBl\frac{\partial \varphi_s}{\partial z}\phi\right), \quad (37)$$

$$-\lambda \vartheta - ik\psi = \Delta \vartheta, \quad (38)$$

$$-\lambda \phi + ik\psi = \operatorname{Le}\left((1 + p\varphi_0\varphi_s) \times \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - k^2\phi\right) - \frac{1 - 2\varphi_0\varphi_s}{l}\frac{\partial \phi}{\partial z}\right). \quad (39)$$

Граничные условия для возмущений функции тока и температуры имеют вид

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \vartheta = 0 \quad \text{при } z = 0, 1.$$
 (40)

Равенство нулю z-компоненты потока вещества на горизонтальных границах, записанного в виде (34), немедленно дает граничное условие для вспомогательной функции:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$
 при  $z = 0, 1.$  (41)

Для решения задачи устойчивости (37)–(39) с граничными условиями (40), (41) использовался метод Галеркина [2] с разложением полей функции тока, температуры и переменной  $\phi$  по наборам базисных функций [19], удовлетворяющих граничным условиям (40), (41):

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_{\psi}} \psi_n \sin(n\pi z) \sin \pi z,$$

$$\vartheta = \sum_{m=1}^{N_{\vartheta}} \vartheta_n \sin(m\pi z),$$

$$\phi = \sum_{q=0}^{N_{\phi}-1} \phi_q \cos(q\pi z).$$
(42)

Подставляя разложения (42) в систему (37)–(39) и составляя условия ортогональности метода Галеркина, получим линейную систему уравнений для амплитуд  $\psi_n$ ,  $\vartheta_n$ ,  $\phi_q$ , содержащую  $K=N_\psi+N_\vartheta+N_\varphi$  уравнений. Условием существования нетривиального решения полученной системы является равенство нулю определителя, матрицы A размера  $K\times K$ , составленной из коэффициентов при соответствующих амплитудах. После преобразования матрицы A к виду, при котором декременты  $\lambda$  расположены только на диагонали:

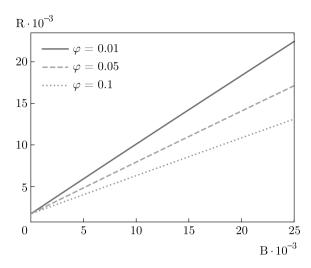
$$A = C - \lambda E$$

где E — единичная матрица, задача определения декрементов возмущений сводится к задаче поиска собственных значений матрицы C.

Декремент  $\lambda$  является функцией параметров задачи:  $\lambda = \lambda(R, B, l, Pr, Le, p, \varphi_0, k)$ , при этом условие  $\lambda_r = Re \lambda = 0$  определяет границу конвективной устойчивости.

В расчетах использовалось разложение по 15 базисным функциям для каждого из полей скорости, температуры и концентрации ( $N_{\psi}=15,\ N_{\vartheta}=15,\ N_{\phi}=15$ ). Дальнейшее увеличение количества базисных функций приводило к изменению критического значения числа Рэлея, не превышающему  $0.05\,\%$ .

Обсудим результаты исследования линейной устойчивости механического равновесия коллоидной суспензии, в котором устанавливается линейный



**Рис. 2.** Зависимости порогового числа Рэлея от числа Больцмана при некоторых значениях средней концентрации,  $\Pr=5.5,\ l=10,\ p=8,\ Le=1.5\cdot 10^{-4}$ 

профиль температуры и профиль концентрации  $\varphi_s(z)$ . При рассмотрении предполагается, что коллоидная суспензия имеет типичное значение числа Льюиса Le =  $1.5\cdot 10^{-4}$ , а число Прандтля  $\Pr=5.5$  или  $\Pr=100$ .

Конвекция возникает в результате возрастания колебательных возмущений. В работе [9] показано, что без учета зависимости коэффициента диффузии от концентрации (p=0, что справедливо для слабых растворов) порог устойчивости механического равновесия слоя коллоидного раствора  $\mathbf{R}_C$  в области  $l\ll 1$  хорошо описывается линейной зависимостью от числа Больцмана:

$$R_C = R_0 + aB, (43)$$

где  $R_0=1708$  — порог устойчивости однородной жидкости, a — некоторая функция от числа Прандтля, например,  $a(\Pr=100)=1.01, a(\Pr=5.5)=0.93.$  Результаты расчетов порога устойчивости для концентрированного коллоида (37)–(39) представлены на рис. 2.

Учет квадратичных слагаемых в потоке наночастиц приводит к понижению  $R_C$  с ростом средней концентрации, что обусловливается, по-видимому, уменьшением эффективного градиента концентрации. Разность концентраций в идеальном коллоидном растворе на верхней и нижней границах слоя в размерном виде определяется отношением  $\delta \varphi_s^i = (\varphi_0 h)/l_{sed}$ , а в безразмерных переменных —  $\delta \varphi_s^i = 1/l$ . Как показано на рис. 1, в концентрированном коллоиде с увеличением среднего значения объем-

**Таблица.** Сравнение значений коэффициента a при некоторых параметрах задачи

	a		$a_{ef}$	
$\varphi_0$	Pr = 100	Pr = 5.5	Pr = 5.5	Pr = 100
0.01	0.923	0.829	0.904	8.12
0.05	0.684	0.614	0.912	8.19
0.10	0.505	0.456	0.912	8.23

ной доли  $\varphi_0$  разность концентраций (а следовательно, и градиент внутри слоя) уменьшается.

Зависимости  $R_C(B, Pr)$  в случае нелинейной зависимости потока наночастиц от средней концентрации так же хорошо описываются соотношением (43). Значения коэффициентов приведены в таблице.

Отметим, что если в зависимости (43) использовать эффективное число Больцмана  $B_{ef} = B\delta\varphi_s/\delta\varphi_s^i$ :

$$R_C = R_0 + aB = R_0 + a_{ef}B\delta\varphi_s/\delta\varphi_s^i =$$

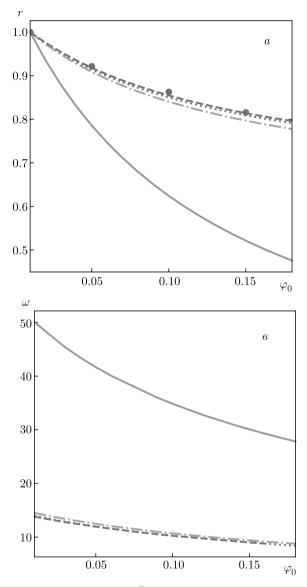
$$= R_0 + a_{ef}B_{ef}, \quad (44)$$

то эффективный коэффициент пропорциональности

$$a_{ef} = a\delta\varphi_s^i/\delta\varphi_s \tag{45}$$

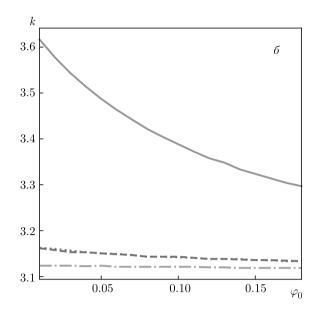
практически не зависит от средней концентрации коллоидного раствора, а определяется только числом Прандтля (см. таблицу).

Зависимости приведенного критического числа Рэлея  $r = R_C/(R_C(\varphi_0 \to 0))$ , волнового числа k, частоты нейтральных колебаний  $\omega$  от средней объемной доли приведены на рис. 3. Увеличение средней объемной доли примеси приводит не только к понижению порога конвективной устойчивости, о чем шла речь при обсуждении рис. 2. Уменьшение частоты нейтральных колебаний с ростом средней концентрации также объясняется уменьшением среднего градиента концентрации частиц в слое за счет их взаимодействия. В предельном случае однородной жидкости конвекция связана с монотонными возмущениями (частота нейтральных колебаний равна нулю). Отметим, что эффект понижения порога конвекции проявляется сильнее при больших значениях числа Больцмана. Так, при  $B=10^4$ при объемной доле примеси 0.15 порог понижается практически в два раза.



### 5. НЕЛИНЕЙНЫЕ ТЕЧЕНИЯ

Для анализа двумерных конечно-амплитудных течений система нелинейных уравнений (13)-(15) с граничными условиями (17) решалась методом конечный разностей [20]. При переходе к дискретным аналогам уравнений движения и теплопроводности пространственные производные аппроксимировались центральными разностями. Поскольку уравнение концентрации (15) должно удовлетворять закону сохранения массы, оно записывалось в консервативной форме и аппроксимировалось при помощи метода контрольного объема [20]. Для дискретного представления конвективных слагаемых применялись центральные разности. Решение уравнения Пуассона проводилось с помощью быстрого преобразования Фурье. Подробное описание численного алгоритма приведено в [21]. При расчетах исполь-

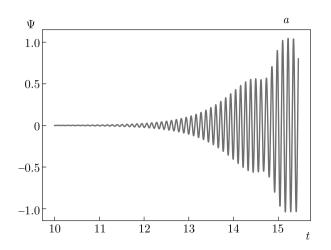


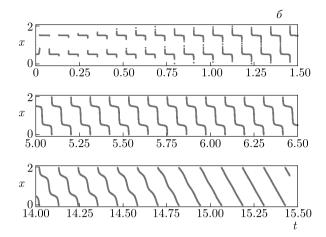
**Рис. 3.** Зависимости приведенного порогового числа Рэлея r (a), волнового числа k (b) и частоты нейтральных колебаний  $\omega$  (b) от  $\varphi_0$  при различных наборах параметров B, Pr и l при p=8 и  $\mathrm{Le}=1.5\cdot 10^{-4}$ . Пунктирные линии —  $\mathrm{Pr}=5.5,\ \mathrm{B}=10^3,\ l=10,\$ штриховые линии —  $\mathrm{Pr}=5.5,\ \mathrm{B}=10^3,\ l=1,\$ сплошные линии —  $\mathrm{Pr}=5.5,\ \mathrm{B}=10^4,\ l=10,\$ штрихпунктирные линии —  $\mathrm{Pr}=100,\ \mathrm{B}=10^3,\ l=10,\$ точки — результаты прямого численного моделирования при  $\mathrm{Pr}=5.5,\ \mathrm{B}=10^3,\ l=1$ 

зовались периодические по горизонтали граничные условия на длине ячейки L=2 (или  $L=2\pi/k_{min}$ ), соответствующей минимальному волновому числу  $(k_{min} \sim \pi)$  для следующего набора параметров: (Pr = 5.5, Le =  $1.5 \cdot 10^{-4}$ , l=1, p=8 и  $\varphi_0=0.1$ ), а также сетка  $129 \times 65$ .

В качестве начальных условий задавалось линейное распределение температуры и распределение концентрации  $\varphi_s(z)$  при наличии оседания частиц. Решение уравнения (19) для  $\varphi_s(z)$  находилось численно.

Пороги конвективной устойчивости, полученные в ходе линейного анализа (штриховая линия на рис. 3a) и в результате расчета с помощью конечно-разностной схемы (точки на рис. 3a), хорошо согласуются.





**Рис. 4.** Зависимости от t a) функции тока в фиксированной точке слоя,  $\delta$ ) координаты максимума функции тока при формировании бегущей волны  $B=10^3,~R=2220,~Pr=5.5,~Le=1.5\cdot 10^{-4},~\varphi_0=0.1,~p=8$ 

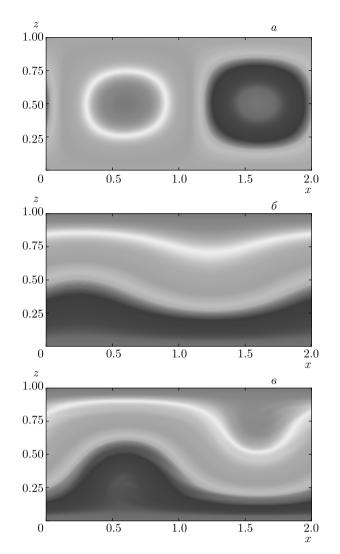
Зависимости от времени локального значения функции тока  $\Psi = \psi_{loc}$  в точке с координатами (x =z = 1/4, z = 1/2) и координаты максимального значения функции тока приведены на рис. 4 при фиксированном наборе параметров. Возникновение неустойчивости начинается ростом колебательных возмущений. На начальном интервале роста возмущений (t < 0.5) координата максимума скачком изменяется между значениями  $x_{max} = 1.5$  и  $x_{max} = 0.5$ , что соответствует стоячей волне (SW, standing wave), которая с течением времени увеличивает амплитуду (рис. 4a). Затем (в интервале 0.5 < t < 15.0) стоячая волна в результате переходного процесса трансформируется в бегущую волну (TW, traveling wave). При этом сквозное горизонтальное движение конвективных валов через всю ячейку появляется при  $t \approx 1.0$  и становится явно заметно на графиках  $x_{max}(t)$  (рис. 46). Фазовая скорость волны соответствует тангенсу угла наклона графика  $x_{max}(t)$ . Переход от стоячей волны к бегущей происходит последовательно через 1) смешанное состояние (1.5 < t < 5.0), в котором присутствуют фазы бегущей и стоячей волн (горизонтальные части графика  $x_{max}(t)$ ), и далее 2) модулированную бегущую волну (5.0 < t < 15.0). Изначально сформировавшаяся бегущая волна (рис. 46,  $t \approx 5.0$ ) сильно модулирована по фазе, затем глубина модуляции уменьшается до нуля и скорость TW становится постоянной (t > 15.0). Во время всего переходного процесса амплитуда функции тока в фиксированной точке немонотонно растет, достигая постоянного значения в режиме бегущей волны ( $\Psi = 1.05$ ).

Структуры полей функции тока, температуры и концентрации в бегущей волне приведены на рис. 5.

Структуры полей функции тока и температуры, хорошо описывающихся первой пространственной гармоникой, такие же, как в случае устойчивого режима сильно нелинейных бегущих волн (strong nonlinear traveling wave, SN TW), наблюдаемых в молекулярных жидкостях [22] и идеальных коллоидных суспензиях [9]. При этом структура поля концентрации в нашем случае, также хорошо описывающаяся первой пространственной гармоникой, значительно отличается от структуры в режиме SN TW, когда распределение примеси характеризуется сильным пространственным ангармонизмом, а зависимость распределения концентрации от горизонтальной координаты на середине высоты слоя имеет трапецеидальную форму: чередование постоянных высокой и низкой концентраций в ядрах конвективных валов и резкие переходы в узких пограничных слоях. Относительные величины амплитуд нескольких первых пространственных гармоник в распределении полей функции тока и концентрации на различных высотах в слое представлены на рис. 6, который подтверждает сделанный выше вывод о структуре полей функции тока и концентрации. Отметим, что качественных изменений в эволюции течения от режима стоячей волны к бегущей в нашем случае, учитывающем взаимодействие частиц, и в режиме SN TW не наблюдается.

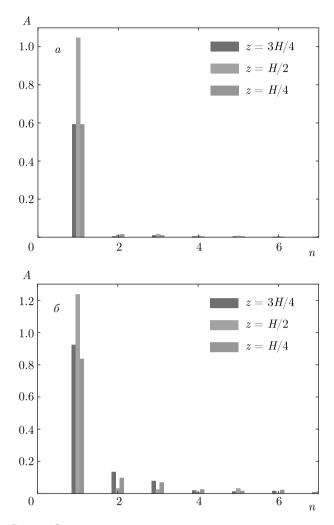
### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен анализ линейной устойчивости и исследована нелинейная эволюция стратифицированной коллоидной суспензии в плоском горизонтальном слое при нагреве снизу при учете зависимости диффузии и гравитационного оседания от концент-



**Рис. 5.** Поля функции тока (a), температуры  $(\delta)$ , концентрации (e) в режиме бегущей волны.  $B=10^3$ , R=2220, Pr=5.5, l=1, p=8,  $\varphi_0=0.1$ ,  $Le=1.5\cdot 10^{-4}$ 

рации частиц при условии взаимодействия частиц. Показано, что несмотря на значительную неоднородность плотности приближение Буссинеска остается справедливым благодаря медленности диффузионных процессов. Получены зависимости порога устойчивости состояния механического равновесия, частоты нейтральных колебаний и критического волнового числа от среднего значения концентрации примеси. Наличие взаимодействия наночастиц и, соответственно, учет нелинейных слагаемых в потоке транспорта наночастиц: диффузии и седиментации в поле тяжести, приводит к понижению среднего градиента концентрации и снижению порога конвективной устойчивости и частоты нейтральных колебаний по сравнению



**Рис. 6.** Относительные амплитуды пространственных гармоник в различных горизонтальных разрезах конвективной ячейки z для полей функции тока (a) и концентрации  $(\delta)$ . В  $=10^3$ , R =2220, Pr =5.5, l=1,p=8,  $\varphi_0=0.1$ , Le  $=1.5\cdot 10^{-4}$ 

с идеальным раствором. Порог устойчивости, предсказанный теорией в отсутствие учета взаимодействия частиц примеси [8], в случае больших средних объемных концентраций может быть сильно завышен. Методом конечных разностей проведено прямое численное моделирование течений, формирующихся вблизи порога устойчивости механического равновесия. Показано, что в результате эволюции формируется бегущая волна, со слабонелинейной пространственной структурой поля концентрации.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-01-00491).

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 6, *Гидродинамика*, Наука, Москва (1986).
- 2. Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкий, Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости, Наука, Москва (1972).
- **3**. И. Г. Шапошников, ЖЭТФ **21**, 1309 (1951).
- 4. J. K. Platten and J. C. Legros, *Convection in Fluids*, Springer-Verlag, Berlin (1984).
- 5. Г. Ф. Путин, в сб. Материалы 11-го Рижского совещания по магнитной гидродинамике, Рига (1984), т. 3, с. 15.
- G. Donzelli, R. Cerbino, and A. Vailati, Phys. Rev. Lett. 102, 104503 (2009).
- F. Winkel, S. Messlinger, W. Schöpfet et al., New J. Phys. 12, 053003 (2010).
- M. I. Shliomis and B. L. Smorodin, Phys. Rev. E 71, 036312 (2005).
- B. L. Smorodin, I. N. Cherepanov, B. I. Myznikova et al., Phys. Rev. E 84, 026305 (2011).
- **10**. И. Н. Черепанов, В. А. Попов, Вестник Пермского университета. Серия: физика **2**, 26 (2017).

- 11. S. Buzzaccaro, A. Tripodi, R. Rusconi et al., J. Phys.: Condens. Matter 20, 494219 (2008).
- I. N. Cherepanov and P. V. Krauzin, Physica A 540, 123247 (2020).
- **13**. И. Н. Черепанов, Б. Л. Смородин, Вестник Пермского университета. Серия: физика **1**, 26 (2019).
- 14. G. K. Batchelor, J. Fluid Mech. 74, 1 (1976).
- **15**. Ю. А. Буевич, А. Ю. Зубарев, А. О. Иванов, Магнитная гидродинамика **25**(2), 39 (1989).
- 16. A. F. Pshenichnikov and A. S. Ivanov, Phys. Rev. E 86, 051401 (2012).
- **17**. И. Н. Черепанов, П. В. Краузин, ПМТФ **6**, 35 (2019).
- 18. M. Mason and W. Weaver, Phys. Rev. 2, 412 (1924).
- **19**. И. Н. Черепанов, Б. Л. Смородин, ЖЭТФ **152**, 1404 (2017).
- П. Роуч, Вычислительная гидродинамика, Мир, Москва (1980).
- I. N. Cherepanov, J. Appl. Mech. Techn. Phys. 58, 1181 (2017).
- M. Lücke, W. Barten, and M. Kamps, Physica D 61, 183 (1992).

# К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала http://jetp.ac.ru/

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

## К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

- 1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.
- 2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.
- 3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).
  - 4. Редакция принимает статьи:
- a) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;
- б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);
- в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).
- В электронном варианте текст должен быть представлен в формате IATEX или Word, рисунки в формате PostScript (\*.ps) или EncapsulatedPostScript (\*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате рѕ или pdf.
- 5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не у́же 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать  $P_{\rm opt}$ , а не  $P_{\rm ont}$ . Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

- 6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:
  - 1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
  - 2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
  - R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A 18, 1632 (1978).
  - 4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
  - К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. Тез. докл. *X Всесоюзн. конф. по физике низких темпе- ратур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
  - M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

- 7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № P-16-22 (1987).
- 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
- A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.
- 7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тек-

- сте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
- 8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде \*.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
- 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

## Главный редактор $A. \, \Phi. \, AHДРЕЕВ$

#### Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,

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

## Редакционный совет:

в Великобритании), акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

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

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова