

Журнал основан в 1918 г.

УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ
ТАВРИЧЕСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО
УНИВЕРСИТЕТА им. В. И. ВЕРНАДСКОГО

Научный журнал

Серия "Физико-математические науки"

Том 23(62), № 3.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского
Симферополь, 2010

Редакционный совет журнала
«Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского»:

1. Багров Н.В. – д. г. н., проф., академик НАН Украины, (главный редактор)
2. Шульгин В.Ф. – д. хим. н., проф. (зам. главного редактора)
3. Дзедолик И.В. – д. ф.-м. н., доц. (отв. секретарь)

Члены Совета (редакторы серий и разделов серий):

- | | |
|--|--|
| 1. Бержанский В.Н. – д. ф.-м. н., проф. | 7. Копачевский Н.Д. – д. ф.-м. н., проф. |
| 2. Богданович Г.Ю. – д. филол. н., проф. | 8. Подсолонко В.А. – д. э. н., проф. |
| 3. Вахрушев Б.А. – д. г. н., проф. | 9. Ротань В.Г. – д. ю. н., проф. |
| 4. Гришковец В.И. – д. х. н., проф. | 10. Темурьянц Н.А. – д. б. н., проф. |
| 5. Казарин В.П. – д. филол. н., проф. | 11. Шоркин А.Д. – д. филос. н., проф. |
| 6. Климчук С.В. – д. э. н., доц. | 12. Юрченко С.В. – д. полит. н., проф. |

Редакционная коллегия серии «Физико-математические науки»

Раздел «Физика»:

Арифов Л.Я – д. ф.-м. н., проф.
Бержанский В.Н. – д. ф.-м. н., проф.,
(редактор серии, редактор раздела «Физика»),
(berj@pop.cris.net)
Воляр А.В. – д. ф.-м. н., проф.
Дзедолик И.В. – д. ф.-м. н., доц.
Полулях С.Н. – д. ф.-м. н., доц.
Пономаренко В.И. – д. ф.-м. н., проф.
Стругацкий М.Б. – д. ф.-м. н., доц.
Терез Э.И. – д. т. н., проф.
Фридман Ю.А. – д. ф.-м. н., проф.
Яценко А.В. – д. ф.-м. н., доц.

Раздел «Математика»:

Анашкин О.В. – д. ф.-м. н., доц.
Белан Е.П. – д. ф.-м. н., проф.
Донской В.И. – д. ф.-м. н., проф.
Копачевский Н.Д. – д. ф.-м. н., проф. (редактор
раздела «Математика»), (kopachevsky@list.ru)
Муратов М.А. – д. ф.-м. н., проф.
Орлов И.В. – д. ф.-м. н., проф.
Рудницкий О.И. – к. ф.-м. н., доц.
Самойленко Ю.С. – д. ф.-м. н., проф., чл.-корр.
НАНУ
Старков П.А. – к. ф.-м. н., доц. (отв. секретарь)
Чехов В.Н. – д. ф.-м. н., проф.

**Печатается по решению Ученого совета Таврического национального университета
им. В.И. Вернадского, протокол № 12 от 22.12. 2010 г.**

Подписано в печать 22.12.2010 формат 70х100/16
5,2 усл. п. л. 8,8 уч.-изд. л. Тираж 500. Заказ №47.
Отпечатано в информационно-издательском отделе ТНУ.
пр. Вернадского 4, г. Симферополь, 95007

«Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського»

Науковий журнал. Том 23(62). № 3, Фізико-математичні науки.
Сімферополь, Таврійський національний університет ім. В.І. Вернадського, 2010
Журнал заснований у 1918 р.
Адреса редакції: пр. Вернадського, 4, м. Сімферополь, 95007
Надруковано у інформаційно-видавничому відділі Таврійського національного університету
ім. В.І. Вернадського. пр. Вернадського, 4, м. Сімферополь, 95007
<http://science.crimea.edu/zapiski/zapis.html>

УДК 539.391+514.764.2

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ ДЛЯ «РАЗМАЗАННОЙ» НУЛЬ-СТРУНЫ ПОСТОЯННОГО РАДИУСА

Леяков А.П.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: lelyakov@tnu.crimea.ua*

В работе предложен общий вид распределения потенциала безмассового вещественного скалярного поля для «размазанной» нуль-струны постоянного радиуса, которая движется вдоль оси z и в каждый момент времени полностью лежит в плоскости, ортогональной этой оси. Найдены условия на потенциал скалярного поля, при которых, в пределе сжатия скалярного поля в одномерный объект (окружность радиуса R), компоненты тензора энергии-импульса скалярного поля асимптотически совпадают с компонентами тензора энергии-импульса замкнутой нуль-струны того же радиуса.

Ключевые слова: нуль-струна, скалярное поле, космология.

ВВЕДЕНИЕ

Струнные теории уже ни одно десятилетие находятся в состоянии неуклонного поступательного развития. Несмотря на проблемы, неизбежные для любой развивающейся теории, они очаровывают как уже известными результатами, так и большими возможностями в перспективе. Интерес к космическим струнам и другим топологическим решениям инициирован, с одной стороны, той ролью, которую топологические дефекты, возможно, играют в процессе эволюции Вселенной, например, струнные механизмы образования первичных неоднородностей плотности вещества в ранней Вселенной, идеи о топологической инфляции, а с другой, тем, что по своим физическим свойствам эти объекты отличаются от обычной материи [1-3].

Основной трудностью, с которой сталкиваются при исследовании гравитационного поля, порождаемого струной, является сингулярность тензора энергии-импульса, компоненты которого вне струны тождественно равны нулю, а отличны от нуля (стремятся к бесконечности) непосредственно на струне. В этом случае исследовать систему уравнений Эйнштейна можно в двух направлениях:

- ограничиться анализом «внешней» задачи, т.е. в области, для которой компоненты тензора энергии-импульса нуль-струны равны нулю,
- рассматривать компоненты струнного тензора энергии-импульса как предел некоторого «размазанного» распределения и провести анализ уравнений Эйнштейна для этого «размазанного» распределения.

Как было показано в работе [4] анализ «внешней» задачи приводит к большому числу вакуумных решений уравнений Эйнштейна, удовлетворяющих симметриям рассматриваемой задачи. Однако неясны критерии, позволяющие выбрать из этой совокупности единственное решение, описывающее гравитационное поле нуль-струны, движущейся по заданной траектории.

Рассматривая компоненты струнного тензора энергии-импульса как предел некоторого «размазанного» распределения возможны неточности, связанные с тем, что непонятно как учитывать возможное появление слагаемых (множителей), которые стремятся к нулю (константе) при стягивании этого «размазанного» распределения в одномерный объект. Поэтому было предложено изначально рассматривать некоторое «хорошо определенное» «размазанное» распределение, а затем стянуть его в струну требуемой конфигурации.

Целью работы является построение общего выражения для распределения потенциала вещественного безмассового скалярного поля, компоненты тензора энергии-импульса для которого в пределе сжатия в окружность радиуса R , асимптотически совпадают с компонентами нуль-струнного тензора энергии-импульса.

1. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ЭЙНШТЕЙНА ДЛЯ «РАЗМАЗАННОЙ» ЗАДАЧИ

В цилиндрической системе координат $(x^0=t, x^1=\rho, x^2=\theta, x^3=z)$ функции $x^m(\tau, \sigma)$ ($m=0,1,2,3$), определяющие траекторию движения замкнутой нуль-струны постоянного (неизменного со временем) радиуса R , которая движется вдоль оси z и в каждый момент времени полностью лежит в плоскости, ортогональной этой оси, имеют следующий вид:

$$t = \tau, \quad \rho = R = \text{const.}, \quad \theta = \sigma, \quad z = -\tau,$$

где τ и σ параметры на мировой поверхности нуль-струны. Используя результаты работ [4,5], квадратичную форму для решаемой задачи можно представить в следующем виде

$$dS^2 = e^{2\nu} \left((dt)^2 - (dz)^2 \right) - A(d\rho)^2 - B(d\theta)^2, \quad (1)$$

где $\nu = \nu(q, \rho)$, $A = A(q, \rho)$, $B = B(q, \rho)$, $q = t + z$. Тензор энергии-импульса для вещественного безмассового скалярного поля имеет вид [2]

$$T_{\alpha\beta} = \varphi_{,\alpha} \varphi_{,\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} L, \quad (2)$$

где $L = g^{\omega\lambda} \varphi_{,\omega} \varphi_{,\lambda}$, $\varphi_{,\alpha} = \partial\varphi/\partial\alpha$, φ -потенциал скалярного поля, индексы $\alpha, \beta, \omega, \lambda$ принимают значения 0,1,2,3. Для того, чтобы обеспечить самосогласованность уравнений Эйнштейна и тензора (2), будем требовать

$$T_{\alpha\beta} = T_{\alpha\beta}(q, \rho) \rightarrow \varphi = \varphi(q, \rho). \quad (3)$$

Расписывая (2) для квадратичной формы (1), получаем

$$\begin{aligned} T_{00} &= (\varphi_{,q})^2 + \frac{e^{2\nu}}{2A} (\varphi_{,\rho})^2, \quad T_{33} = (\varphi_{,q})^2 - \frac{e^{2\nu}}{2A} (\varphi_{,\rho})^2, \quad T_{11} = \frac{1}{2} (\varphi_{,\rho})^2, \\ T_{01} &= T_{13} = \varphi_{,q} \varphi_{,\rho}, \quad T_{03} = (\varphi_{,q})^2, \quad T_{22} = -\frac{1}{2} \frac{B}{A} (\varphi_{,\rho})^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Система уравнений Эйнштейна для (1), (4) может быть представлена в следующем

виде

$$2v_{,\rho\rho} + 3(v_{,\rho})^2 - v_{,\rho} \frac{A_{,\rho}}{A} = -\frac{\chi}{2}(\varphi_{,\rho})^2, \quad (5)$$

$$(v_{,\rho})^2 + v_{,\rho} \frac{B_{,\rho}}{B} = \frac{\chi}{2}(\varphi_{,\rho})^2, \quad (6)$$

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{A_{,qq}}{A} + \frac{B_{,qq}}{B}\right) + v_{,q}\left(\frac{A_{,q}}{A} + \frac{B_{,q}}{B}\right) + \frac{1}{4}\left(\left(\frac{A_{,q}}{A}\right)^2 + \left(\frac{B_{,q}}{B}\right)^2\right) = \chi(\varphi_{,q})^2, \quad (7)$$

$$2v_{,\rho\rho} + 2(v_{,\rho})^2 + \frac{B_{,\rho\rho}}{B} - \frac{1}{2}\left(\frac{B_{,\rho}}{B}\right)^2 + \quad (8)$$

$$+ v_{,\rho}\left(\frac{B_{,\rho}}{B} - \frac{A_{,\rho}}{A}\right) - \frac{1}{2}\frac{A_{,\rho}}{A}\frac{B_{,\rho}}{B} = -\chi(\varphi_{,\rho})^2,$$

$$-\frac{1}{2}\frac{B_{,q\rho}}{B} - v_{,q\rho} + \frac{1}{2}v_{,\rho}\left(\frac{A_{,q}}{A} + \frac{B_{,q}}{B}\right) + \frac{1}{4}\frac{B_{,\rho}}{B}\left(\frac{A_{,q}}{A} + \frac{B_{,q}}{B}\right) = \chi\varphi_{,q}\varphi_{,\rho}. \quad (9)$$

Если рассматривать полученную систему уравнений для распределения скалярного поля, сконцентрированного внутри «тонкого» кольца, для которого переменные q и ρ изменяются в пределах

$$q \in [-\Delta q, +\Delta q], \quad \rho \in [R - \Delta\rho, R + \Delta\rho], \quad (10)$$

где R радиус замкнутой нуль струны, Δq и $\Delta\rho$ малые положительные константы, определяющие «толщину» кольца, т.е.

$$\Delta q \ll 1, \quad \Delta\rho \ll 1. \quad (11)$$

То в пределе сжатия такого «тонкого» кольца в одномерный объект (нуль-струну)

$$\Delta q \rightarrow 0, \quad \Delta\rho \rightarrow 0. \quad (12)$$

В этом случае пространство-время, в котором движется такая «размазанная» нуль-струна, условно можно разбить на три области

- область I, для которой (рис. 1)

$$q \in (-\infty, -\Delta q) \cup (+\Delta q, +\infty), \quad \rho \in [0, +\infty), \quad (13)$$

- область II, для которой

$$q \in [-\Delta q, +\Delta q], \quad \rho \in [0, R - \Delta\rho) \cup (R + \Delta\rho, +\infty), \quad (14)$$

- область III (выделенная на рис. 1 черным цветом), для которой

$$q \in [-\Delta q, +\Delta q], \quad \rho \in [R - \Delta\rho, R + \Delta\rho]. \quad (15)$$

Поскольку скалярное поле сконцентрировано внутри «тонкого» кольца, то в области I, II (рис. 1) потенциал скалярного поля равен нулю, а в области III (внутри «тонкого» кольца) $\varphi \neq 0$.

При стягивании скалярного поля в струну система уравнений (5)-(9) должна асимптотически стремиться к системе уравнений Эйнштейна, построенной для замкнутой нуль-струны и приведенной в работах [4, 5]. Тогда в области (13), (14) (область I и II (рис. 1))

$$\varphi = 0, \quad \varphi_{,\rho} = 0, \quad \varphi_{,q} = 0, \quad (16)$$

а в области (15) (внутри «тонкого» кольца) в общем случае

$$\varphi \neq 0, \quad \varphi_{,\rho} \neq 0, \quad \varphi_{,q} \neq 0. \quad (17)$$

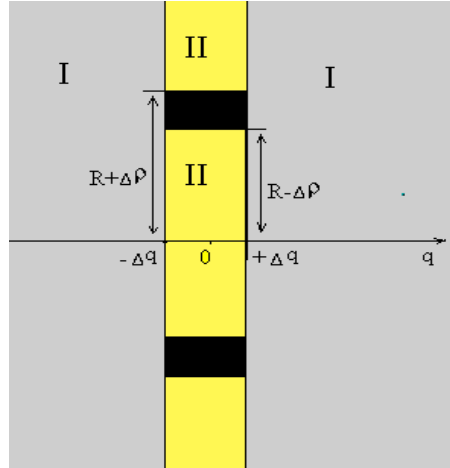


Рис. 1. На рисунке схематично представлено сечение пространства плоскостью $\theta = const.$ и условное разбиение внешнего пространства-времени на три области (область III выделена на рисунке черным цветом).

Сравнивая систему уравнений Эйнштейна для замкнутой нуль струны [4] с системой (5)-(9), можно сделать вывод о том, что при стягивании скалярного поля в струну требуемой конфигурации, т.е. при $\Delta q \rightarrow 0, \Delta \rho \rightarrow 0$

$$\left(\varphi_{,\rho} \right)^2 \Big|_{q=0, \rho=R} \rightarrow 0, \quad \left(\varphi_{,q} \right)^2 \Big|_{q=0, \rho=R} \rightarrow \infty, \quad \left(\varphi_{,q} \varphi_{,\rho} \right) \Big|_{q=0, \rho=R} \rightarrow 0. \quad (18)$$

В области I, согласно (16), при любом фиксированном значении переменной $q = q_0 \in (-\infty, -\Delta q) \cup (+\Delta q, +\infty)$ и для всех значений переменной $\rho \in [0, +\infty)$ потенциал скалярного поля

$$\varphi(q_0, \rho) = 0, \quad (19)$$

если же рассматривать распределение потенциала скалярного поля при любом фиксированном значении переменной $q = q_0 \in (-\Delta q, +\Delta q)$ (область II и III), то в случае, когда переменная $\rho \in [0, R - \Delta \rho) \cup (R + \Delta \rho, +\infty)$ (область II), должно быть выполнено

$$\varphi(q_0, \rho) = 0, \quad (20)$$

а при $\rho \in (R - \Delta\rho, R + \Delta\rho)$ (область III)

$$\varphi(q_0, \rho) \neq 0. \quad (21)$$

Поскольку при одном и том же значении переменной $q_0 \in (-\Delta q, +\Delta q)$ и фиксированном значении переменной ρ значения, принимаемые потенциалом скалярного поля, совпадают, то для выполнения (20), (21) необходимо требовать, чтобы для $\rho \in [0, +\infty)$ значения $\varphi(q, \rho)$ были различны.

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ ДЛЯ «РАЗМАЗАННОЙ» НУЛЬ-СТРУНЫ

Для полученных условий (19)-(21) распределение потенциала скалярного поля удобно представить в виде

$$\varphi(q, \rho) = -\ln(\alpha(q) + \lambda(q)f(\rho)), \quad (22)$$

где функции $\alpha(q)$ и $\lambda(q)$ симметричны относительно инверсии q на $-q$, т.е.

$$\alpha(q) = \alpha(-q), \quad \lambda(q) = \lambda(-q), \quad (23)$$

функция $\alpha(q) + \lambda(q)f(\rho)$ ограничена

$$0 < \alpha(q) + \lambda(q)f(\rho) \leq 1, \quad (24)$$

а потенциал скалярного поля (22) в области (24) может принимать значения от

$$\varphi = 0, \text{ при } \alpha(q) + \lambda(q)f(\rho) = 1, \quad (25)$$

и до

$$\varphi \rightarrow \infty, \text{ при } \alpha(q) + \lambda(q)f(\rho) \rightarrow 0, \quad (26)$$

причем, в области I, в соответствии с (19), (25),

$$\alpha(q) = 1, \quad \lambda(q) = 0. \quad (27)$$

Поскольку согласно (20) потенциал скалярного поля в области II равен нулю, то при $q \in (-\Delta q, +\Delta q)$ и любом фиксированном значении переменной $\rho = \rho_0 \in [0, R - \Delta\rho) \cup (R + \Delta\rho, +\infty)$, должно быть выполнено

$$\alpha(q) + \lambda(q)f(\rho_0) = 1. \quad (28)$$

В области III $\varphi \neq 0$, поэтому для тех же значениях $q \in (-\Delta q, +\Delta q)$ и при $\rho = \rho_0 \in (R - \Delta\rho, R + \Delta\rho)$

$$0 < \alpha(q) + \lambda(q)f(\rho_0) < 1. \quad (29)$$

Из (28) следует, что при всех $\rho \in [0, R - \Delta\rho) \cup (R + \Delta\rho, +\infty)$ значения функции $f(\rho)$ постоянны

$$f(\rho)|_{\rho \in [0, R - \Delta\rho) \cup (R + \Delta\rho, +\infty)} = f_0 = \text{const.}, \quad (30)$$

причем $f_0 \neq 0$, а функции $\alpha(q)$ и $\lambda(q)$ связаны между собой

$$\lambda(q) = (1 - \alpha(q)) / f_0. \quad (31)$$

Подставляя (31) в (29), получаем, что в области III ($q \neq 0$)

$$0 < \alpha(q) + (1 - \alpha(q)) f(\rho) / f_0 < 1, \quad (32)$$

тогда из (26), (32) следует, что при $q \rightarrow 0$

$$\alpha(q) \rightarrow 0, \quad f(\rho) \rightarrow 0. \quad (33)$$

Таким образом, в выражении для потенциала скалярного поля (22) функции $\alpha(q)$ и $f(\rho)$ ограниченные и для всех $q \in (-\infty, +\infty)$ и $\rho \in [0, +\infty)$ принимают значения

$$0 \leq \alpha(q) \leq 1, \quad 0 \leq f(\rho) \leq f_0, \quad (34)$$

причем в области I, согласно (27), функция $\alpha(q)$

$$\alpha(q) \Big|_{q \in (-\infty, -\Delta q) \cup (+\Delta q, +\infty)} = 1, \quad (35)$$

а из (33), с учетом симметричности функции $\alpha(q)$ (равенства (23)), следует

$$\lim_{q \rightarrow 0} \alpha(q) \rightarrow 0. \quad (36)$$

Поведение функция $f(\rho)$ при $\rho \in [0, R - \Delta\rho) \cup (R + \Delta\rho, +\infty)$ определяется равенством (30), а при $\rho \rightarrow R$ согласно (33)

$$f(\rho) \Big|_{\rho \rightarrow R} \rightarrow 0. \quad (37)$$

Дифференцируя (23), с учетом (31), по переменным q и ρ , получаем

$$\varphi_{,q} = -\frac{\alpha_{,q} (1 - f(\rho) / f_0)}{\alpha(q) + (1 - \alpha(q)) f(\rho) / f_0}, \quad \varphi_{,\rho} = -\frac{(1 - \alpha(q)) f_{,\rho} / f_0}{\alpha(q) + (1 - \alpha(q)) f(\rho) / f_0}. \quad (38)$$

Подставляя (27), (28), (30) в (38), получаем, что в области I и II $\varphi_{,\rho} = 0$, $\varphi_{,q} = 0$, что согласуется с (16). В области III (Рис.1) при $\rho \rightarrow R$, с учетом (37), первое из равенств (38) можно представить в виде

$$\varphi_{,q} = -\alpha_{,q} / \alpha(q), \quad (39)$$

откуда, согласно (18), при $\Delta q \rightarrow 0$, $\Delta\rho \rightarrow 0$

$$\left| \alpha_{,q} / \alpha(q) \right|_{q=0} \rightarrow \infty. \quad (40)$$

Второе из равенств (38) при $q \rightarrow 0$, с учетом (36), можно представить в виде

$$\varphi_{,\rho} = -f_{,\rho} / f(\rho), \quad (41)$$

откуда при $\Delta q \rightarrow 0$, $\Delta\rho \rightarrow 0$, согласно (18)

$$f_{,\rho} / f(\rho) \Big|_{\rho=R} \rightarrow 0. \quad (42)$$

С другой стороны, рассматривая равенства (38) в некоторой малой окрестности

окружности $q = 0$, $\rho = R$, т.е. внутри области, в которой сконцентрировано скалярное поле и для которой, в соответствии с (36), (37) $f(\rho)/f_0 \ll 1$, $\alpha(q) \ll 1$, можно записать

$$\varphi_{,q}\varphi_{,\rho} = \left(\alpha_{,q}/\alpha(q) \right) / \left(1 + \frac{1}{f_0} \frac{f(\rho)}{\alpha(q)} \right) \times \left(f_{,\rho}/f(\rho) \right) / \left(f_0 \frac{\alpha(q)}{f(\rho)} + 1 \right), \quad (43)$$

тогда, согласно (18) при $\Delta q \rightarrow 0$, $\Delta \rho \rightarrow 0$, должно быть выполнено

$$\left(\alpha_{,q}/\alpha(q) \right) \times \left(f_{,\rho}/f(\rho) \right) \Big|_{q=0, \rho=R} \rightarrow 0. \quad (44)$$

В качестве примера можно привести следующий выбор функций $\alpha(q)$ и $f(\rho)$, удовлетворяющих найденным условиям

$$\alpha(q) = \exp\left(-1/(\xi q)^2\right), \quad f(\rho) = f_0 \exp\left(-\mu \left(1 - \exp\left(\frac{-1}{(\varsigma(\rho-R))^2}\right)\right)\right), \quad (45)$$

где константы ξ и ς определяют размер («толщину») кольца, внутри которого сконцентрировано скалярное поле соответственно, по переменным q и ρ , а именно, как следует из (45) при $\Delta q \rightarrow 0$, $\Delta \rho \rightarrow 0$

$$\xi \rightarrow \infty, \quad \varsigma \rightarrow \infty, \quad (46)$$

а положительная константа μ обеспечивает выполнение асимптотического условия (37), при $\rho = R$. Используя (31), (45) для (22), получаем выражение одного из возможных распределений потенциала безмассового вещественного скалярного поля,

$$\varphi(q, \rho) = -\ln \left(\exp\left(-1/(\xi q)^2\right) + \left(1 - \exp\left(-1/(\xi q)^2\right)\right) \times \exp\left(-\mu \left(1 - \exp\left(\frac{-1}{(\varsigma(\rho-R))^2}\right)\right)\right) \right), \quad (47)$$

компоненты тензора энергии-импульса, для которого в пределе сжатия в одномерный объект (окружность радиуса R) асимптотически совпадают с компонентами тензора энергии-импульса замкнутой нуль-струны того же радиуса.

На рис. 2 представлено распределение функции $\alpha(q) + (1 - \alpha(q))f(\rho)/f_0$ в области $q \in [-10, 10]$, $\rho \in [0, 10]$, для функций $\alpha(q)$, $f(\rho)$, заданных равенствами (45) при $R = 5$, и соответствуют выбору значений констант: а) $\xi = \varsigma = \mu = 1$, б) $\xi = \varsigma = \mu = 4$. Из представленного рисунка видно, что с увеличением значений констант ξ , ς , область, в которой функция $\alpha(q) + (1 - \alpha(q))f(\rho)/f_0$ отлична от единицы (т.е. область, в которой сконцентрировано скалярное поле и потенциал скалярного поля, отличен от нуля) сжимается, чему соответствует уменьшение «толщины» кольца, в котором сконцентрировано скалярное поле.

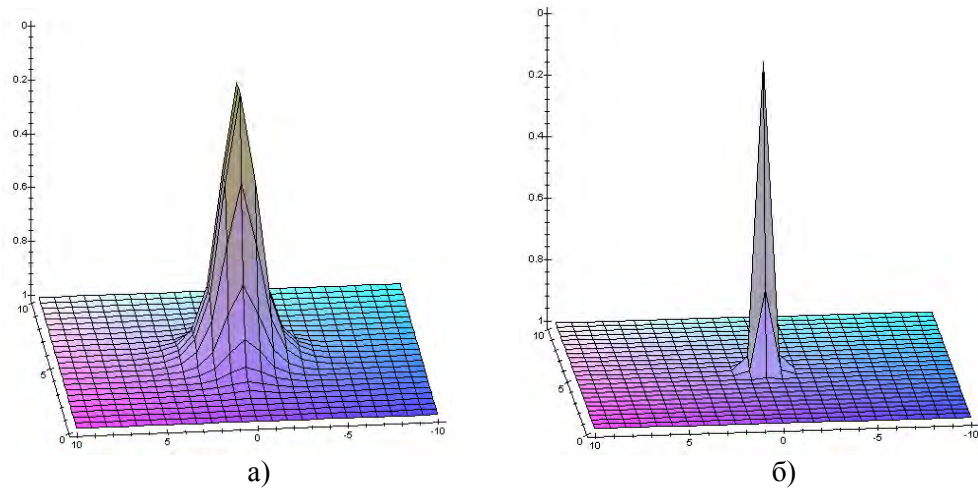


Рис. 2. Распределение функции $\alpha(q) + (1 - \alpha(q))f(\rho)/f_0$, определяемой (45) для $R = 5$, $q \in [-10, 10]$, $\rho \in [0, 10]$, при: а) $\xi = \zeta = \mu = 1$ и б) $\xi = \zeta = \mu = 4$.

На рис. 3 для $R = 5$, $\xi = 1$, $\mu = 3$ представлено изменение распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) по переменной ρ ($\rho \in [0, 10]$) при фиксированном значении переменной $q = 0.01$, и соответствуют выбору значений константы ζ : а) $\zeta = 0.2$, б) $\zeta = 0.3$, в) $\zeta = 0.4$. Здесь черным цветом выделена область, в которой $\varphi = 0$. Из рисунка видно, что с увеличением значений константы ζ область, в которой потенциал скалярного поля (47) отличен от нуля, сжимается, чему соответствует уменьшение по переменной ρ «толщины» кольца, в котором сконцентрировано скалярное поле.

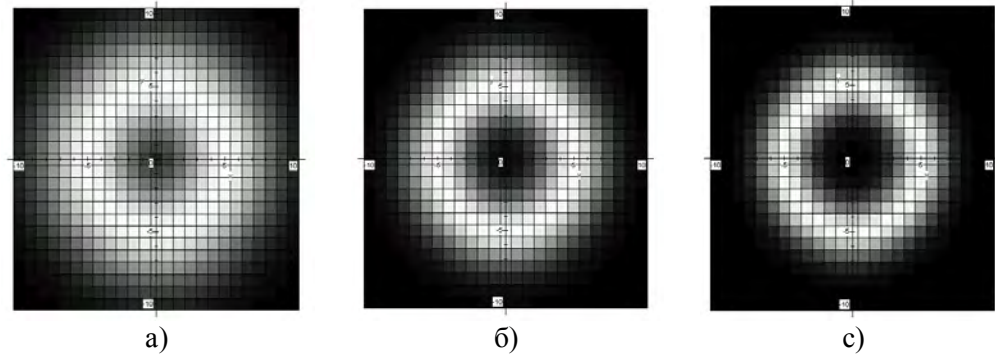


Рис. 3. На рисунках для $R = 5$, $\xi = 1$, $\mu = 3$, $q = 0.01$ представлены распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) по переменной ρ ($\rho \in [0, 10]$), при: а) $\zeta = 0.2$, б) $\zeta = 0.3$, в) $\zeta = 0.4$.

На рис. 4 представлено изменение распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) на гиперповерхностях а) $q = 0.2$, б) $q = 0.3$, в) $q = 0.4$, которые соответствуют выбору значений констант $R = 5$, $\xi = 3$, $\mu = 3$, $\varsigma = 0.7$. Здесь так же черным цветом выделена область, в которой $\varphi = 0$, а изменению интенсивности от белого цвета (рис. 4, а, при $q = 0.2$) до темно серого (рис. 4, с, при $q = 0.4$) соответствует стремление потенциала (47) к нулю при $q \rightarrow \Delta q$.

На рис. 5 представлены распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) на поверхности $\theta = const.$ и которые соответствуют выбору значений констант: а) $\xi = 0.5$, $\varsigma = 0.2$, $\mu = 1$, б) $\xi = 0.6$, $\varsigma = 0.3$, $\mu = 1.1$, с) $\xi = 0.8$, $\varsigma = 0.4$, $\mu = 1.2$, при $R = 5$ $q \in [-10, 10]$, $\rho \in [0, 10]$.

Из рисунка видно, что с увеличением значений констант ξ , ς , μ область, в которой потенциал скалярного поля отличен от нуля, сжимается, т.е. уменьшается «толщина» кольца, в котором сконцентрировано скалярное поле.

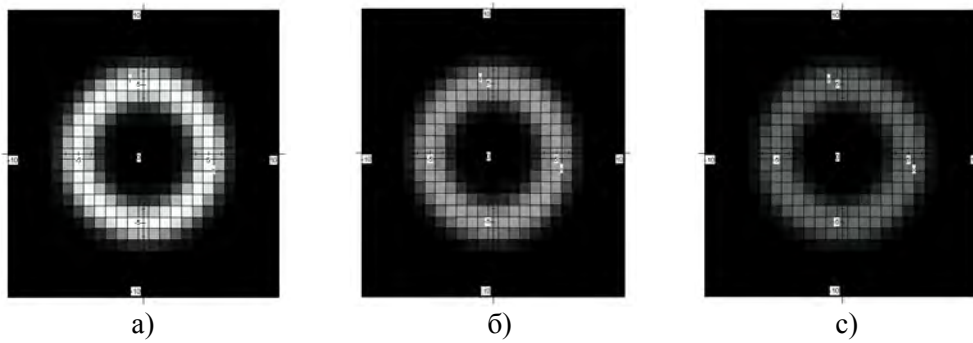


Рис. 4. На рисунках а, б, с, для $R = 5$, $\xi = 3$, $\mu = 3$, $\varsigma = 0.7$ представлено изменение распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) на гиперповерхностях: а) $q = 0.2$, б) $q = 0.3$, с) $q = 0.4$.

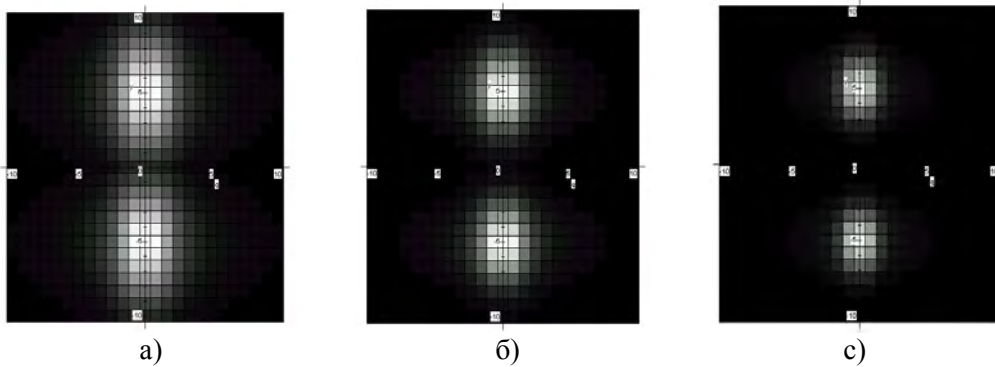


Рис. 5. На рисунках а, б, с, представлено распределения потенциала скалярного поля, задаваемого (47) на поверхности $\theta = const.$, $q \in [-10, 10]$, $\rho \in [0, 10]$ для $R = 5$ при: а) $\xi = 0.5$, $\varsigma = 0.2$, $\mu = 1$, б) $\xi = 0.6$, $\varsigma = 0.3$, $\mu = 1.1$, с) $\xi = 0.8$, $\varsigma = 0.4$, $\mu = 1.2$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен общий вид распределения потенциала безмассового вещественного скалярного поля для «размазанной» нуль-струны постоянного радиуса, которая движется вдоль оси z и в каждый момент времени полностью лежит в плоскости, ортогональной этой оси. Найдены условия на потенциал скалярного поля, при которых в пределе сжатия скалярного поля в одномерный объект (окружность радиуса R) компоненты тензора энергии-импульса скалярного поля асимптотически совпадают с компонентами тензора энергии-импульса замкнутой нуль-струны того же радиуса. Приведён пример распределения потенциала скалярного поля, удовлетворяющего найденным условиям.

Следующим этапом станет интегрирование системы уравнений Эйнштейна для найденного распределения скалярного поля и анализ гравитационного поля, порождаемого «размазанной» замкнутой нуль-струной постоянного радиуса, которая движется вдоль оси z без изменения формы.

Список литературы

1. Линде А.Д. Физика элементарных частиц и космология / Линде А.Д. – М.: Наука, 1990. – 275 с.
2. Peebles P.S.E. Principles of physical cosmology / Peebles P.S.E. – Princeton University Press, 1994.
3. Vilenkin A. Cosmic strings and other topological defects / Vilenkin A., Shellard E.P.S. – Cambridge Univ. Press, 1994. – 534 p.
4. Лесяков А.П. Внешние решения уравнений Эйнштейна для замкнутой нуль-струны постоянного радиуса / Лесяков А.П. // Ученые записки ТНУ им. В.И.Вернадского. Серия «Физика» –2007. – Том 20 (59). – с. 14-20.
5. Лесяков А.П. Анализ системы уравнений Эйнштейна для замкнутой нуль-струны постоянного радиуса : материалы 4 Всеукраинской научно-технической конференции «БФФХ 2008», «СевНТУ» – 2008. – с. 25-28.

Лесяков О.П. Розподіл потенціалу скалярного поля для «розмазаної» нуль струни постійного радіуса / Лесяков О.П. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 3-12.

У роботі запропоновано загальний вигляд розподілу потенціалу безмасового дійсного скалярного поля для «розмазаної» нуль-струни постійного радіуса, що прямує уздовж осі z й у кожен момент часу цілком лежить у площині, ортогональній цієї осі. Знайдено умови на потенціал скалярного поля, при яких, при стисканні скалярного поля в одномірний об'єкт (коло радіуса R), компоненти тензора енергії-імпульсу скалярного поля асимптотично збігаються з компонентами тензора енергії-імпульсу замкненої нуль-струни того ж радіуса.

Ключові слова: нуль-струна, скалярне поле, космологія.

Lelyakov A.P. Distribution of potential of a scalar field for “thick” null string of constant radius / Lelyakov A.P. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 3-12.

In this article, we have received, the general view of distribution of potential scalar field for “thick” null string of constant radius which goes along an axis z and at each moment of time completely lays in a plane, orthogonal this axis. Conditions on potential of a scalar field at which, within the limits of compression of a scalar field in one-dimensional object, the stress energy tensor components of a scalar field coincide with components stress energy tensor of the closed null string of the same radius are found.

Keywords: null string, scalar field, cosmology.

Поступила в редакцію 27.09.2010 г.

УДК 539. 391+514. 764.2

КВАДРАТИЧНАЯ ФОРМА, ОПИСЫВАЮЩАЯ ГРАВИТАЦИОННОЕ ПОЛЕ РАДИАЛЬНО РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ ЗАМКНУТОЙ НУЛЬ-СТРУНЫ В ПЛОСКОСТИ $z = 0$

Усачев А.С., Леяков А.П.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: lelyakov@tnu.crimea.ua, as213@mail.ru

В работе проведен анализ системы уравнений Эйнштейна и квадратичной формы, описывающих гравитационное поле радиально расширяющейся, замкнутой нуль-струны. Показана возможность существования большого числа вакуумных решений уравнений Эйнштейна, удовлетворяющих симметриям поставленной задачи.

Ключевые слова: нуль-струна, квадратичная форма, космология.

ВВЕДЕНИЕ

Теория струн является одной из самых сложных и амбициозных теорий в современной теоретической и математической физике. Одним из направлений теории струн является исследование роли этих объектов в космологии. В рамках различных моделей Теории Великого Объединения космические струны проявляются как топологические дефекты (наряду с доменными стенками и монополями) и поэтому представляют собой устойчивые во времени образования. Наряду со струнами во Вселенной могут существовать и так называемые нуль-струны, которые реализуют предел нулевого натяжения в теории струн [1-4]. Положение струны задается линией в D -мерном пространстве-времени. Эта линия, замкнутая для замкнутых струн и имеет концы для открытых. Траекторией струны является двумерная мировая поверхность, которая математически описывается функциями $x^m(\tau, \sigma)$, где τ и σ - параметры на мировой поверхности нуль-струны.

Целью работы является поиск возможных внешних решений системы уравнений Эйнштейна, описывающей гравитационное поле радиально расширяющейся, замкнутой нуль-струны в плоскости $z = 0$.

1. ПОСТРОЕНИЕ ТЕНЗОРА ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА И КВАДРАТИЧНОЙ ФОРМЫ ДЛЯ НУЛЬ-СТРУНЫ

В цилиндрической системе координат функции $x^m(\tau, \sigma)$, определяющие траекторию движения замкнутой, радиально расширяющейся нуль-струны в плоскости $z = 0$, имеют следующий вид

$$x^0 = t = \tau, \quad x^1 = \rho = \tau, \quad x^2 = \theta = \sigma, \quad x^3 = z = 0, \quad \tau \geq 0. \quad (1.1)$$

Отметим, что для траектории (1.1) замкнутая нуль струна в каждый момент времени

t полностью лежит в плоскости $z = 0$. Ненулевые компоненты тензора энергии-импульса [4] нуль-струны, для (1.1), имеют следующий вид

$$T^{00} = T^{01} = T^{11} = \frac{\gamma}{\sqrt{-g}} \delta(\rho - t) \delta(z - z_0), \quad (1.2)$$

где $g = |g_{mn}|$, g_{mn} ; $m, n = 0, 1, 2, 3$ метрический тензор внешнего пространства-времени, $\gamma = const$. Поскольку для сохраняющейся траектории движения (1.1), все направления на гиперповерхностях $z = const$ эквивалентны, то метрические функции не зависят от координаты θ , т.е.:

$$g_{mn} = g_{mn}(t, \rho, z). \quad (1.3)$$

Тогда, используя инвариантность квадратичной формы относительно инверсии θ на $-\theta$ получаем

$$g_{02} = g_{12} = g_{32} = 0. \quad (1.4)$$

Так же можно заметить, что квадратичная форма пространства времени в решаемой задаче должна быть инвариантна относительно инверсии $z \rightarrow -z$, тогда

$$g_{mn}(t, \rho, z) = g_{mn}(t, \rho, -z). \quad (1.5)$$

Для (1.5)
$$g_{30} = g_{31} = 0. \quad (1.6)$$

Окончательно, используя свободу выбора систем координат в Общей Теории Относительности (ОТО), частично зафиксируем ее следующим образом

$$g_{10} = 0. \quad (1.7)$$

Учитывая (1.3)-(1.7) квадратичная форма для решаемой задачи может быть представлена в виде

$$dS^2 = e^{2\nu} (dt)^2 - A(d\rho)^2 - B(d\theta)^2 - e^{2\mu} (dz)^2, \quad (1.8)$$

где ν, μ, A, B , функции переменных t, ρ, z .

Движение нуль струны в псевдоримановом пространстве-времени определяется следующей системой уравнений:

$$x^\alpha_{,\tau\tau} + \Gamma^\alpha_{\beta\gamma} x^\beta_{,\tau} x^\gamma_{,\tau} = 0, \quad g_{\beta\gamma} x^\beta_{,\tau} x^\gamma_{,\tau} = 0, \quad g_{\beta\gamma} x^\beta_{,\tau} x^\gamma_{,\sigma} = 0, \quad (1.9)$$

где $x^\alpha_{,\tau} = \partial x^\alpha / \partial \tau$, $x^\alpha_{,\sigma} = \partial x^\alpha / \partial \sigma$. Расписывая уравнения (1.9) для (1.8) с учетом того, что траектория (1.1) должна быть одним из частных решений уравнений движения, можно получить уравнения (связи) на метрические функции, при которых траектория движения нуль струны, задаваемая (1.1), остается неизменной:

$$e^{2\nu} = A, \quad \nu = \nu(\eta, z), \quad \text{где } \eta = t - \rho. \quad (1.10)$$

Таким образом, условием того, что траектория движения замкнутой нуль-струны, задаваемая (1.1), будет сохраняться при движении в собственном гравитационном поле, есть выполнение равенств (1.10). Используя (1.10) для (1.8) получим

$$dS^2 = e^{2\nu} (dt^2 - d\rho^2) - Bd\theta^2 - e^{2\mu} dz^2. \quad (1.11)$$

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ЭЙНШТЕЙНА

Из (1.2) видно, что все компоненты тензора энергии-импульса нуль-струны стремятся к бесконечности непосредственно на самой струне, а вне нее тождественно равны нулю. Анализ системы уравнений Эйнштейна построенной для квадратичной формы (1.11) позволил доопределить функциональную зависимость метрических функций искомой квадратичной формы, которая имеет вид

$$v = v(\eta, z), B = B(\eta, z), \mu = \mu(\eta, z),$$

при этом система уравнений Эйнштейна приводится к следующему виду:

$$2v_{,\eta}\mu_{,\eta} + v_{,\eta} \frac{B_{,\eta}}{B} - \mu_{,\eta\eta} - \mu_{,\eta}^2 - \frac{1}{2} \frac{B_{,\eta\eta}}{B} + \frac{B_{,\eta\eta}^2}{4B^2} = 0, \quad (2.1)$$

$$2v_{,z} + \frac{B_{,zz}}{B} + 2v_z^2 - \frac{B_z^2}{2B^2} - 2\mu_{,z}v_z - \frac{B_z\mu_z}{B} + \frac{B_zv_z}{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$v_{,\eta z} + \frac{B_{,\eta z}}{2B} - \frac{B_zB_{,\eta}}{4B^2} - \frac{B_{,\eta}v_z}{2B} - \frac{B_z\mu_{,\eta}}{2B} - \mu_{,\eta}v_z = 0, \quad (2.3)$$

$$v_{,zz} + 3v_z^2/2 - v_{,z}\mu_{,z} = 0, \quad (2.4)$$

$$v_{,z}(v_{,z} + B_{,z}/B) = 0. \quad (2.5)$$

3. ВОЗМОЖНЫЕ ВНЕШНИЕ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ЭЙНШТЕЙНА

Выполнить уравнение (2.5) можно одним из следующих способов

$$v_{,z} = 0, \quad v_{,z} + B_{,z}/B = 0, \quad \Rightarrow \quad v = v(\eta), \quad B = B(\eta), \quad (3.1)$$

$$v_{,z} = 0, \quad v_{,z} + B_{,z}/B \neq 0 \quad \Rightarrow \quad v = v(\eta), \quad B = B(\eta, z), \quad (3.2)$$

$$v_{,z} \neq 0, \quad v_{,z} + B_{,z}/B = 0 \quad \Rightarrow \quad v = v(\eta, z), \quad B = \alpha e^{-v}. \quad (3.3)$$

Для (3.1) уравнения (2.2)-(2.4) выполняются тождественно, и остается единственное уравнение (2.1), которое связывает между собой три искомые метрические функции $v(\eta)$, $\mu(\eta, z)$, и $B(\eta)$. Для случая (3.2) система уравнений Эйнштейна (2.1)-(2.4) сводится к единственному уравнению, связывающему метрические функции, которое имеет следующий вид:

$$2v_{,\eta}\mu_{,\eta} + 2v_{,\eta}N_{,\eta}/N - \mu_{,\eta\eta} - \mu_{,\eta}^2 - N_{,\eta\eta}/N = 0, \quad \text{где } N = \int e^{-\mu} dz. \quad (3.4)$$

Для случая (3.3) система уравнений (2.1)-(2.4) может быть приведена к виду:

$$3\alpha_{,\eta}v_{,\eta}/2\alpha - (v_{,\eta} - \mu_{,\eta})^2 + (\alpha_{,\eta}/\alpha - v_{,\eta})(\alpha_{,\eta}/\alpha + v_{,\eta})/4 - \mu_{,\eta\eta} - \alpha_{,\eta\eta}/2\alpha + v_{,\eta\eta}/2 = 0, \quad (3.5)$$

$$2v_{,zz} + 3v_z^2 - 2v_{,z}\mu_{,z} = 0, \quad 3v_{,z}(v_{,\eta} - \alpha_{,\eta}/\alpha) + 2(v_{,\eta z} - v_{,z}\mu_{,z}) = 0. \quad (3.6)$$

Интегрируя (3.6) получим

$$v_{,z}e^{3v/2-\mu} = C_3(\eta) \quad \text{и} \quad v_{,z}^2e^{3v-2\mu} = C_4\alpha^3. \quad (3.7)$$

Сравнивая полученные уравнений видно, что $C_4 = 1$, а $C_3 = \alpha^{3/2}$, поэтому

$$\nu_{,z} e^{3\nu/2} = \alpha^{3/2} e^{\mu}. \quad (3.9)$$

Поскольку функции $\nu(\eta, z)$ и $\mu(\eta, z)$ – четные по z , а функция $\nu_{,z}$ – нечетная по переменной z , то в левой части равенства (3.11) стоит нечетная по z функция, а в правой – четная по z , что невозможно. Следовательно, случай (3.3) не может быть реализован.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе найдено общее выражение квадратичной формы, описывающей пространство-время радиально расширяющейся, замкнутой нуль-струны. Анализ системы уравнений Эйнштейна, построенной для искомой квадратичной формы, позволил доопределить функциональную зависимость функций метрического тензора внешнего пространства-времени. Показана возможность существования большого числа вакуумных гравитационных полей, удовлетворяющих симметриям поставленной задачи. Следующим этапом станет поиск критериев, позволяющих выделить из полученной совокупности единственное решение, которое описывает движение нуль-струны для исследуемой траектории.

Список литературы:

1. Peebles P.J.E. Principles of Physical Cosmology / Peebles P.J.E. – Princeton University Press, 1994. – 850 p.
2. Линде А.Д. Физика элементарных частиц и космология / Линде А.Д. – М.: Наука, 1990. – 275с.
3. Kibble T.W.B. Some implications of cosmological phase transitions / Kibble T.W.B. // Phys. Repts. – 1980. – Vol. 67. – p. 183-189.
4. Vilenkin A. Cosmic strings / Vilenkin A. // Phys. Rev. – 1981. – Vol. 26 D. – p. 2082–2093.

Лесяков О.П. Квадратична форма, яка описує гравітаційне поле замкнутої нуль-струни, що радіально розширюється в площині $z = 0$ / Лесяков О.П., Усачев О.С. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 13-16.

У роботі був проведений аналіз квадратичної форми, метричних функцій та системи рівнянь Ейнштейна, які описують гравітаційне поле замкнутої нуль-струни, що радіально розширюється у площині $z = 0$. Була показана можливість існування великої кількості вакуумних розв'язків рівнянь Ейнштейна, які задовольняють симетріям поставленої задачі.

Ключові слова: нуль-струна, квадратична форма, космологія.

Lelyakov A.P. Quadratic form, describing gravitational field of the radially expanding closed null string / Lelyakov A.P., Usachov A.S. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 13-16.

In this work we have analyzed the quadratic form, metric functions and Einstein's equations, describing gravitational field of the radially expanding closed null-string in the flat $z = 0$. There is also shown the existence of many gravitational vacuum fields, satisfying the symmetries of the problem.

Keywords: null string, quadratic form, cosmology.

Поступила в редакцію 04.10.2010 г.

УДК 520.872:524.884

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРСЕКОВОЙ СТРУКТУРЫ ВЫБРОСА

КВАЗАРА 1642+690

Пушкарев А.Б.^{1,2}

¹НИИ «Крымская астрофизическая Обсерватория», Научный, Украина

²Главная Астрономическая Обсерватория (Пулково), С.-Петербург, Россия

E-mail: pushkarev@crao.crimea.ua

Исследована парсековая структура релятивистского выброса квазара 1642+690 с помощью двухчастотных (2.3 и 8.6 ГГц) наблюдений на системе апертурного синтеза из 17 антенн методом радиоинтерферометрии со сверхдлинными базами (РСДБ). По данным наблюдений получены изображения объекта, карта распределения спектрального индекса на масштабах миллисекунд дуги, а также оценки яркостной температуры, светимости, угла к лучу зрения и угла раскрыва струи.

Ключевые слова: активные ядра галактик, квазары, интерферометрия.

ВВЕДЕНИЕ

Квазары (от англ. quasar – quasistellar radio source – квазизвездный источник радиоизлучения) являются мощнейшими внегалактическими источниками электромагнитного излучения. Они были открыты в 1960-м году как очень компактные радиоисточники, впоследствии отождествленные с оптическими объектами. Измеренные по положениям широких эмиссионных линий в оптических спектрах красные смещения квазаров позволили установить их внегалактическую природу. Широкие эмиссионные линии свидетельствуют о высоких скоростях движения облаков тепловой плазмы. Квазары излучают во всех участках электромагнитного спектра: от радио- до гамма-диапазона. Причем, их излучение сильно- и быстропеременно на масштабах времени вплоть до нескольких десятков минут, что свидетельствует о чрезвычайной компактности области генерации излучения. Кроме того, активность в квазарах проявляется также в формировании биполярных истечений вещества, представляющих собой выбросы нетепловой плазмы, движущиеся с релятивистскими скоростями. Излучение квазаров поляризовано, степень линейной поляризации в оптически тонких компонентах струй, как правило, составляет несколько десятков процентов, а в отдельных случаях может достигать 60-70%, т.е. верхнего предела на степень поляризации оптически тонкого синхротронного излучения. Этот факт отражает высокую степень упорядоченности силовых линий магнитного поля в джетах квазаров.

По современным представлениям, квазарами являются активные галактики, в центрах которых происходит аккреция вещества на вращающуюся сверхмассивную черную дыру с последующим образованием биполярных потоков плазмы. Несмотря на более чем полувекую историю изучения этих объектов, целый ряд вопросов, касающихся понимания физики процессов, проходящих как в аккреционном диске, вблизи горизонта событий черной дыры, а также и в самих выбросах, остаются

открытыми. В настоящее время активно обсуждаются следующие вопросы: (i) механизм ускорения выбросов, их коллимация и удержание; (ii) состав выбросов; (iii) природа ярких джет-компонент, которая может быть как следствием фронтов релятивистских ударных волн [1,2], так и распространением неустойчивостей Кельвина-Гельмгольца [3]; (iv) механизм гамма-излучения квазаров; (v) место генерации оптического и гамма-излучения; (vi) механизм переменности излучения, (vii) взаимодействие выбросов с окружающей их средой и др.

В данной работе исследуется тонкая структура выброса в квазаре 1642+690 путем картографирования с предельным угловым разрешением, составляющим доли миллисекунд дуги, и последующего моделирования распределения радиояркости объекта, по результатам которого определяются такие физические параметры как интегральный поток на частотах 2.3 и 8.6 ГГц, спектральная светимость, яркостная температура, а также производятся оценки угла к лучу зрения и истинного угла раствора струи. Обсуждается карта распределения спектрального индекса по источнику. Данные, используемые в настоящей работе, получены из открытого архива Национальной Радиоастрономической Обсерватории [4].

1. НАБЛЮДЕНИЯ

Наблюдения источника 1642+690 проводились в рамках долгосрочного РСДБ-проекта RDV (Research and Development – VLBA) продолжительностью 24 часа, проведенного 18-19 июня 2003 г. с помощью системы VLBA (Very Long Baseline interferometry Array), состоящей из десяти 25-м антенн, а также семи дополнительных геодезических станций. В Таблице 1 приведены характеристики участвующих в эксперименте антенн. Запись сигнала велась в правой круговой поляризации с одноканальным квантованием сигнала одновременно в восьми частотных каналах (IF) шириной 8 МГц каждый: в S-полосе с центрами на 2.22, 2.24, 2.33, 2.36 ГГц и в X-полосе с центрами на 8.41, 8.48, 8.79, 8.90 ГГц. Общая ширина полосы составила 32 МГц при 16 спектральных каналах в каждом частотном. Квазар 1642+690 имел 19 сканов наблюдений с общим временем слежения 57 мин, что для используемой конфигурации антенн соответствует 35500 измерений амплитуды и фазы функции видности. Корреляция данных была проведена на VLBA корреляторе в Сокорро (Нью-Мексико, США) со временем интегрирования четыре секунды.

Участие в наблюдениях большого количества радиотелескопов, расположенных в разных частях света, приводит к тому, что все антенны не могут следить одновременно за источником. Для обеспечения максимального использования антенного времени, т.е. работы в течение всего сеанса, полная система антенн разбивается на подсистемы (подрешетки) таким образом, чтобы в течение того или иного скана наблюдений для всех антенн, входящих в каждую из подрешеток, текущий источник был в зоне видимости. В эксперименте использовалось восемь подрешеток. Привлечение восьми геодезических антенн в дополнение к десяти радиотелескопам VLBA увеличивает количество баз и, соответственно данных, в три с половиной раза, что существенно улучшает заполнение плоскости пространственных частот и приводит к увеличению углового

разрешения в полтора раза на той же частоте. Максимальная проекция базы составила 11300 км между пунктами St. Croix (США) и Tsucuba (Япония).

Таблица 1

Параметры антенн, участвовавших в наблюдениях

Антенна	Код	Страна	Диаметр, м	DPFU, мК/Ян	
				S-полоса	X-полоса
Brewster	BR	США	25	98	112
Fort Devis	FD	США	25	102	84
Hancock	HN	США	25	89	110
Kokkee	KK	США	20	73	44
Kitt Peack	KP	США	25	908	114
Los Alamos	LA	США	25	88	109
Matera	MA	Италия	20	91	93
Mauna Kea	MK	США	25	77	118
North Liberty	NL	США	25	91	115
Onsala	ON	Швеция	20	29	43
Owens Valley	OV	США	25	84	112
Pie Town	PT	США	25	94	124
St. Croix	SC	США	25	90	110
TIGO	TC	Чили	6	7	10
Tsucuba	TS	Япония	32	238	165
Westford	WF	США	18	143	38
Wettzell	WZ	Германия	20	20	71

2. КАЛИБРОВКА ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ

Первичная калибровка была проведена с помощью пакета обработки AIPS [5]. Для калибровки амплитуды, т.е. перевода коэффициентов корреляции в единицы плотности потока Ян ($1 \text{ Ян} = 10^{-26} \text{ Вт/м}^2/\text{Гц}$), использовались кривые усиления антенн, приведенные в Таблице 1 (параметр DPFU – degree per flux unit) и системные температуры, измеренные в течение сеанса. Параметр DPFU является мерой чувствительности радиотелескопа в направлении на зенит. Калибровка фазы, а именно, коррекция фазы за остаточные задержки была выполнена процедурой FRING с использованием четырехминутного интервала усреднения при нахождении решений и применением модели точечного источника. Все решения, имеющие отношение сигнал-шум меньше пяти, исключались. В среднем, доля плохих решений составляла 8% для X-полосы и 10% для S-полосы. Для получения полностью калиброванного массива данных на каждой из частот применялась процедура SPLIT с осреднением данных по спектральным каналам внутри каждого из четырех промежуточных частотных каналов в S- и X-полосе. Первая фазовая самокалибровка проводилась с помощью процедуры CALIB, имеющей два преимущества: (i) возможность находить первое решение, используя все

промежуточные частоты вместе, (ii) автоматическое флагирование данных с низким отношением сигнал-шум.

3. КАРТОГРАФИРОВАНИЕ И ОЦЕНКА ФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СТРУИ

Дальнейшая обработка – самокалибровка и гибридное картографирование были проведены в пакете DIFMAP [6]. В качестве начальной модели использовалась модель точечного источника в фазовом центре. Сходимость достигалась за ~20 итераций, включая фазовую и фазо-амплитудную самокалибровки. При построении окончательной карты источника использовалось естественное взвешивание данных функции видности. На Рис. 1 представлены восстановленные изображения квазара 1642+690. На обоих частотах морфология источника представляет собой структуру типа яркое компактное ядро плюс односторонний выброс. Вследствие эффекта доплеровского усиления излучения детектируется только приближающийся к наблюдателю выброс. Излучение удаляющегося выброса ослаблено тем же эффектом и необнаружимо из-за ограниченности динамического диапазона изображения, рассчитываемого как отношение пикового потока к величине остаточного шума на карте, и составившего 1984 для изображения на 8.6 ГГц и 900 на 2.3 ГГц. Факт необнаружения потока от контр-джета свидетельствует о малом угле к лучу зрения, оценку сверху для которого можно сделать из соотношения $\varphi < \arcsin(1/\beta_{\text{app}})$, где β_{app} – видимая скорость движения компонент струи, измеренная в скоростях света. Величина β_{app} для 1642+690 составила 16.65 по кинематическим измерениям [8]. Тогда угол к лучу зрения $\varphi < 3.5^\circ$.

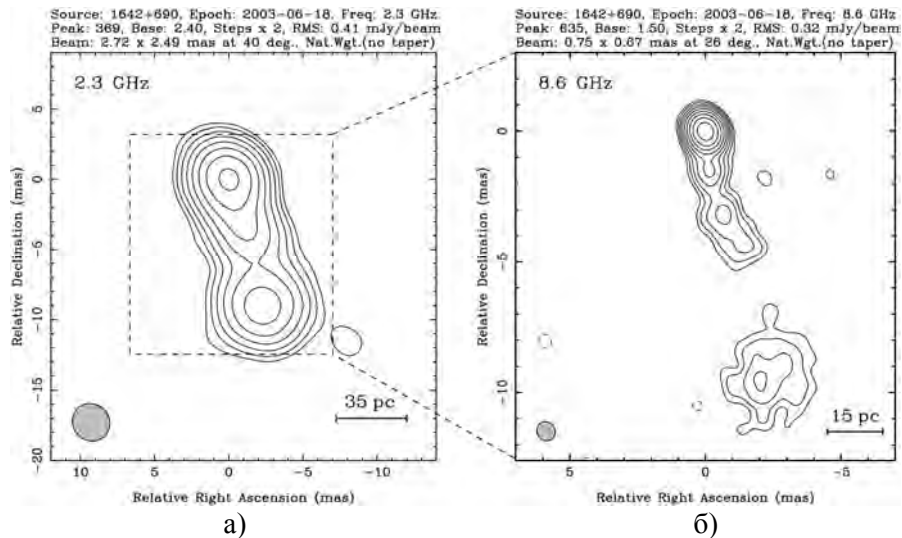


Рис. 1. РСДБ карты квазара 1642+690 на частоте 2.3 ГГц (а) и 8.6 ГГц (б). Оси даны в миллисекундах дуги. В левом нижнем углу показана синтезированная диаграмма направленности.

Источник находится на красном смещении 0.751, что соответствует фотометрическому расстоянию 4645 Мпк. Тогда одна миллисекунда дуги в угловом масштабе соответствует 7.35 пк для неоднородной Фридмановской модели Вселенной (λ CDM космология) с параметрами $\Omega_m = 0.27$, $\Omega_\Lambda = 0.73$ и постоянной Хаббла $H_0 = 71h$ км с⁻¹ Мпк⁻¹ [7]. Таким образом, структура выброса прослеживается на описанном выше уровне чувствительности до расстояний ~ 75 пк в проекции на небесную сферу или до ≥ 1245 пк в системе источника.

Моделирование структуры объекта на частоте 8.6 ГГц также было выполнено в DIFMAP с использованием шести круговых гауссовых компонент, которые при свертке с соответствующей диаграммой направленности воссоздавали основу структуры источника. Результатами моделирования (Таблица 2) являются поток (S), положение гаусс-компонента в полярных координатах (R , Θ), а также его размер (D) по уровню половинной мощности. Все позиционные углы отсчитываются в направлении с севера на восток. Положения компонент пересчитаны по отношению к ядру, яркостная температура которого, рассчитанная как $T_b = 2 \ln 2 S \lambda^2 (1+z) / (\pi k D^2)$, где λ – длина волны, k – постоянная Больцмана, составила $T_b = 1.94 \times 10^{12}$ К. Спектральная светимость источника на 8.6 ГГц, рассчитанная по формуле $L = 4\pi S_{\text{tot}} d^2$, где S_{tot} – интегральный поток с РСДБ-масштабов, d – фотометрическое расстояние, составила $L = 2.35 \times 10^{27}$ Вт Гц⁻¹. Предполагая, в первом приближении, коническую форму струи, т.е. линейную пропорциональность между ее поперечным размером и расстоянием до РСДБ-ядра $D = aR$, был определен параметр $a = 0.236$. Тогда видимый угол раскрыва струи может быть рассчитан как $\alpha_{\text{app}} = 2 \arctg(0.5D/R) \approx 13.5^\circ$, а истинный, соответственно, $\alpha_{\text{int}} = \alpha_{\text{app}} \sin \varphi \approx 0.8^\circ$, что свидетельствует о высокой степени коллимации выброса на дека- и гектопарсековых расстояниях от центральной машины активного галактического ядра.

Таблица 2

Модель источника на частоте 8.6 ГГц

Компонент	S , мЯн	R , мсек	Θ , град	D , мсек
Ядро	524 $\pm$ 41	0.000 $\pm$ 0.002	0.0 $\pm$ 0.0	0.088 $\pm$ 0.004
C5	198 $\pm$ 24	0.322 $\pm$ 0.009	-168.0 $\pm$ 2.0	0.248 $\pm$ 0.019
C4	42 $\pm$ 11	1.570 $\pm$ 0.036	-175.1 $\pm$ 1.4	0.421 $\pm$ 0.072
C3	29 $\pm$ 7	3.250 $\pm$ 0.071	-169.4 $\pm$ 1.3	0.762 $\pm$ 0.143
C2	25 $\pm$ 6	4.463 $\pm$ 0.104	-162.1 $\pm$ 1.4	1.063 $\pm$ 0.207
C1	93 $\pm$ 16	9.740 $\pm$ 0.156	-166.0 $\pm$ 0.9	2.029 $\pm$ 0.313

Распределение ансамбля релятивистских электронов по энергиям в выбросе неравномерно и чаще всего аппроксимируется степенной зависимостью вида

$N(E) \sim E^{-\gamma} dE$, где γ – показатель энергетического спектра электронов, а величина $\alpha = (1 - \gamma)/2$ представляет собой спектральный индекс, связывающий интенсивность синхротронного излучения с частотой соотношением $S \sim \nu^\alpha$.

Используя изображения источника на частотах 2.3 и 8.6 ГГц (Рис. 2), приведенных к одному размеру пикселя, свернутых с одинаковой диаграммой и совмещенных по ахроматическим компонентам струи, была получена карта распределения спектрального индекса $\alpha = \log(S_1/S_2)/\log(\nu_2/\nu_1)$, приведенная на Рис. 2. В подрисунках даны профили интенсивности и спектрального индекса вдоль хребтовой линии, полученной вписыванием гауссианы в поперечный срез выброса и определением координат, соответствующим максимуму интенсивности. Излучение из ядерной области – оптически толстое с характерным значением $\alpha_{\text{core}} \approx (0.5 - 1)$, тогда как излучение струи – оптически тонкое с медианным значением $\alpha_{\text{jet}} = -0.62$ и показателем энергетического спектра электронов $\gamma = 2.2$.

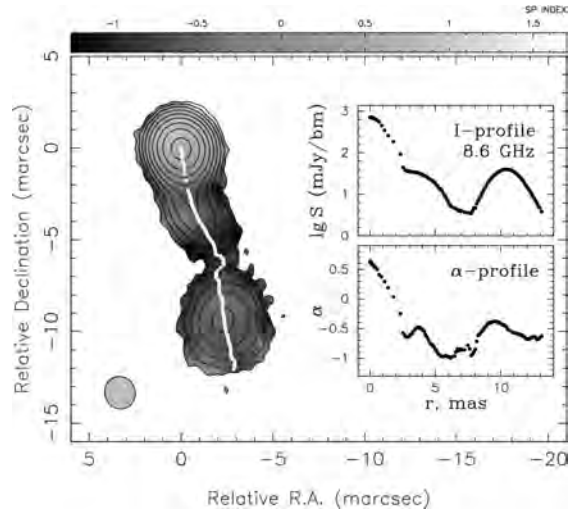


Рис. 2. Распределение спектрального индекса по источнику (слева). Контурами показаны уровни интенсивности по данным на 8.6 ГГц. Хребтовая линия выброса показана белыми точками. В подрисунках даны профили интенсивности (вверху) и спектрального индекса (внизу).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Восстановлены РСДБ-изображения квазара 1642+690 с миллисекундным угловым разрешением на частоте 2.3 и 8.6 ГГц. Проведено моделирование структуры источника, по результатам которого проведена оценка таких физических параметров струи, как интегральный поток, спектральная светимость, яркостная температура, угол к лучу зрения, а также видимый и истинный угол раскрытия выброса. Показан нетепловой характер излучения источника, малый угол к лучу зрения и высокая

степень коллимации релятивистского джета. Распределение спектрального индекса по струе неоднородно; синхротронное излучение джета просветляется с увеличением расстояния от РСДБ-ядра, однако в ярких компонентах струи спектральный индекс имеет тенденцию к уплощению, что обусловлено усилением магнитного поля в этих областях.

Список литературы

1. Hughes P.A. Synchrotron Emission from Shocked Relativistic Jets. II. A Model for the Centimeter Wave Band Quiescent and Burst Emission from BL Lacertae / Hughes P.A., Aller H.D., Aller M.F. // *Astrophysical Journal*. – 1989. – V. 341. – P. 68-79.
2. Laing R. A model for the magnetic field structure in extended radio sources / Laing R. // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 1980. – V. 193. – P. 439-449.
3. The role of Kelvin-Helmholtz instability in the internal structure of relativistic outflows. The case of the jet in 3C 273 / Perucho M., Lobanov A.P., Marti J.-M., Hardee P.E. // *Astronomy & Astrophysics*. – 2006. – V. 456. – P. 493-504.
4. NRAO Science Data Archive / NRAO. – <http://archive.nrao.edu>. – 02.10.2010.
5. Greisen E. The Astronomical Image Processing System / Greisen E. // *Seminar on Acquisition, Processing and Archiving of astronomical Images*. – 1990. – P. 125-142.
6. Shepherd M.C. DIFMAP: an interactive program for synthesis imaging / Shepherd M.C., Pearson T.J., Taylor G.B. // *Bull. Am. Astron. Soc.* – V. 26. – No. 2. – P. 987-989.
7. Five-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe Observations: Cosmological Interpretation / Komatsu E., Dunkley J., Nolte M.R. et al. // *Astrophysical Journal Supplement*. – V. 180. – No. 2. – P. 330-376.
8. Sub-Milliarcsecond Imaging of Quasars and Active Galactic Nuclei. III. Kinematics of Parsec-scale Radio Jets / Kellermann K.I., Lister L.M., Homan D.C. et al. // *Astrophysical Journal*. – V. 609. – No. 2. – P. 539-563.

Пушкаръов О.Б. Дослідження парсекової структури квазара 1642+690 / Пушкаръов О.Б. // *Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки*. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 17-23.

Досліджена парсекова структура релятивістського викиду квазара 1642+690 за допомогою двочастотних (2.3 і 8.6 ГГц) спостережень на системі апертурного синтезу з 17 антен методом радіоінтерферометрії з наддовгими базами (РНДБ). За даними спостережень отримані зображення об'єкта, карта розподілу спектрального індексу на масштабах мілісекунд дуги, а також оцінки яркісної температури, світності, кута до променя зору, а також кута розкриття струменя.

Ключові слова: активні ядра галактик, квазари, інтерферометрія.

Pushkarev A.B. Investigation of a parsec-scale structure of the quasar 1642+690 / Pushkarev A.B. // *Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences*. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 17-23.

Parsec-scale structure of a relativistic jet of the quasar 1642+690 is investigated using dual-frequency (2.3 and 8.6 GHz) aperture synthesis observations with 17 antennas applying the method of very long baseline interferometry (VLBI). The observational data allowed to construct the radio images of the source, the map of spectral index distribution on a milliarcsecond scale, and also derive such physical parameters as brightness temperature, luminosity, angle to the line of sight, and jet opening angle.

Keywords: active galactic nuclei, quasars, interferometry.

Поступила в редакцію 10.10.2010 г.

УДК 551.324

КОРРЕЛЯЦИОННАЯ СВЯЗЬ ПОГОДЫ-КЛИМАТА С ПЛАНЕТНЫМИ ЦИКЛАМИ

Нарманский В.Я.

*Лаборатория «Гелиоритм», Симферополь, Украина
E-mail: helioelectronics@gmail.com*

В работе показана связь планетных конфигураций с ходом погоды-климата в Санкт-Петербурге, Москве и Екатеринбурге. Подробно рассмотрена связь климата Санкт-Петербурга с 32-летними циклами Венера-Земля-Марс и 83-летними циклами планетной пары Земля-Юпитер. На основании полученных результатов сделан вывод – в данное время (2010-2014гг.) климат в Петербурге будет иметь связь с ходом климата в интервалах 1927-1931гг. и 1978-1982гг.

Ключевые слова: эклиптика, Марс, Юпитер, температура, осадки.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что экономический рост государства напрямую зависит от правильного планирования, где прогноз является первоосновой, так как всякое управленческое решение имеет прогнозную или плановую направленность. Надежное прогнозирование погоды-климата с заблаговременностью три-пять лет сможет обеспечить благоприятные условия для энергетиков, аграриев, коммунальных предприятий и т.д., что в целом скажется на росте экономики. Но современная точность прогнозов, с заблаговременностью более трех месяцев – год, имеет оправдываемость не выше 50%, что приводит к большим экономическим потерям и заставляет искать принципиально новые методы моделирования погоды-климата.

Следует сказать, что отсутствие полноценной теории в метеорологии создает почву для различных спекуляций. Сегодня дискуссия о глобальном потеплении климата, имеющая важное общественно-политическое и экономическое значение, достигает предельно высокой степени остроты. Влиятельная часть метеорологического сообщества делает все, что бы доказать реальность глобального потепления и подготовить условия для продления (после 2012г.) Киотского протокола. При этом тезис о глобальном потеплении, с одной стороны, базируется на представлении о полной самодостаточности и автономности системы климата. Обсуждение этих работ выходит далеко за рамки статьи, но в общем авторы высказывают похожие мнения: «В настоящее время преобладает точка зрения, что современное изменение климата вызвано в основном антропогенным воздействием» [1].

В противоположность этой позиции часть метеорологов предполагает, что климатическая машина не автономна и основным космическим фактором влияющим на климатическую машину Земли является солнечная активность [2]. Но полученные коэффициенты корреляции, показывающие уровень связи двух

колебательных процессов, нельзя назвать высокими. Это показывает пример эксперимента с разделением общего ряда температур на зимние и летние. Где авторы пишут: «Сопоставление кривых показывает, коэффициент корреляции спектра летних температур со спектром вариаций солнечной активности равен $r=0.45$, что свидетельствует об их относительно хорошей связи. Спектр вариаций зимних температур коррелирует со спектром чисел Вольфа (W) значительно хуже $r=0.2$ » [3]. И даже если согласиться, что подобную связь можно считать достоверной (как утверждают авторы), то каким образом её можно реализовать на практике – в прогнозе?

Вопрос о неудовлетворительных прогнозах солнечной активности поднимается давно и подробно освещен в обзорной статье на эту тему [4]. Её автор указывая на отсутствие физико-математических методов прогноза, на которые мог бы опереться метеоролог, упоминает астрономическую гипотезу Броуна (1900). Цитируем: [«единственная гипотеза, способная объяснить иначе совершенно непонятный много циклический характер изменений во времени солнечной деятельности». Заметив, что «на материалах наблюдений достоверность гипотезы Броуна никем не проверялась», указывая затем на работы Н.П. Смирнова (1967) по такой проверке и на противоречия и неясности у других сторонников взглядов Броуна, И.В. Максимов не скрывает, что гипотеза и по сейчас не доказана, оговариваясь: «если она будет подтверждена дальнейшими исследованиями»].

Прошло около 40 лет, но на материалах наблюдений достоверность гипотезы Броуна остаётся не проверенной. И в тоже время работы, в которых корреляционную связь погоды с астрономическими факторами пытаются объяснить максимально-резонансными свойствами солнечной системы [5,6] или гравитационным взаимодействием [7], крайне редко появляются в печати. И это не случайность – на протяжении длительного времени предпочтение отдается исключительно астрофизическим проектам и это делается в ущерб и за счет планетных исследований [8].

Расхождение мнений отсутствие единой теории привело к тому, что методы долгосрочного и сверхдолгосрочного прогнозирования сегодня остаются более похожими на искусство, чем на науку. Используемые в крупных метеоцентрах, оперативные численные модели, имеют предел предсказуемости 10-90 суток – долгосрочный прогноз (ДПП), которые отличаются друг от друга по своим характеристикам, с оправданностью 60-65%. При этом опасные явления погоды численными моделями не прогнозируются вообще. А при моделировании возможного состояния погоды-климата на год и более (СДПП) с точностью не более 50%, прогностики отдают предпочтение терминам «перспективная оценка», а не «прогноз» или «предсказание» [9]. Не удовлетворительное состояние прогнозов вызывает нарастающие нарекания практиков (агров, энергетиков, коммунальных служб, МЧС, авиации, флота). Такое положение становится все более опасным для стремительно растущего и развивающего общества и заставляет исследователей искать новые подходы в моделировании погоды-климата, где будет использоваться не только теоретическая физика [10], но и механика.

Мы предлагаем модель, построенную на фундаменте небесной механики. При этом механизм физической связи, который сегодня требуют ставить во главу угла, остается открытым (и это наверняка вызовет критику). Но если взамен мы получим высокую точность прогноза, разве это не перекроет «физическую неполноценность» модели? И, в конце концов, какой прогноз сегодня нужен практикам – физически обоснованный, но не эффективный в практическом отношении, или точный, но обоснованный с позиции небесной механики?

В рамках модели ход метеорологических или иных процессов рассматривается относительно динамики планет, не с позиции их видимых движений – в геоцентрической системе, а с точки зрения истинных движений планет в гелиоцентрической (эклиптической) системе координат. Ранее астрономический подход показал свою перспективность в исследовании солнечной активности [11-14].

Технология прогноза построена на базе эфемериды DE200 [15] и принадлежит к числу методов линейного анализа, который характеризует «астрономическую связь» двух колебательных процессов, в виде коэффициентов корреляции [16].

Цель работы показать, что динамики планет и климата имеют тесную небесно-механическую связь, которую можно эффективно использовать в сверхдолгосрочном прогнозировании.

1. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Исходными данными для анализа были:

1. Ряд наблюдений среднемесячной температуры воздуха в г. Санкт-Петербурге (СПБ), в интервале 1775-1982гг. (архив Главной геофизической обсерватории в СПБ) [3].

2. Ряды наблюдений среднесуточных температур воздуха ($\times 10$) и осадков в СПБ, в интервале 1881-1995гг. (данные от <http://thermo.karelia.ru>, со ссылкой на Росгидромет).

3. Среднемесячные ряды температур воздуха в Москве (ТСХА, МГУ, ВВЦ 1820-2009), СПБ (1743-2009) и Екатеринбурге (1881-2009) <http://www.pogoda.ru>.

Проведенные исследования состояли из трёх этапов:

1. С помощью поисковой программы из общего спектра астрономических циклов эмпирически выделялись циклы отличающиеся целым числом лет. Это сделано для удобства прогнозирования – сезонный ход температур или осадков одного цикла, во всей полноте сравнивается с сезонным ходом следующего или предыдущего цикла. Допустим, сезонный ход температур 1881 года, через 83-летний цикл сравнивается с сезонным ходом 1964 года.

2. Определялся уровень корреляционной связи между найденными астрономическими и метеорологическими циклами. При получении достоверной связи ($r = 0.8$ и выше) проводилась проверка технологии прогноза и определялась ошибка метода.

3. При получении достоверной связи между астрономическим и метеорологическим циклами, на будущее переносился ход вариаций температур для соответствующего временного интервала.

На основании эфемериды DE200 была написана компьютерная программа, которая учитывает неравномерность угловых скоростей планет в любой точке их орбит. Это позволяет сидерические периоды планет, в данном случае Юпитера, рассматривать в качестве множества циклов, число которых выбирается произвольно в зависимости от условий задачи. В данном случае окружность эклиптики, относительно которой рассматриваются движения планет, разделена на 32 «сектора», с длиной дуги каждого 11.25° . Цель данного исследования – определение уровня корреляционной связи между астрономическими и метеорологическими циклами. Ранее этот подход применялся в работе [14].

Таким образом, период Юпитера 11.856 года произвольно разделен на 32 цикла, по 0.371 земных года (в среднем ~ 135 суток). При построении графиков данные погоды рассматриваются на фоне эклиптики, синхронно с прохождением планетой 32 секторов, в едином времени UT. Программа суммирует показатели погоды в каждом секторе и делит на число суток, в которые планета находилась в секторе. В выводе получаем средне 135-суточную $t^\circ\text{C}$ (или осадков), если рассматривается Юпитер, средне 21-суточную t° , если исследуем Марс или средне 7-суточную t° , при рассмотрении Венеры и т.д.

Далее полученные в эксперименте среднесуточные значения используются в качестве прогностического материала, получившего название «гелиоцентрический индекс» (ГЦ) температуры или осадков. Стандартная ошибка предвычисленного значения температур воздуха определялась методами регрессии и среднеквадратичного отклонения.

В данном исследовании анализировались ряды приземных среднемесячных $t^\circ\text{C}$ в Москве, Екатеринбурге и СПб (в СПб также исследовались осадки). Ряды $t^\circ\text{C}$ в СПб и Москве в исследуемом интервале лакун не имеют, в отличие от них ряд $t^\circ\text{C}$ в Екатеринбурге имеет лакуны (1938, 1958-1965гг.), которые были заполнены многолетними средними значениями по каждому месяцу. Анализ $t^\circ\text{C}$ и осадков в СПб и $t^\circ\text{C}$ в Москве и Екатеринбурге проводились с 1 января 1881 года, по 1 января 1964 года, в рамках одного полного 83-летнего цикла. И в интервале с 1 января 1964 года, по 19 сентября 1987 года, в рамках следующего не полного 83-летнего цикла (1964-2047гг.) (табл. 1).

На табл. 1 показано время 9-и сидерических периодов Юпитера, с 1.01.1881г., по 19.09.1987г. Интервалы 1-7 принадлежат циклу 1 (1881-1964), интервалы 8-9 принадлежат циклу 2 (1964-2047). $L^{\circ}3$, $L^{\circ}5$ – эклиптические координаты Земли и Юпитера на начало и конец интервалов, в которые синхронно с ходом Земли и Юпитера относительно эклиптики, проводились исследования среднесуточной температуры и осадков в СПб, Москве, Екатеринбурге.

Таблица 1
Исследуемые интервалы среднемесячной температуры в Санкт-Петербурге, Москве и
Екатеринбурге

	Дата	L°3	L°5	Дата	L°3	L°5
Цикл 1						
1.	01.01.1881	100°	22°	09.11.1892	47°	22°
2.	09.11.1892	47°	22°	19.09.1904	355°	22°
3.	19.09.1904	355°	22°	28.07.1916	305°	22°
4.	28.07.1916	305°	22°	06.06.1928	255°	22°
5.	06.06.1928	255°	22°	14.04.1940	204°	22°
6.	14.04.1940	204°	22°	22.02.1952	152°	22°
7.	22.02.1952	152°	22°	01.01.1964	100°	22°
Цикл 2						
8.	01.01.1964	100°	22°	09.11.1975	47°	22°
9.	09.11.1975	47°	22°	19.09.1987	355°	22°

С помощью компьютерной программы был сделан расчет среднесуточной $t^{\circ}\text{C}$, во всех интервалах времени (табл. 1), с распределением относительно 32 секторов, во время прохождения их Юпитером. Сравнение полученных рядов, здесь (табл. 2) и далее, рассчитывалось методом корреляции Пирсона.

Анализ таблицы показывает связь динамики Юпитера с ходом температур воздуха в СПб на протяжении всего 83-летнего цикла. В таблице показаны 11.8-летние интервалы $t^{\circ}\text{C}$, у которых отсутствует корреляция, интервалы связанные положительной и отрицательной корреляцией и интервалы с высокой корреляцией (отмечено цветом). Это относится к 11.8-летним интервалам, которые разделены 83.0 летним циклом: 1881-1892гг. и 1964-1975гг. ($r = 0.96$), а так же к интервалам 1892-1904гг. и 1975-1987гг. ($r = 0.96$). Также анализ таблицы показывает, что связь динамики Юпитера и $t^{\circ}\text{C}$ в СПб имеет системный и высокоорганизованный характер. Чередование высоких коэффициентов положительной и отрицательной корреляции указывает на не стационарность процесса и «качание» фазы с 11.8-летним периодом.

Таблица 2
Коэффициенты корреляции 83-летних циклов температуры в Санкт-Петербурге

	1881-1892	1892-1904	1904-1916	1916-1928	1928-1940	1940-1952	1952-1964	1964-1975	1975-1987
1881-1892	1								
1892-1904	0.52	1							
1904-1916	-0.22	0.62	1						
1916-1928	-0.85	-0.13	0.59	1					
1928-1940	-0.79	-0.83	-0.25	0.53	1				
1940-1952	-0.11	-0.82	-0.9	-0.28	0.54	1			
1952-1964	0.66	-0.2	-0.82	-0.89	-0.21	0.61	1		
1964-1975	0.95	0.48	-0.27	-0.84	-0.79	-0.1	0.67	1	
1975-1987	0.55	0.96	0.57	-0.17	-0.87	-0.79	-0.2	0.53	1

Далее, для равных интервалов 1881-1892гг. и 1964-1975гг., лежащих в началах не зависимых 83-летних циклов, был сделан расчет t° воздуха в СПб и построен график (рис. 1). При этом значения $t^{\circ}\text{C}$, полученного в интервале 1881-1892гг., рассматриваются (здесь и далее) как прогностический материал для $t^{\circ}\text{C}$, полученного в интервале 1964-1975гг.

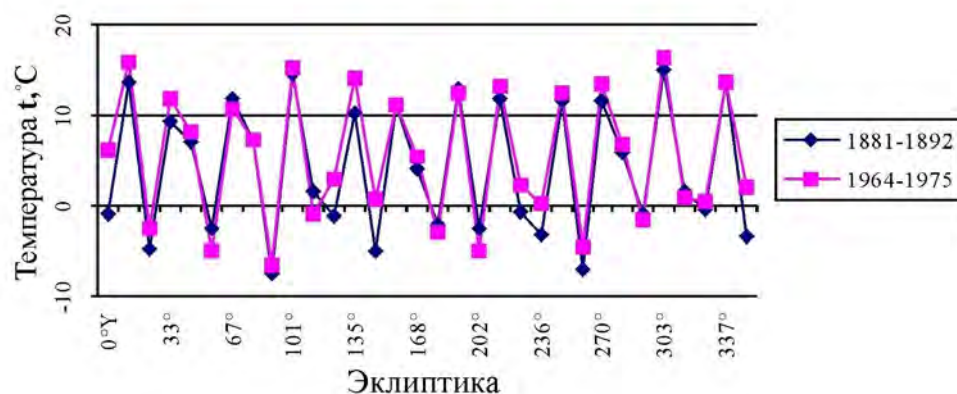


Рис. 1. 83-летние циклы Земли-Юпитера и ход $t^{\circ}\text{C}$ в СПб. Показаны кривые хода $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, в двух равных 11.8-летних интервалах 1881-1892 и 1964-1975гг., синхронно с динамикой Юпитера относительно долгот эклиптики. По горизонтали – эклиптика, разделенная на 32 сектора, с длиной дуги каждого 11.25° , в отсчете от точки весеннего равноденствия (0°Y). По вертикали – динамика хода планет и $t^{\circ}\text{C}$ в СПб.

Из рис. 1 видно – наибольшее расхождение $t^{\circ}\text{C}$ наблюдается в зимние сезоны, что по-видимому связано с теплом, которое выделяют городские коммуникации, т.н. «городской эффект» [17].

Стандартная ошибка $t^{\circ}\text{C}$ в интервалах 1881-1892гг. (прогноз) и 1964-1975гг., полученная здесь и далее методом регрессии, составила 2.32°C .

Далее, по той же логике, был сделан расчет среднесуточных осадков во всех интервалах времени. Сравнение рядов осадков приводится в таблице (табл. 3).

Анализ табл. 3 показывает, что корреляция, полученная при сравнении хода осадков в указанных интервалах, заметно ниже, чем в $t^{\circ}\text{C}$ (табл. 2). Здесь так видно качание фазы с 11.8-летним периодом – интервалы, не имеющие корреляции, интервалы связанные положительной и отрицательной корреляцией и интервалы с относительно высокой корреляцией. Это наблюдается в интервалах разделенных 83.0 летним циклом: 1881-1892гг. и 1964-1975гг. ($r = 0.6$), и интервалах 1892-1904гг. и 1975-1987гг. ($r = 0.65$).

Далее для равных интервалов 1881-1892гг. и 1964-1975гг., лежащих в началах 83-летних циклов, был сделан расчет осадков и построен график (рис. 2).

Стандартная ошибка хода осадков в интервалах 1881-1892 (прогноз) и 1964-1975гг. составила 5.84мм.

Таблица 3

Коэффициенты корреляции осадков в Санкт-Петербурге

Пирсон осадки	1881- 1892	1892- 1904	1904- 1916	1916- 1928	1928- 1940	1940- 1952	1952- 1964	1964- 1975	1975- 1987
1881-1892	1								
1892-1904	0.39	1							
1904-1916	-0.06	0.6	1						
1916-1928	-0.59	-0.1	0.22	1					
1928-1940	-0.63	-0.46	-0.22	0.39	1				
1940-1952	-0.18	-0.53	-0.64	-0.03	0.51	1			
1952-1964	-0.36	0.2	-0.58	0.57	-0.07	-0.36	1		
1964-1975	0.6	0.37	-0.01	-0.48	-0.48	-0.19	-0.17	1	
1975-1987	0.12	0.65	0.64	0.35	-0.28	-0.51	0.46	0.09	1

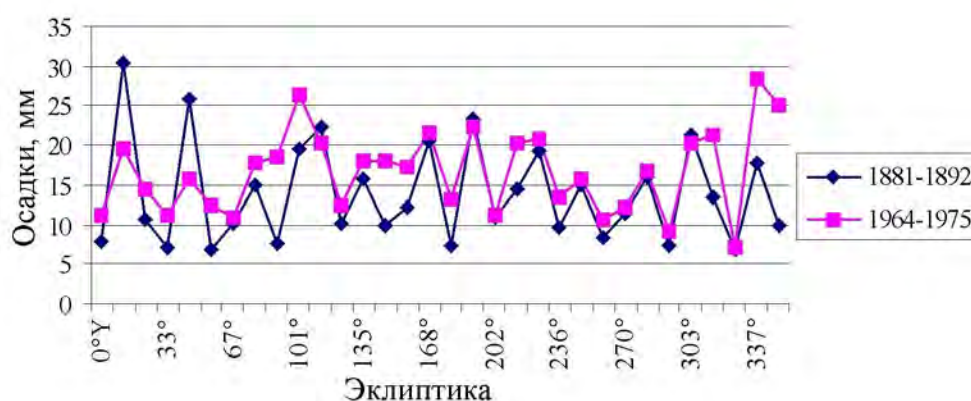


Рис. 2. 83-летние циклы Земли-Юпитера и ход осадков в СПБ. Показан ход осадков в СПБ, в интервалах 1881-1892 и 1964-1975гг. синхронно с динамикой Юпитера относительно долгот эклиптики. По горизонтали – эклиптика, разделенная на 32 сектора, с длиной дуги 11.25°, в отсчете от точки весеннего равноденствия (0°Υ). По вертикали – ход планет и осадков в СПБ.

Далее пользуясь той же логикой был сделан расчет $t^{\circ}\text{C}$ в Москве и построена таблица 4. Анализ данной таблицы также показывает связь динамики Юпитера с $t^{\circ}\text{C}$ в Москве на протяжении всего 83-летнего цикла. В таблице показаны 11.8-летние интервалы $t^{\circ}\text{C}$, у которых отсутствует корреляция, интервалы связанные положительной и отрицательной корреляцией и интервалы с высокой корреляцией и качание фазы с 11.8-летним периодом.

Для равных интервалов 1881-1892гг. и 1964-1975гг., лежащих в началах не зависимых 83-летних циклов был сделан расчет t° воздуха в Москве и построен график (рис. 3).

Таблица 4
Коэффициенты корреляции 83-летних циклов температуры в Москве

	1881-1892	1892-1904	1904-1916	1916-1928	1928-1940	1940-1952	1952-1964	1964-1975	1975-1987
1881-1892	1								
1892-1904	0.58	1							
1904-1916	-0.16	0.65	1						
1916-1928	-0.85	-0.18	0.55	1					
1928-1940	-0.86	-0.85	-0.26	0.61	1				
1940-1952	-0.26	-0.89	-0.9	-0.21	0.57	1			
1952-1964	0.61	-0.2	-0.83	-0.88	-0.26	0.56	1		
1964-1975	0.96	0.53	-0.23	-0.89	-0.84	-0.12	0.7	1	
1975-1987	0.64	0.96	0.57	-0.25	-0.88	-0.83	-0.1	0.57	1

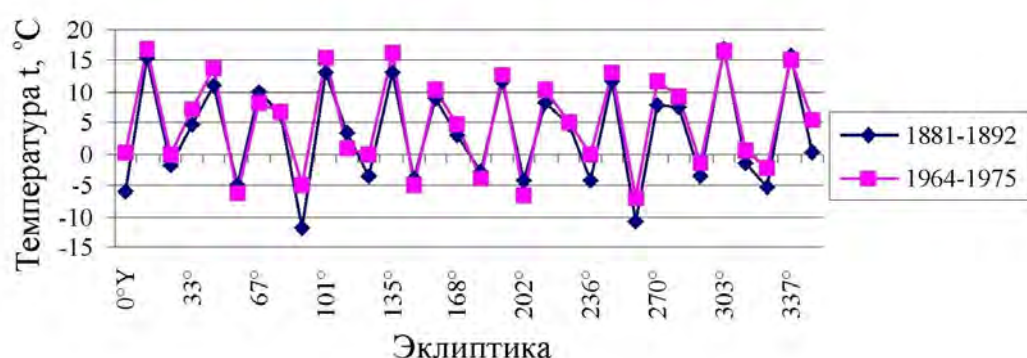


Рис. 3. 83-летние циклы Земли-Юпитера и ход $t^{\circ}\text{C}$ в Москве. Показаны кривые хода $t^{\circ}\text{C}$ в Москве, в двух равных 11.8-летних интервалах 1881-1892 и 1964-1975гг. синхронно с динамикой Юпитера относительно долгот эклиптики. По горизонтали – эклиптика, разделенная на 32 сектора, с длиной дуги каждого 11.25° , в отсчете от точки весеннего равноденствия (0°). По вертикали – динамика хода планет и t° воздуха в Москве.

Стандартная ошибка в интервалах 1881-1892 (прогноз) и 1964-1975гг. составила 2.33°C .

Далее, для равных интервалов 1881-1892гг. и 1964-1975гг., лежащих в началах не зависимых 83-летних циклов был сделан расчет $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге и построена табл. 5.

Анализ данной таблицы также показывает динамику устойчивой связи динамики Юпитера с $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге на протяжении всего 83-летнего цикла – 11.8-летние интервалы $t^{\circ}\text{C}$, у которых отсутствует корреляция, интервалы связанные положительной и отрицательной корреляцией и интервалы с высокой корреляцией (отмечено цветом).

Далее, для равных интервалов 1881-1892гг. и 1964-1975гг., лежащих в началах

не независимых 83-летних циклов был сделан расчет $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге и построен график (рис. 4).

Стандартная ошибка в интервалах 1881-1892 (прогноз) и 1964-1975гг. составила 2.05°C .

Таблица 5
Коэффициенты корреляции 83-летних циклов температуры в Екатеринбурге

	1881-1892	1892-1904	1904-1916	1916-1928	1928-1940	1940-1952	1952-1964	1964-1975	1975-1987
1881-1892	1								
1892-1904	0.53	1							
1904-1916	-0.26	0.63	1						
1916-1928	-0.9	-0.14	0.61	1					
1928-1940	-0.85	-0.87	-0.25	0.57	1				
1940-1952	-0.14	-0.88	-0.89	-0.25	0.61	1			
1952-1964	0.64	-0.25	-0.86	-0.88	-0.18	0.61	1		
1964-1975	0.98	0.54	-0.25	-0.89	-0.84	-0.15	0.62	1	
1975-1987	0.57	0.97	0.6	-0.19	-0.89	-0.86	-0.2	0.56	1

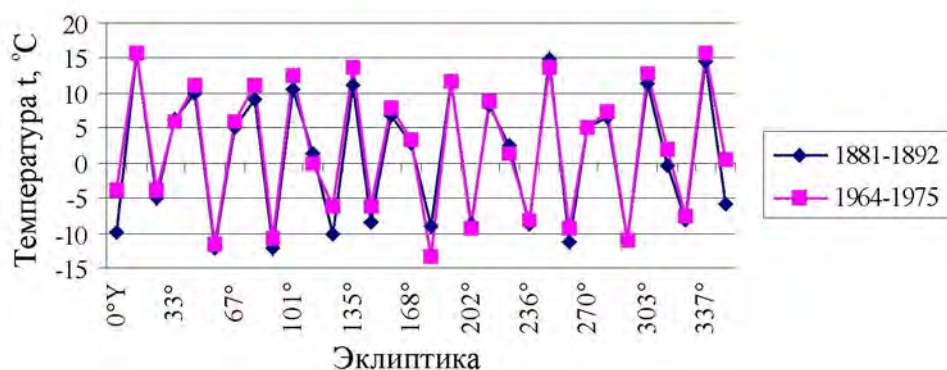


Рис. 4. 83-летние циклы Земли-Юпитера и ход $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге. Показаны кривые хода $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге, в двух равных 11.8-летних интервалах 1881-1892 и 1964-1975гг. синхронно с динамикой Юпитера относительно долгот эклиптики. По горизонтали – эклиптика, разделенная на 32 сектора, с длиной дуги каждого 11.25° , в отсчете от точки весеннего равноденствия (0°). По вертикали – динамика хода планет и $t^{\circ}\text{C}$ в Екатеринбурге.

Результаты эксперимента показали: среднесуточная $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, Москве и Екатеринбурге, в интервалах 1881-1892гг. и 1964-1975гг., которые разделены 83-летним циклом планетной пары Земля-Юпитер, имеют похожий характер кривых и корреляционную связь, которую можно использовать в прогнозировании. В тоже время ход осадков в СПб не имеет связи достаточной для прогнозирования и требуют дополнительных исследований.

2. 83-ЛЕТНИЕ ЦИКЛЫ И ХОД СРЕДНЕМЕСЯЧНЫХ ТЕМПЕРАТУР В САНКТ-ПЕТЕРБУРГЕ

Далее в исследованиях использованы наблюдения $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, где имеется наиболее представительный с единственной лакуной (1800-1804гг.) ряд среднемесячных наблюдений $t^{\circ}\text{C}$ (1775-1982гг.). Также использовался ряд среднесуточных $t^{\circ}\text{C}$ ($\times 10$) в 1881-1995гг.

Пользуясь той же логикой, был сделан расчет среднемесячной $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, в интервалах 19-го века (табл. 6), с распределением относительно 32 секторов, во время прохождения их Юпитером. В табл. 6 представлено время 9-и полных 11.8-летних циклов Юпитера. Интервалы 7-8 принадлежат циклу 1 (1805-1888), интервалы 8-9 принадлежат циклу 2 (1888-1911). L^3 и L^5 , эклиптические долготы Земли и Юпитера. В эти интервалы синхронно с ходом Юпитера относительно эклиптики, исследовалась среднемесячная t° воздуха в СПб.

Таблица 6

11.8-летние циклы Юпитера

	Дата	L^3	L^5	Дата	L^3	L^5
Цикл 1						
1.	01.01.1805	100°	230°	09.11.1816	47°	230°
2.	09.11.1816	47°	230°	19.09.1828	355°	230°
3.	19.09.1828	355°	230°	28.07.1840	305°	230°
4.	28.07.1840	305°	230°	06.06.1852	255°	230°
5.	06.06.1852	255°	230°	14.04.1864	204°	230°
6.	14.04.1864	204°	230°	22.02.1876	152°	230°
7.	22.02.1876	152°	230°	01.01.1888	100°	230°
Цикл 2						
8.	01.01.1888	100°	230°	09.11.1899	47°	230°
9.	09.11.1899	47°	230°	19.09.1911	355°	230°

Пользуясь приведенной выше логикой, был сделан расчет $t^{\circ}\text{C}$, в интервалах (табл. 6), с распределением относительно 32 секторов, во время прохождения их Юпитером (табл. 7).

Анализ таблицы показывает – 11.8-летние интервалы, у которых нет корреляции, интервалы связанные положительной и отрицательной корреляцией и интервалы с высокой корреляцией и качание фазы с 11.8-летним периодом. Высокая корреляция, относится к 11.8-летним интервалам $t^{\circ}\text{C}$, которые разделены 83.0 летним циклом: 1805-1816гг. и 1888-1899гг. ($r = 0.97$), а так же к интервалам 1816-1828гг. и 1899-1911гг. ($r = 0.95$).

Завершая исследования 83-летних циклов, был сделан расчет и построен график (рис. 5), в котором показана связь динамики Юпитера и $t^{\circ}\text{C}$ в СПб в 18-м, 19-м и 20-м веках. В равных 11.86-летние интервалах с 1 января по 11 ноября: 1775-1786гг., 1858-1869гг. и 1941-1952гг. КК при сравнении кривых показанных на графике: 1775-1786 и 1858-1869гг. ($r=0.95$); 1775-1786 и 1941-1952гг. ($r=0.91$); 1858-1869 и 1941-1952гг. ($r=0.92$).

Таблица 7

Коэффициенты корреляции среднемесячной температуры в Санкт-Петербурге

	1805-1816	1816-1828	1828-1840	1840-1852	1852-1864	1864-1876	1876-1888	1888-1899	1899-1911
1805-1816	1								
1816-1828	0.62	1							
1828-1840	-0.18	0.58	1						
1840-1852	-0.82	-0.21	0.62	1					
1852-1864	-0.86	-0.87	-0.26	0.54	1				
1864-1876	-0.24	-0.83	-0.9	-0.26	0.62	1			
1876-1888	0.5	-0.24	-0.89	-0.84	-0.1	0.66	1		
1888-1899	0.97	0.58	-0.24	-0.82	-0.82	-0.16	0.56	1	
1899-1911	0.63	0.95	0.58	-0.21	-0.88	-0.85	-0.25	0.59	1

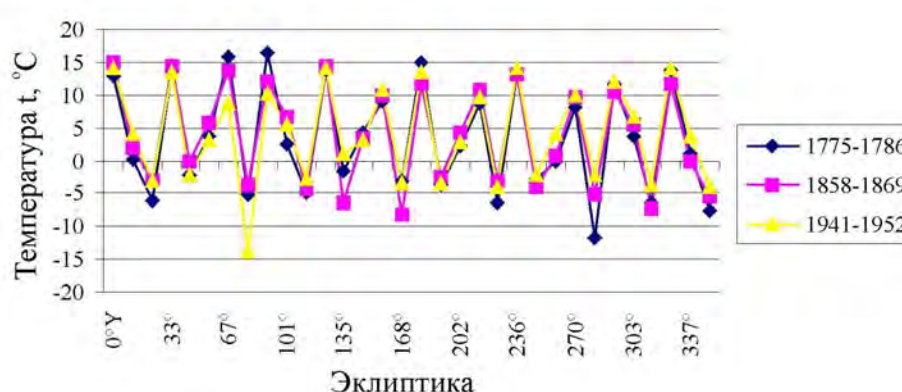


Рис. 5. 83-летние циклы Земля-Юпитер и ход $t^{\circ}\text{C}$ в СПб. Показаны кривые хода $t^{\circ}\text{C}$ воздуха в СПб, в интервалах 1775-1786, 1858-1869 и 1941-1952гг. синхронно с динамикой Юпитера относительно долгот эклиптики. По горизонтали – эклиптика, разделенная на 32 сектора, с длиной дуги каждого 11.25° , в отсчете от точки весеннего равноденствия (0°Y). По вертикали – динамика хода планет и $t^{\circ}\text{C}$ в СПб.

Полученные коэффициенты корреляции показали тесную связь 83-летних колебательных процессов – метеорологического и астрономического. Также они показали, что 83-летний цикл Юпитера состоит из набора 11.856-летних циклов (табл. 8).

Таблица 8

Астрономические циклы Юпитера

1.	11.856 года	5.	59.28 года
2.	23.712 года	6.	71.136 года
3.	35.568 года	7.	83.0 года
4.	47.424 года		

3. АПРОБИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГНОЗА И ПРОГНОСТИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП

Проверка полученных закономерностей (табл. 2, 5, 7) осуществлялась на трех летнем ряде абсолютных среднемесячных $t^{\circ}\text{C}$, в интервале январь 1980 - декабрь 1982гг. В качестве материала для прогноза использовались среднемесячные $t^{\circ}\text{C}$, в интервале: январь 1897г. – декабрь 1899г. (ГЦ-индекс 83-летнего цикла). На основании полученных данных был построен график (рис. 6).

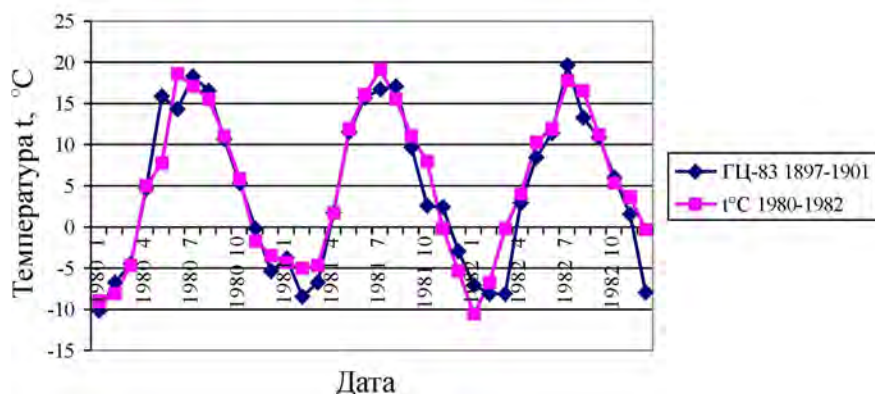


Рис. 6. Прогноз ГЦ83 и реальная $t^{\circ}\text{C}$ в СПб (проверка технологии прогноза). Показаны кривые ГЦ83-прогноза (1897-1899) и абсолютных среднемесячных $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, в интервале январь 1980 – декабрь 1982гг.

В данном случае корреляция ($r=0.948$) показывает, что прогнозируемая и абсолютная $t^{\circ}\text{C}$ в СПб имеют связь. Стандартная ошибка, полученная методом регрессии, между предвычисленным значением и реальной температурой воздуха, в интервале 1980-1982гг. составила 3.03°C .

На основании полученного результата сделан вывод – технология позволяет делать сверхдолгосрочный прогноз среднемесячной температуры воздуха в СПб, при этом ошибка может составить $2-3^{\circ}\text{C}$.

Прогностический принцип технологии: при нахождении достоверной связи между астрономическим и метеорологическим циклами, на будущее переносится весь ход температур, для соответствующего временного интервала.

4. ПРОГНОЗ СРЕДНЕМЕСЯЧНЫХ ТЕМПЕРАТУР В САНКТ-ПЕТЕРБУРГЕ В ИНТЕРВАЛЕ 2010-2014 ГГ.

Для расчета ГЦ-прогноза 2010-2014гг. использовались абсолютные среднемесячные температуры воздуха в СПб, предыдущего 83-летнего цикла в интервале 1927-1931гг. Эти значения будем использовать в качестве ГЦ-прогноза среднемесячных $t^{\circ}\text{C}$ в СПб, в интервале 2010-2014гг.

Таблица 9

Прогноз (ГЦ-83) среднемесячной температуры воздуха в СПб в 2010-2014гг.

	1927- 2010	1928- 2011	1929- 2012	1930- 2013	1931- 2014	Δt°
Январь	-9.7	-5.6	-10.3	-2.6	-0.9	-8.0
Февраль	-6.8	-7.7	-16.4	-5.8	-6.5	-7.9
Март	-1.8	-4.3	-5.0	-3.8	-1.5	-3.9
Апрель	2.5	2.8	-1.8	3.4	5.0	3.0
Май	7.1	10.3	11.9	12.1	12.3	9.6
Июнь	13.3	11.5	13.6	15.3	14.6	15.1
Июль	21.5	14.7	17.5	18.6	18.1	17.9
Авг.	18.4	15.0	16.5	16.5	17.4	16.2
Сент.	10.9	10.8	10.4	9.9	8.7	11.0
Окт.	3.0	5.1	6.9	6.8	5.7	5.0
Ноя.	-2.8	2.8	2.0	2.6	1.3	0.9
Дек.	-8.0	-3.1	-1.6	0.2	-6.9	-5.3

Далее, при построении графика (рис. 7) использовались абсолютные среднемесячные $t^\circ\text{C}$ в СПб: ГЦ83 (1927-1931гг.) и среднемесячные $t^\circ\text{C}$ в СПб полученные в 2010г. (табл. 11).

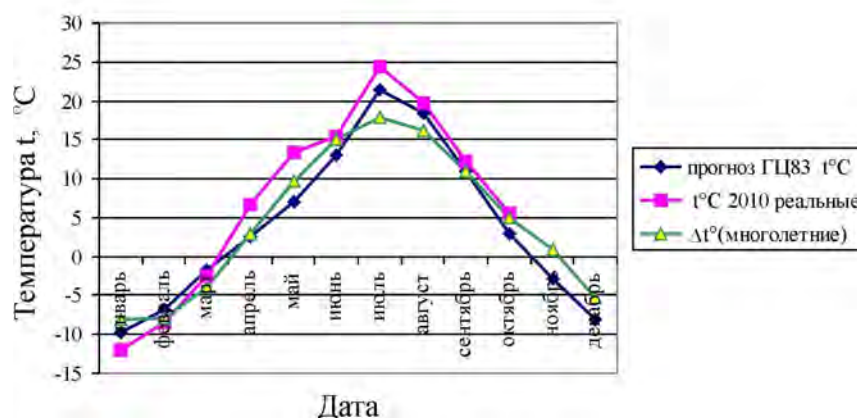


Рис. 7. Прогноз ГЦ83, реальные $t^\circ\text{C}$ 2010г. и многолетние $\Delta t^\circ\text{C}$. Показаны кривые: прогноза 83-летнего цикла (ГЦ-83), и реальной среднемесячной $t^\circ\text{C}$ в СПб в 2010г., и средних многолетних $t^\circ\text{C}$ (1775-2009).

Стандартная ошибка, при сравнении ряда ГЦ прогноза и реальной $t^\circ\text{C}$ (январь-октябрь) 2010г., составила 2.029°C .

Далее на основании табл. 11 построена гистограмма ГЦ-прогноза $t^\circ\text{C}$ в СПб (рис. 8), в интервале 2010-2014гг. и многолетней средней $t^\circ\text{C}$, для каждого месяца (1775-1982гг.).

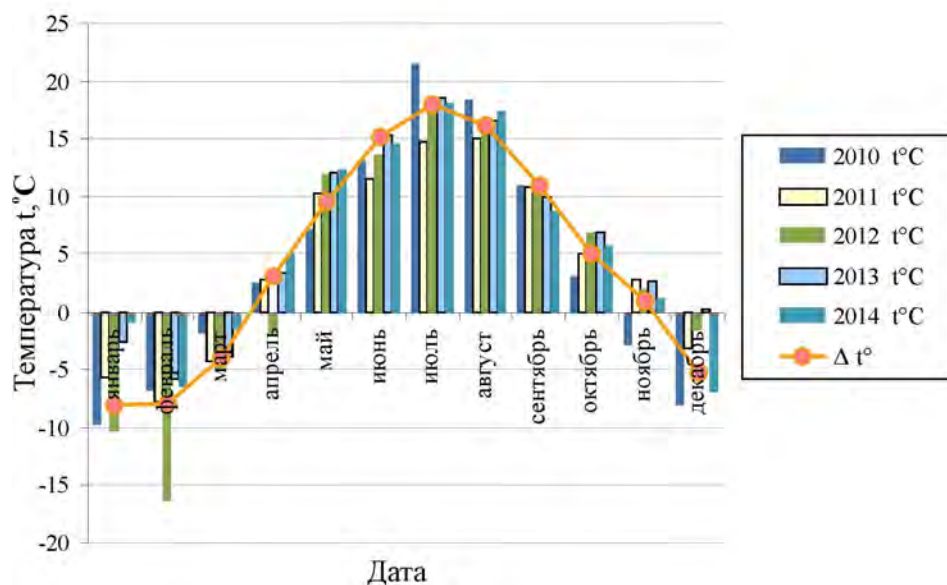


Рис. 8. Прогноз ГЦ83 среднемесячной $t^{\circ}\text{C}$ в СПб 2010-2014гг. Показан среднемесячный ГЦ-прогноз $t^{\circ}\text{C}$ и многолетние среднемесячные $\Delta t^{\circ}\text{C}$ (1775-1982гг.).

Анализ графика показывает, что в ближайшие годы можно ждать значительные отклонения от нормы среднемесячной температуры в июле (21.5°C , при $\Delta 17.9^{\circ}\text{C}$) и декабре 2010 года (-10.8°C , при $\Delta -4.8^{\circ}\text{C}$), также в феврале 2012 года (-16.4°C , при $\Delta -7.8^{\circ}\text{C}$). Стандартная ошибка между прогнозируемыми и реальными температурами может составить $2-3^{\circ}\text{C}$.

5. СВЯЗЬ МЕЖДУ СОЛНЕЧНОЙ АКТИВНОСТЬЮ (SSN) И ПОГОДОЙ-КЛИМАТОМ В САНКТ-ПЕТЕРБУРГЕ

Поскольку активности Солнца уделяется много внимания, точку в этой работе мы поставим на ней. Как показано в статье «Солнечные циклы и климат» астрофизики настаивают, что основным космическим фактором, влияющим на погоду, является солнечная активность, но их прогнозы, сделанные численными методами, неудачны. Сегодня сами числа W и РИ 10.7см, можно прогнозировать на довольно не плохом уровне [12, 13], но на сколько будет эффективным прогноз погоды-климата, сделанный этими инструментами? В данном исследовании мы применим планетный индекс (CW) сделанный, для определения минимумов СА, не вдаваясь в его технологию, так как работа [13], опубликована. На графике (Рис.9) показаны числа Вольфа (SSN, 1975-2007гг.), вес Венеры (CW), на моменты конфигураций (90°) в планетной паре Земля-Юпитер, интервале 1975-2030гг., и среднегодовые температуры воздуха в СПб (1973-2009гг.).

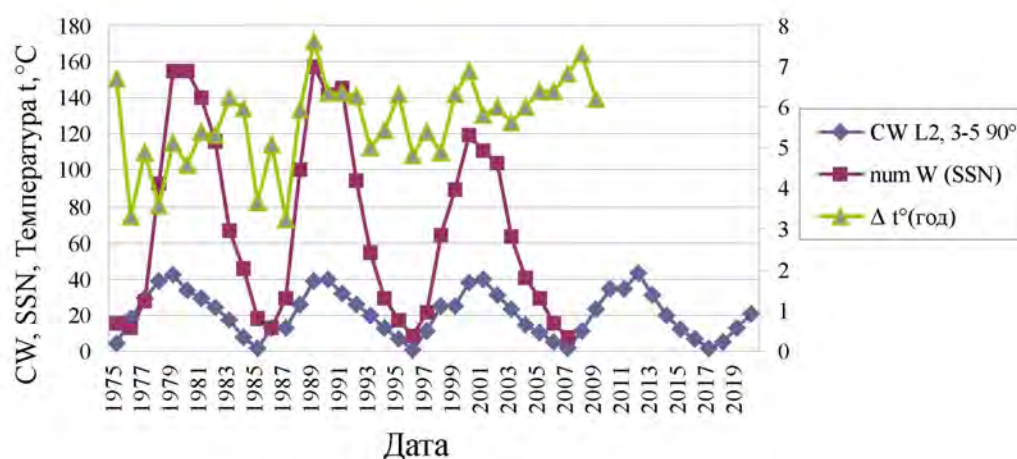


Рис. 9. Динамика чисел W (SSN), температуры воздуха в СПб и планетарного CW-индекса. Показаны кривые: число W (SSN), среднегодовые температуры воздуха в СПб (Δt° год) и планетный CW-индекс (CW L2 3-5 90°). По горизонтали – даты, по вертикали – числа W, $t^\circ\text{C}$ и CW-индекс.

Коэффициенты корреляции, приведенные в таблице 12, показывают относительно хорошую связь солнечной активности с CW-индексом. Низкую связь между числами W и температурами воздуха и отсутствие связи между ними и CW-индексом. То есть, умения прогнозировать солнечную активность – не достаточно, для прогноза погоды-климата и нужно обратить внимание на планеты.

Таблица 12

Коэффициенты корреляции полученные между числами Вольфа, планетным CW-индексом и температурами воздуха в Санкт-Петербурге

	CW L2 3-5 90°	Num W (SSN)	$\Delta t^\circ(\text{год})$
CW L2 3-5 90°	1		
num W (SSN)	0.876	1	
$\Delta t^\circ(\text{год})$	0.069	0.236	1

Завершая статью можно сказать – результат полученный эмпирически показал что взаимное расположение Земли и Юпитера, в гелиоцентрической эклиптической системе координат, через 83.0 года, повторяется с высокой точностью. Этот 83-летний цикл, содержит 7 сидерических периодов Юпитера и 83 периода Земли, стабилен в интервале действия эфемериды DE200 (1600-2159гг.) и имеет статистическую связь с известным 83-летним циклом, обнаруженным в ходе климата.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В процессе исследований погоды-климата в разных географических точках было найдено, что ход температуры воздуха ($t^{\circ}\text{C}$) и осадков в интервале 1881-1892гг. имеет корреляционную связь с ходом $t^{\circ}\text{C}$ и осадков в интервале 1964-1975гг. То есть вариации хода погоды вначале одного (1881-1964) 83-летнего цикла повторяются или имеют преемственность в начале следующего (1964-2047) 83-летнего цикла. Полученная связь достоверна и имеет прогностическую ценность.

Уместно отметить две особенности: а) эффект является локальным – в другом пункте обсуждаемая связь может быть сильнее или слабее, но конкретно она будет иной; б) феноменологически, этот эффект, по-видимому можно рассматривать, как проявление максимально-резонансных свойств Солнечной системы.

Простейший вариант локального прогноза: среди предыдущих лет отыскивается год с такими же координатами планет на некоторую дату, как и в прогнозируемом году. При нахождении достоверной связи между астрономическим и метеорологическим циклами, на будущее переносится весь ход вариаций температур (осадков и т.д.), для соответствующего временного интервала. Пример – среднемесячные температуры 1927 года (январь-октябрь), со среднеквадратичным отклонением 2.03°C , повторились в 2010 году, то есть прогноз оправдался.

Но климатические процессы многоциклические и поиски астрономических циклов связанных с погодой-климатом продолжаются. В ходе исследований обнаружен 206-летний цикл планетной пары Земля-Сатурн. Через этот интервал взаимное расположение планет, в гелиоцентрической эклиптической системе координат, повторяется с высокой точностью (отклонение $\sim 0.7^{\circ}$). Также обнаружен 32-летний цикл внутренних планет Венеры-Земли-Марса и т.д., показ этих результатов требует отдельной статьи.

Использование найденного 83-летнего цикла нужно рассматривать, как пример исследовательского подхода и первое приближение к долгосрочному прогнозу погоды-климата. Уточнение прогноза – особая задача, которую нужно решать путем поиска и исследования циклов, как в высокочастотной, так и в низкочастотной части спектра. В непосредственной близости к найденному 83-летнему циклу находятся: сидерический период Урана (84.01 года), $1/2$ сидерического периода Нептуна (82.4 года), $1/3$ сидерического периода Плутона (82.57 года). И чтобы глубоко и детально разобраться в вековом цикле и более низкочастотных циклах, необходимо исследовать максимально длинные ряды наблюдений.

Считаем, что показанный в статье подход, выполненный на фундаменте классической (небесной) механики, оправдан, поставленная цель достигнута, и исследования в данном направлении нужно продолжить.

Автор признателен Румянцеву В.В., Владимирскому Б.М., Мартынюку В.С., Бержанскому В.Н. и Михайловой Т.В., за оказанную в процессе работы помощь.

Список литературы

1. О колебаниях глобального климата за последние 150 лет / Доненко Н.М. и др. // География. – 2004. – Т. 399, № 2. – с. 253-256.
2. Солнце, погода и климат: сегодняшний взгляд на проблему (обзор) / Авдюшин С.А. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. – 2000. – Т. 40, № 5.
3. Влияние солнечной активности на погоду в Петербурге - Ленинграде / Пудовкин М.И. и др. // Магнитосферные исследования. – 1990. – № 14. – с. 106-119.
4. Хромов С.П. Солнечные циклы и климат [электронный ресурс] / Хромов С.П. // Метеорология и гидрология. – 1973. – № 9. – <http://meteocenter.net/meteolib/sun2.html>
5. Молчанов А.М. Резонансы в многочастотных колебаниях / Молчанов А.М. // Доклад АН СССР. – 1966. – Т. 168, № 2. – с. 284-287.
6. Резонансные свойства солнечной системы, солнечная активность и вопросы солнечно-земных связей / Панкратов А.К, Владимирский Б.М. и др. – Симферополь, 1996. – С. 76.
7. Иванов В.В. Периодические колебания погоды и климата / Иванов В.В. // УФН. – 2002. – Т. 172, № 7 – С. 177-811.
8. Галимов Э.М. Замыслы и просчеты: фундаментальные космические исследования в России последнего десятилетия. Двадцать лет бесплодных усилий [электронный ресурс] / Галимов Э.М. – М.: Едиториал УРСС, 2010. – http://www.ng.ru/2010-03-24/10_marc.html
9. Научно-практическая конференция «Гидрометеорологические прогнозы и гидрометеорологическая безопасность» [электронный ресурс], Москва, 2004. – <http://meteonovonovosti.ru/index.php?code=418value=7#2>
10. Климат как проблема физики / Монин А.С. и др. // УФН. – Т. 170. – 2000. – с. 419.
11. Тер-Степанян Г.И. Ближайшие задачи геомеханики / Тер-Степанян Г.И. // Проблемы геомеханики, Ер. – 1967. – № 1.
12. Новые направления исследования Солнца и солнечно-земных связей в АО Киевского Университета / Романчук и др. // Вестник Киевского Университета, Астрономия – 1984. – № 26 – С. 45-60.
13. Нарманский В.Я. Солнечная активность и планетные конфигурации. Новые возможности прогнозирования / Нарманский В.Я. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. – 2007. – Серия «Биология, химия». – Т. 20(59), № 1. – С. 175-188.
14. Нарманский В.Я. Возвращаясь к вопросу о природе 11-летних циклов / Нарманский В.Я. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия «Биология, химия». – 2007. – Т.20(59), №4. –С. 67-73.
15. Нарманский В.Я. Солнечные циклы и динамика внешних планет: конф. «Физика Солнца: наблюдения и теория» [электронный ресурс] / Нарманский В.Я. – КрАО, 2009. – http://solar.crao.crimea.ua/rus/archive/conf/2009/abs_text.htm
16. Standish E.M. An approximation to the outer planet ephemeris errors in JPL's DE200 / Standish E.M. // Astron. Astrophys. – 1990. – vol. 233. – pp. 272-274.
17. Орлов А.И. Прикладная статистика / Орлов А.И. – М.: Издательство «Экзамен», 2004.
18. Формирование и особенности острова тепла в большом городе / Матвеев Л.Т. и др. // Оптика атмосферы и океана. – 1997. – № 10. – с. 1181-1187.

Нарманський В.Я. Кореляційний зв'язок погоди-клімату з планетними циклами / Нарманський В.Я. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), № 3. – С. 24-41.

Показано зв'язок планетних конфігурацій з ходом погоди-клімату в Санкт-Петербурзі, Москві та Єкатеринбурзі. Докладно розглянута зв'язок клімату Санкт-Петербурга з 32-річними циклами Венери-Земля-Марс і 83-річними циклами планетної пари Земля-Юпітер. На підставі отриманих результатів зроблено висновки - в даний час (2010-2014гг.) Клімат в Петербурзі буде мати зв'язок з ходом клімату в інтервалах 1927-1931гг. і 1978-1982рр. Стандартна помилка між предвчисленними значеннями й реальними температурами С і методом повітря здобута методом регресії 2.0°C середньоквадратичного відхилення 1.97°C.

Ключові слова: екліптика, Марс, Юпітер, температура, опади.

Narmansky V.J. Correlation of weather, climate and planetary cycles / Narmansky V.J. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No. 3. – P. 24-41.

The relationship of planetary configurations with the course of weather-climate in St. Petersburg, Moscow and Yekaterinburg. The article details the communication climate of St. Petersburg with a 32-year cycles Venus-Earth-Mars and the 83-year cycles of the planetary pair of Earth-Jupiter. Based on these findings concluded that - at this time (2010-2014gg.) Climate in St. Petersburg will have a connection with the course of climate in the intervals 1927-1931. and 1978-1982gg. The standard error between the precomputed values and the actual air C and by the standard°temperatures obtained by regression 2.0°C. deviation of 1.97°C.

Keywords: ecliptic, Mars, Jupiter, temperature, precipitation.

Поступила в редакцию 14.09.2010 г.

УДК 535.1

СТРУКТУРА МОД И ЭВОЛЮЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ С АКУСТООПТИЧЕСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Алексеев К.Н., Баршак Е.В., Яворский М.А.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: mayavorsky@yahoo.com*

Определены структура оптических мод и спектр постоянных распространения оптического волокна, по которому распространяется изгибная акустическая волна. На основании полученных результатов дано объяснение экспериментально наблюдаемого эффекта модовой конверсии, которая сопровождается изменением частоты оптического поля. Рассмотрена эволюция оптических вихрей в данном волокне.

Ключевые слова: акустооптика, оптический вихрь.

ВВЕДЕНИЕ

Явление взаимодействия между световыми и акустическими волнами в различных средах хорошо изучено в физике [1]. Ряд работ был посвящен изучению акустооптических (АО) эффектов в оптических волокнах [2-10], на основании которых были созданы такие устройства для оптоволоконных систем как амплитудные и фазовые модуляторы, переключатели, частотные преобразователи и т.п. Физическая причина, обуславливающая АО взаимодействие, состоит в том, что акустическая волна создает напряжения в образце, которые, вследствие фотоупругости, вызывают изменения в коэффициенте преломления среды. Это приводит, например, к спариванию различных мод, распространяющихся в оптических волокнах. Кроме того, так как индуцированная волоконная решетка распространяется вместе с акустической волной, дифракция падающего пучка может сопровождаться изменением его частоты на величину частоты акустической волны.

Было установлено [2-10], что изгибная акустическая волна приводит к связи между двумя модами, чьи азимутальные числа отличаются на единицу, например, между $LP_{0,n}$ и $LP_{1,n}$ модами (второй индекс является радиальным числом моды). Отметим, что четность спариваемых оптических мод зависит от «поляризации» распространяющейся изгибной волны: для «у-поляризованной» акустической волны четная $LP_{0,n}$ мода спаривается с нечетной $LP_{1,n}$ модой. Эффективность передачи энергии между модами зависит от выполнения резонансного условия: $L = L_B$, где

L - длина акустической волны и $L_B = \frac{2\pi}{|\beta_1 - \beta_2|}$ - длина биений между двумя

оптическими модами с постоянными распространения β_1 и β_2 , соответственно.

Если это условие строго выполняется, то на некотором расстоянии вдоль волокна вся энергия полностью переносится из одной оптической моды в другую. В противном случае процесс передачи гораздо менее эффективен. С точки зрения волновой оптики, резонансное условие является условием Брэгга, согласно которому, падающие и преломляющиеся волны усиливают друг друга [1]. В терминах фотонно-фононного взаимодействия это условие является ничем иным как законом сохранения импульса [11].

Несмотря на существование большого количества работ, посвященных исследованию АО взаимодействия в оптических волокнах, до сих пор не была решена задача о структуре мод волокон при наличии в них изгибной акустической волны. Между тем, располагая модовой структурой, можно эффективно решать практически важные задачи о распространении произвольных оптических полей в таких волокнах. В частности, актуальной является задача о распространении оптических вихрей (ОВ) [12], которые являются особым видом дислокаций волнового фронта, введенных Наем и Берри [13]. Это объясняется наличием у ОВ ряда уникальных свойств, которые находят свое применение в различных практических приложениях (например, [14-16]).

Таким образом, в данной работе мы преследуем две главных цели. Первая цель – установить структуру мод и спектр постоянной распространения оптических волокон в присутствии изгибной акустической волны. Вторая цель – изучить эволюцию оптических вихрей с единичным топологическим зарядом.

1. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ПРИ НАЛИЧИИ АО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В качестве модели рассмотрим оптическое волокно с круглым поперечным сечением, радиус сердцевины которого r_0 (Рис. 1).

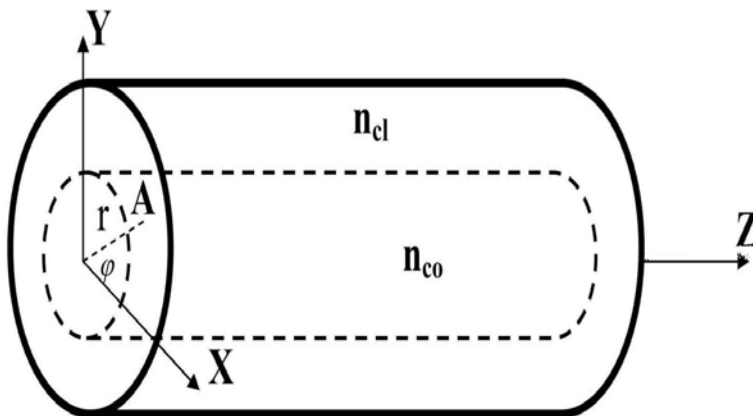


Рис. 1. Модель идеального ступенчатого оптического волокна. Коэффициенты преломления сердцевины и оболочки волокна n_{co} и n_{cl} , соответственно.

Коэффициент преломления волокна в присутствии изгибной «у-поляризованной» волны имеет вид [10]:

$$n^2(\mathbf{r}, t) = n^2(\mathbf{r}) + n_{co}^2 (1 + \chi) K^2 U_0 y \cos(\Omega t - Kz), \quad (1)$$

где $n^2(\mathbf{r}) = n_{co}^2 (1 - 2\Delta \cdot f(\mathbf{r}))$, $\Delta = (n_{co}^2 - n_{cl}^2) / 2n_{co}^2$ – высота профиля показателя преломления, n_{co} и n_{cl} – значения показателя преломления в сердцевине и оболочке, соответственно; K , Ω и U_0 – волновое число, частота и амплитуда акустической волны, соответственно, $\chi = -0.22$ (для кварца). В этой работе мы рассматриваем волокна со ступенчатым профилем показателя преломления:

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, R \leq l, \\ 1, R > l, \end{cases} \text{ где } R = \frac{r}{r_0}.$$

Как известно [17], распространение света через диэлектрическую среду описывается векторным волновым уравнением:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (n^2(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}) = -\nabla (\mathbf{E} \cdot \nabla \ln n^2(\mathbf{r}, t)), \quad (2)$$

где $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$, c – скорость света в вакууме, $\mathbf{E}$ – электрическое поле. В первую очередь, следует отметить, что, принимая во внимание порядок

производных: $\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \propto \omega \mathbf{E}$, $\frac{\partial n^2}{\partial t} \propto \Omega \Delta n$, где ω – частота света,

$\Delta n = n_{co} (1 + \chi) K^2 U_0 r_0$, и, что обычно $\frac{\Omega}{\omega} \ll 1$ и $\frac{n^2}{\Delta n} \ll 1$, можно пренебречь производными относительно времени в уравнении (2):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} (n^2(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}) \approx n^2(\mathbf{r}, t) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (3)$$

Кроме того, градиентный член в правой части уравнения (2), описывающий спин-орбитальное взаимодействие (СОВ), имеет довольно сложную структуру при наличии АО взаимодействия. В первом приближении имеем:

$$\nabla \ln n^2(\mathbf{r}, t) = \frac{\nabla n^2(\mathbf{r}, t)}{n^2(\mathbf{r}, t)} \approx \nabla \ln n^2(\mathbf{r}) + \mathbf{e}_y \frac{\Delta n}{r_0 n_{co}^2} \cos(\Omega t - Kz), \text{ таким образом,}$$

градиентный член имеет вид:

$$\nabla (\mathbf{E} \cdot \nabla \ln n^2(\mathbf{r}, t)) \approx \nabla (\mathbf{E} \cdot \nabla \ln n^2(\mathbf{r})) + \frac{\Delta n}{r_0 n_{co}^2} \nabla (E_y) \cos(\Omega t - Kz), \quad (4)$$

где первое слагаемое описывает СОВ в идеальных волокнах, в то время как второе слагаемое возникает из-за АО взаимодействия. Легко видеть, что порядок первого члена в (4) $\frac{\Delta}{r_0^2}$, а второго – $\frac{\Delta n}{r_0^2}$. Мы будем рассматривать слабонаправляющие

оптические волокна ($\Delta \sim 10^{-2} - 10^{-3}$). В стандартных экспериментах с волоконными АО устройствами $\Delta n \ll \Delta$, таким образом, второе слагаемое в (4) может быть отброшено. Далее, принимая во внимание то, что АО взаимодействие в

скалярной части уравнения (2) имеет порядок $\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \Delta n$, и то, что для стандартных волокон $r_0 \gg \lambda$, в первом приближении мы можем пренебречь градиентным членом в уравнении (2) и рассматривать скалярное волновое уравнение:

$$\left\{ \nabla^2 - \left(\frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2} + \alpha y \cos(\Omega t - Kz) \right) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right\} \mathbf{E} = 0, \quad (5)$$

где $\alpha = \frac{n}{c^2} (1 + \chi) U_0 K^2$.

Одна из главных особенностей уравнения (5) – нарушение трансляционной инвариантности по времени, поэтому мы будем искать решение в виде ряда Фурье:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{e}_m(\mathbf{r}) e^{-i(\omega + m\Omega)t}. \quad (6)$$

Из (5) и (6) получаем следующее уравнение:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ e^{-im\Omega t} \left(\nabla^2 + k_m^2 n^2(\mathbf{r}) \right) + \frac{\alpha y \omega_m^2}{2} \left(e^{-i[(m-1)\Omega t + Kz]} + e^{-i[(m+1)\Omega t - Kz]} \right) \right\} \mathbf{e}_m(\mathbf{r}) = 0, \quad (7)$$

где $k_m = \frac{\omega_m}{c}$ и $\omega_m = \omega + m\Omega$. Изменим индексы суммирования в членах,

пропорциональных множителям $e^{-i[(m \mp 1)\Omega t \pm Kz]}$: $m \rightarrow m-1$ и $m \rightarrow m+1$, соответственно:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Omega t} \left\{ \left(\nabla^2 + k_m^2 n^2(\mathbf{r}) \right) \mathbf{e}_m + \frac{\alpha y}{2} \left(\omega_{m+1}^2 \mathbf{e}_{m+1} e^{-iKz} + \omega_{m-1}^2 \mathbf{e}_{m-1} e^{iKz} \right) \right\} = 0, \quad (8)$$

Так как функции $e^{-im\Omega t}$ линейно независимы, необходимо потребовать, чтобы все коэффициенты в (8) были равны нулю:

$$\left(\nabla^2 + k_m^2 n^2(\mathbf{r}) \right) \mathbf{e}_m + \frac{\alpha y}{2} \left(\omega_{m+1}^2 \mathbf{e}_{m+1} e^{-iKz} + \omega_{m-1}^2 \mathbf{e}_{m-1} e^{iKz} \right) = 0. \quad (9)$$

Легко заметить, что уравнения в системе (9) не обладают трансляционной инвариантностью по z . Чтобы восстановить это свойство, введем новые поля:

$$\tilde{\mathbf{e}}_m(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_m(\mathbf{r}) \exp(-imKz). \quad (10)$$

Будем искать решение в факторизованном виде: $\tilde{\mathbf{e}}_m(\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{e}}_m(x, y) \exp(i\beta z)$, что приводит к следующей системе уравнений:

$$\left(\nabla_t^2 + k_m^2 n^2(\mathbf{r}) - 2mK\beta - (mK)^2 \right) \tilde{\mathbf{e}}_m + \frac{\alpha y}{2} \left(\omega_{m+1}^2 \tilde{\mathbf{e}}_{m+1} + \omega_{m-1}^2 \tilde{\mathbf{e}}_{m-1} \right) = \beta^2 \tilde{\mathbf{e}}_m, \quad (11)$$

где β – постоянная распространения. Система (11) представляет собой бесконечный набор уравнений, описывающих распространение света в оптических волокнах при наличии АО взаимодействия в скалярном приближении.

2. РЕЗОНАНСНЫЕ МОДЫ

Перепишем систему (11) для поперечных компонент векторов $\tilde{\mathbf{e}}_m$ в следующем операторном виде:

$$(H_0 + V_{AO})|\psi\rangle = \beta^2 |\psi\rangle, \quad (12)$$

где кет-вектор $|\psi\rangle = \text{col}(\dots, \tilde{\mathbf{e}}_{-1}, \tilde{\mathbf{e}}_0, \tilde{\mathbf{e}}_{+1}, \dots)$,

$H_0 = \nabla_t^2 I + n^2(\mathbf{r}) \text{diag}(\dots, k_{-1}^2 + 2K\beta - K^2, k_0^2, k_{+1}^2 - 2K\beta - K^2, \dots)$ – оператор, определяющий моды идеальных волокон с оптическими частотами ω_m , I –

единичная матрица, $V_{AO} = \frac{\alpha y}{2} \begin{pmatrix} \ddots & \omega_{-1}^2 & 0 & 0 & 0 \\ \omega_{-2}^2 & 0 & \omega_0^2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{-1}^2 & 0 & \omega_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_0^2 & 0 & \omega_2^2 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_1^2 & \ddots \end{pmatrix}$ – оператор,

характеризующий влияние изгибной акустической волны в скалярном случае. Так как $V_{AO} \ll H_0$, структуру мод и соответствующие постоянные распространения можно установить, используя теорию возмущений. Выбор типа данной теории, как известно, зависит от свойств спектра оператора нулевого приближения H_0 .

Соответствующее уравнение нулевого приближения на собственные значения имеет вид: $(H_0 - \bar{\beta}^2) \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle = 0$, где $\left| \psi_m^{(0)} \right\rangle = \text{col} \left(\dots, 0, \tilde{\mathbf{e}}_m^{(0)}(x, y), 0, \dots \right)$. Это приводит

к следующему уравнению на амплитуды $\tilde{\mathbf{e}}_m^{(0)}$:

$$\left(\nabla_t^2 + k_m^2 n^2(\mathbf{r}) \right) \tilde{\mathbf{e}}_m^{(0)} = (\bar{\beta} + mK)^2 \tilde{\mathbf{e}}_m^{(0)}, \text{ решения которого могут быть выбраны в}$$

виде циркулярно-поляризованных ОБ $|m, \sigma, l\rangle$, которые в базисе $\begin{pmatrix} \tilde{e}_x \\ \tilde{e}_y \end{pmatrix}$ определены

как:

$$|m, \sigma, l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} F_{m,l}(r) \begin{pmatrix} 1 \\ i\sigma \end{pmatrix} e^{il\varphi}, \quad (13)$$

где (r, φ) – полярные координаты, m определяет оптическую частоту ОБ, $\sigma = \pm l$ определяет знак циркулярной поляризации, l – топологический заряд ОБ, и радиальная функция $F_{m,l}(r)$ удовлетворяет уравнению [23]:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + k_m^2 n^2(r) - \frac{l^2}{r^2} - (\bar{\beta} + mK)^2 \right) F_{m,l}(r) = 0. \quad (14)$$

Собственные значения $\bar{\beta}_{m,l}$, соответствующие полям $|m, \sigma, l\rangle$, имеют вид:

$$\bar{\beta}_{m,l} = \tilde{\beta}_{m,l} - mK, \quad (15)$$

где $\tilde{\beta}_{m,l}$ – известная скалярная постоянная распространения [17], соответствующая моде с волновым числом k_m , радиальное число было опущено. Как следует из (15), при некотором значении вектора K акустической волны имеет место пересечение двух спектральных линий нулевого порядка $\bar{\beta}_{m,l}$ и $\bar{\beta}_{m',l'}$:

$$K(m,l;m',l') = \frac{\tilde{\beta}_l - \tilde{\beta}_{l'}}{m - m'}, \quad (16)$$

где $\tilde{\beta}_l \equiv \tilde{\beta}_{0,l} \approx \tilde{\beta}_{m,l}$, так что в этой точке мы пренебрегаем зависимостью $\tilde{\beta}_{m,l}$ от индекса m , потому что $\tilde{\beta}_{m,l} \approx \tilde{\beta}_{0,l} + m \frac{\Omega}{c}$ и $\frac{\Omega}{\tilde{\beta}_{0,l}c} \propto \frac{\Omega}{n_{co}\omega} \ll 1$. Выражение (16)

определяет, какие из мод нулевого порядка $|m, \sigma, l\rangle$ могут спариваться оператором возмущения V_{AO} наиболее эффективно, т.е. обеспечивая в резонансном режиме передачу всей энергии от одной моды к другой. Этот факт связан со случайным вырождением в спектре постоянных распространения (15).

Рассмотрим важный для практики случай оптических волокон, поддерживающих распространение только $l=0$ и $l=1$ мод. Используя резонансный метод, описанный в [18], получаем следующие моды в базисе

$$\begin{pmatrix} e_x(\mathbf{r}, t) \\ e_y(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}:$$

$$\left| \psi_{1,2}^{A_0} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \left[\sin \theta F_0(\mathbf{r}) + \sqrt{2} \cos \theta F_1(\mathbf{r}) \sin \varphi e^{i(\Omega t - Kz)} \right] e^{i \left(-\omega t + \beta_1^{A_0} z \right)},$$

$$\left| \psi_{3,4}^{A_0} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \left[\cos \theta F_0(\mathbf{r}) - \sqrt{2} \sin \theta F_1(\mathbf{r}) \sin \varphi e^{i(\Omega t - Kz)} \right] e^{i \left(-\omega t + \beta_2^{A_0} z \right)},$$

$$\left| \psi_{5,6}^{A_0} \right\rangle = \sqrt{2} F_1(\mathbf{r}) \cos \varphi \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} e^{i \left[-(\omega - \Omega)t + (\beta_3^{A_0} - K)z \right]},$$

$$\begin{aligned}
 \left| \psi_{1,2}^{B_0} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \left[\sin \theta F_0(\mathbf{r}) e^{i(-\Omega t + Kz)} + \sqrt{2} \cos \theta F_I(\mathbf{r}) \sin \varphi \right] e^{i \left(-\omega t + \beta_I^{B_0} z \right)}, \\
 \left| \psi_{3,4}^{B_0} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \left[\cos \theta F_0(\mathbf{r}) e^{i(-\Omega t + Kz)} - \sqrt{2} \sin \theta F_I(\mathbf{r}) \sin \varphi \right] e^{i \left(-\omega t + \beta_2^{B_0} z \right)}, \\
 \left| \psi_{5,6}^{B_0} \right\rangle &= \sqrt{2} F_I(\mathbf{r}) \cos \varphi \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} e^{i \left(-\omega t + \beta_3^{B_0} z \right)},
 \end{aligned} \tag{17}$$

где $\cos 2\theta = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + Q^2}}$, $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}$, $\varepsilon = K - K_A$, $Q = \frac{\sqrt{2} |\gamma_0|}{\sqrt{\tilde{\beta}_{0,0} \tilde{\beta}_{-1,1}}}$ (мы полагаем

$$|\gamma_0| \approx |\gamma_{\pm 1}|).$$

Соответствующие постоянные распространения имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \beta_{1,2}^{A_0} &= \tilde{\beta}_{0,0} + 0.5 \left(\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + Q^2} \right), \quad \beta_3^{A_0} = \tilde{\beta}_{-1,1} + K, \\
 \beta_{1,2}^{B_0} &= \tilde{\beta}_{1,0} + 0.5 \left(-\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + Q^2} \right), \quad \beta_3^{B_0} = \tilde{\beta}_{0,1}.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Проанализируем полученные результаты. Видно, что гибридные моды в (17) представляют собой суперпозицию мод нулевого порядка с соседними азимутальными числами и с оптическими частотами, отличающимися на акустическую частоту. Энергия, переносимая парциальной модой, определяется параметром θ , который существенно зависит от близости акустического волнового вектора K к его резонансному значению K_A и от амплитуды u_0 акустической волны. Наиболее сильная гибридизация имеет место при резонансе с $\varepsilon = 0$ ($\theta = \frac{\pi}{4}$), и гибридные моды в этом случае имеют вид:

$$\left| \psi_{1,2}^{A_0} \right\rangle = \left[|\pm 1, 0\rangle e^{i(-\omega t + \tilde{\beta}_0 z)} + |CP\rangle_{odd}^{\pm} e^{i[-(\omega - \Omega)t + \tilde{\beta}_I z]} \right] e^{i \frac{Q}{2} z},$$

$$\begin{aligned}
 \left| \psi_{3,4}^{A_0} \right\rangle &= \left[\left| \pm l, 0 \right\rangle e^{i(-\omega t + \tilde{\beta}_0 z)} - \left| CP \right\rangle_{odd}^{\pm} e^{i[-(\omega - \Omega)t + \tilde{\beta}_l z]} \right] e^{-i \frac{Q}{2} z}, \\
 \left| \psi_{1,2}^{B_0} \right\rangle &= \left[\left| \pm l, 0 \right\rangle e^{i[-(\omega + \Omega)t + \tilde{\beta}_0 z]} + \left| CP \right\rangle_{odd}^{\pm} e^{i(-\omega t + \tilde{\beta}_l z)} \right] e^{i \frac{Q}{2} z}, \\
 \left| \psi_{3,4}^{B_0} \right\rangle &= \left[\left| \pm l, 0 \right\rangle e^{i[-(\omega + \Omega)t + \tilde{\beta}_0 z]} - \left| CP \right\rangle_{odd}^{\pm} e^{i(-\omega t + \tilde{\beta}_l z)} \right] e^{-i \frac{Q}{2} z}, \quad (19)
 \end{aligned}$$

$$\text{где } \left| CP \right\rangle_{odd}^{\pm} = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\pm l, l\rangle + |\pm l, -l\rangle) = \begin{pmatrix} l \\ \pm i \end{pmatrix} F_l(\mathbf{r}) \sin \varphi.$$

Отметим, что спектр (18) дважды вырожден по состоянию поляризации мод (17) и (19). Отсюда следует, что произвольная суперпозиция таких дважды вырожденных мод также является собственной функцией волокна. Такое свойство мод, во-первых, связано со скалярной природой оператора АО взаимодействия, вызванного изгибной волной, которая действует на все компоненты электрического поля одинаково, и, во-вторых, с пренебрежением в нашем приближении векторным оператором, описывающим СОВ.

Пользуясь выражениями (18) и (19), легко описать фундаментальный эффект АО устройств. А именно, конверсию падающей моды в моду со сдвинутым азимутальным числом и смещенной частотой [2]. Действительно, предположим, что на входном торце волокна поле представляет собой фундаментальную моду $|l, 0\rangle$. Таким образом, в волокне при резонансном условии $\varepsilon = 0$ это поле будет распространяться следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \left| \Psi(z) \right\rangle &= \frac{l}{2} \left(\cos\left(\frac{Qz}{2}\right) \left| l, 0 \right\rangle e^{i(-\omega t + \tilde{\beta}_0 z)} + \right. \\
 &\quad \left. + i \sin\left(\frac{Qz}{2}\right) \left| CP \right\rangle_{odd}^{+} e^{i[-(\omega - \Omega)t + \tilde{\beta}_l z]} \right). \quad (20)
 \end{aligned}$$

Очевидно, на расстоянии $L = \frac{\pi}{Q}$ поле будет представлено нечетной модой, имеющей пониженную частоту:

$$\left| \Psi(z) \right\rangle \propto \left| CP \right\rangle_{odd}^{+} e^{i[-(\omega - \Omega)t + \tilde{\beta}_l z]}. \quad (21)$$

Как следует из (23), если резонансное условие не выполнено, только часть энергии переходит от падающего поля к $|CP\rangle_{odd}^+$ моде. Отметим, что если волокно возбудить полем $|CP\rangle_{odd}^\pm$, то на выходном торце волокна длины L поле будет представлять собой фундаментальную моду $|\pm 1, 0\rangle$ на повышенной частоте.

3. ЭВОЛЮЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ

Рассмотрим практически важную задачу о распространении оптических вихрей с единичным топологическим зарядом по оптическому волокну при наличии изгиба акустической волны. Пусть на входной торце волокна падает вихрь с зарядом ± 1 :

$$|\Psi_\pm(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} F_l(\mathbf{r}) e^{\pm i\varphi} e^{-i\omega t}. \quad (22)$$

Данное поле возбуждает в волокне определенную суперпозицию мод (19) (предполагая, что выполняется условие резонанса):

$$\begin{aligned} |\Psi_\pm(z)\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \mp F_0(\mathbf{r}) \sin\left(\frac{Q}{2}z\right) e^{i(-\Omega t + \tilde{\beta}_0 z)} + \right. \\ & \left. + F_l(\mathbf{r}) \left[\cos\varphi \pm \cos\left(\frac{Q}{2}z\right) \sin\varphi \right] e^{i\tilde{\beta}_l z} \right\} e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (23)$$

Легко видеть, что при прохождении полем секции волокна длиной $L = \frac{\pi}{Q}$, оно описывается следующим выражением:

$$\left| \Psi_\pm\left(\frac{\pi}{Q}\right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\mp F_0(\mathbf{r}) e^{i(-\Omega t + \gamma_0)} + F_l(\mathbf{r}) \cos\varphi e^{i\gamma_l} \right] e^{-i\omega t}, \quad (24)$$

где $\gamma_{0,l} = \frac{\pi \tilde{\beta}_{0,l}}{Q}$.

Простой анализ показывает, что данное поле обладает нулевым топологическим зарядом - не несет сингулярность, а представляет собой оптический пучок с плоским волновым фронтом. Другими словами, имеет место топологическая реакция, в результате которой падающий на волокно оптический вихрь разрушается вне зависимости от знака его топологического заряда. Отметим также, что поле (24) представляет собой суперпозицию двух полей с незначительно отличающимися частотами, что приводит к мерцанию интерференционной картины поля с частотой, равной частоте звуковой волны:

$$I_\pm\left(\frac{\pi}{Q}\right) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} F_0^2(\mathbf{r}) + F_l^2(\mathbf{r}) \cos^2\varphi \mp \sqrt{2} F_0 F_l \cos\varphi \cos(\Omega t - \delta\gamma) \right], \quad (25)$$

где $\delta\gamma = \frac{\pi}{Q} (\tilde{\beta}_0 - \tilde{\beta}_l)$.

Следует отметить, что описанный процесс не зависит от поляризации оптического вихря вследствие вышеописанного вырождения спектра постоянных распространения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе получены моды и соответствующие постоянные распространения идеальных оптических волокон, вдоль которых распространяется изгибная акустическая волна. Описана экспериментально наблюдаемая конверсия фундаментальной моды в четную или нечетную LP моду, которая сопровождается сдвижкой оптической частоты. Показано, что при распространении оптического вихря на длину биений имеет место топологическая реакция, в результате которой вихрь разрушается.

Список литературы

1. Yariv A. Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation / Yariv A., Yeh P. – New York: John Wiley & Sons, 1984.
2. All-fiber acousto-optic frequency shifter / Kim B.Y. et al // Opt. Lett. – 1986. – V. 11. – P. 389.
3. Analysis of intermodal coupling in a two-mode fiber with periodic microbends / Blake J.N. et al // Opt. Lett. – 1987. – V. 12. – P. 281.
4. Propagation and optical interaction of guided acoustic waves in two-mode optical fibers / Engan H.E. et al // J. Lightwave Technol. – 1988. – V. 6. – P. 428.
5. Acousto-optic frequency shifting in birefringent fiber / Risk W.P. et al // Opt. Lett. – 1984. – V. 9. – P. 309.
6. Acousto-optic frequency shifter for single-mode fibres / Nosu K. et al // Electron. Lett. – 1983. – V. 19. – P. 816.
7. Engan H.E. Analysis of polarization-mode coupling by acoustic torsional waves in optical fibers / Engan H.E. // J. Opt. Soc. Am. A – 1996. – V. 13. – P. 112.
8. Dashti P.Z. Observation of orbital angular momentum transfer between acoustic and optical vortices in optical fiber / Dashti P.Z., Alhassen F., Lee H.P. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 96. – P. 043604.
9. Zhao J. Fiber acousto-optic mode coupling between the higher-order modes with adjacent azimuthal numbers / Zhao J., Liu X. // Opt. Lett. – 2006. – V. 31. – P. 1609.
10. Birks T.A. The acousto-optic effect in single-mode fiber tapers and couplers / Birks T.A., Russell P.St.J., Culverhouse D.O. // J. Lightwave Technol. – 1996. – V. 14. – P. 2519.
11. Erdogan T. Fiber grating spectra / Erdogan T. // J. Lightwave Technol. – 1997. – V. 15. – P. 1277.
12. Topological charge and angular momentum of light beams carrying optical vortices / Soskin M.S. et al // Phys. Rev. A. – 1998. – V. 56. – P. 4064.
13. Nye J.F. Dislocations in wave trains / Nye J.F., Berry M.V. // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1974. – V. 336. – P. 165.-190.
14. Direct Observation of Transfer of Angular Momentum to Absorptive Particles from a Laser Beam with a Phase Singularity / He H. et al // Phys. Rev. Lett. – 1995. – V. 75. – P. 826.
15. Agarwal G.S. Spatial coherence and information entropy in optical vortex fields / Agarwal G.S., Banerji J. // Opt. Lett. – 2002. – V. 27 – P. 800.
16. Optical vortex coronagraph demonstrated / Schwartzlander G.A. et al // Opt. Expr. – 2008. – V. 16 – P. 10200.
17. Snyder W. Optical waveguide theory / Snyder W., Love J.D. – Chapman and Hall, London, New York, 1985.
18. Davydov A.S. Quantum Mechanics / Davydov A.S. – Pergamon, Oxford, 1976.

Алексеев К.М. Структура мод і еволюція оптичних вихорів в оптичних волокнах з акустооптичною взаємодією / Алексеев К.М., Баршак О.В., Яворський М.О. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 42-53.

Визначені структура оптичних мод і спектр сталих поширення оптичного волокна, по якому поширюється вигиниста акустична хвиля. На підставі отриманих результатів дано пояснення експериментально спостережуваного ефекту модовій конверсії, яка супроводжується зміною частоти оптичного поля. Розглянута еволюція оптичних вихорів в цьому волокні.

Ключові слова: акустооптика, оптичний вихор.

Alexeyev C.N. The structure of the modes and the evolution of optical vortices in optical fibres with acousto-optic interaction / Alexeyev C.N., Barshak E.V., Yavorsky M.A. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 42-53.

The structure of the modes and the spectrum of the propagation constants of optical fibre with propagating acoustic flexural wave are established. On the basis of the obtained results an explanation was given of the experimentally observed effect of the mode conversion, which accompanies the corresponding optical frequency shifting. The evolution of optical vortices in such fibres has been considered.

Keywords: acousto-optics, optical vortex.

Поступила в редакцію 02.11.2010 г.

УДК 535:52-626:681.7. 068.2

ВЕКТОРНАЯ ТЕОРИЯ ВЫСШИХ МОД ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВОЛНОВОДОВ

Алексеев К.Н.¹, Яворский М.А.¹, Боклаг Н.А.^{1,2}

¹ Таврический Национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

² Национальный центр управления и испытаний космических средств, Евпатория, Украина

E-mail: c.alexeyev@yandex.ua

Рассмотрена структура гибридных мод высших порядков двух идентичных слабо взаимодействующих связанных оптических волокон. Вычислены спектры поляризационных поправок.

Ключевые слова: моды связанных оптических волокон, перекрестная связь, связанные моды.

ВВЕДЕНИЕ

Изучение распространения света в системе связанных волокон берет начало от классической работы Джонса, в которой были введены уравнения для связанных мод [1]. Последующие исследования связанных волокон, в основном, ограничивались практически значимыми случаями одномодовых волокон [2, 3]. Задача о структуре мод высших порядков в связанных волокнах рассматривалась лишь в одной работе, где изучались предельные случаи близко и далеко расположенных волокон [4]. Такая разница в количестве внимания, уделенного изучению фундаментальных мод и мод высших порядков, объясняется потребностями систем оптоволоконной связи, которые до недавнего времени преимущественно касались передачи информации по одномодовым волокнам.

Прогресс, достигнутый в коммуникационной и информационной оптике, привёл к необходимости изучения переноса информации особыми состояниями с определённым орбитальным угловым моментом, известными как оптические вихри (ОВ) [5]. Известно, что такие поля относятся к высшим модам семейства решений уравнений Максвелла в волноводах. В частности, эти состояния, определяемые азимутальным углом φ посредством множителя $\exp(il\varphi)$, где $l = \pm 1, \pm 2, \dots$, могут возникнуть только в случае $|l| > 1$ мод волокна [6]. Вопрос о модах высших порядков в связанных волокнах является важным для изучения туннелирования ОВ в оптических разветвителях [7-9].

В связи с этим целью данной работы является решение задачи об определении высших мод двух идентичных связанных слабонаправляющих оптических волокон с учётом спин-орбитального взаимодействия.

1. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И УРАВНЕНИЕ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Будем решать задачу о связанных волокнах по теории возмущения с вырождением. Согласно этому подходу, векторное волновое уравнение для $\mathbf{e}_t$ имеет вид [10]:

$$\left[\nabla_t^2 + k^2 n^2(x, y) \right] \mathbf{e}_t(x, y) + \nabla_t \left(\mathbf{e}_t \cdot \nabla_t \ln n^2 \right) = \beta^2 \mathbf{e}_t(x, y), \quad (1)$$

где n показатель преломления, k волновое число в вакууме, $\nabla_t = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$ и β постоянная распространения. В случае двух параллельных волокон оно может быть записано в эквивалентной форме уравнения на собственные значения [11]:

$$(T + k^2 n_{cl}^2 + V_l + V_r + H_{so,l} + H_{so,r}) \mathbf{e}_t = \beta^2 \mathbf{e}_t, \quad (2)$$

где $T = \nabla_t^2$, $V_{l,r} = 2k^2 n_{co,l(r)}^2 \Delta_{l(r)} \bar{f}_{l(r)}(x, y)$, $n_{co(cl)}$ – показатель преломления сердцевин и оболочки левого (правого) волокна, соответственно, $\Delta_{l(r)} = (n_{co}^2 - n_{cl}^2)/2n_{co}^2$ и $\bar{f} = \theta(1 - r/\eta)$, θ – функция Хевисайда и η – радиус сердцевин. Оператор H_{so} отвечает за спин-орбитальное взаимодействие в оптоволокне [6]. Чтобы получить структуру мод, необходимо построить матрицу полного оператора в левой части (2) в базисе решений скалярного уравнения для отдельных волокон. Эти векторные функции могут быть представлены в виде матрицы $|\Psi\rangle = \psi \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix}$, где $n_{x,y}$ – компоненты некоторого вектора, нормированного на единицу. Здесь ψ имеет левую либо правую локализацию (которую мы будем обозначать через $\psi_{l(r)}$ и подразумевать, что она зависит от цилиндрических координат, связанных либо с левым, либо с правым волокном) и удовлетворяет уравнению

$$\left[\nabla_t^2 + k^2 n_{r(l)}^2 \right] \psi_{r(l)} = \tilde{\beta}_{r(l)}^2 \psi_{r(l)}, \quad (3)$$

где $n_{r(l)}^2 = n_{co,r(l)}^2 (1 - 2\Delta_{r(l)} f_{r(l)}(x, y))$ и $f = \theta(r/\eta - 1)$. При $l \neq 0$ существуют четыре собственные функции ψ , принадлежащие одному и тому же значению β_l , поэтому полный базис должен состоять из восьми лево- или право-локализованных собственных функций. Для таких скалярных решений удобно выбрать состояния с хорошо определёнными орбитальными угловыми моментами: $\psi \propto F_l(r) \exp(il\phi)$, где радиальная функция $F_l(r)$ удовлетворяет уравнению [10]:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + k^2 n^2(r) \right] F_l(r) = \tilde{\beta}_l^2 F_l(r). \quad (4)$$

Известно, что такие решения представляют собой оптические вихри [5, 6]. В линейном базисе $|e\rangle = \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \end{pmatrix}$ собственные функции $|\Psi\rangle$ могут быть записаны в явном виде как [6]:

$$|\Psi\rangle = F_l e^{il\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sigma \end{pmatrix} \equiv |\sigma, l\rangle, \quad (5)$$

где $\sigma = \pm 1$ определяет знак круговой поляризации и l может быть отрицательным. Следует помнить, что в циркулярном базисе, определяемом посредством

$e_{\pm} = e_x \mp ie_y$, поля (5) при $\sigma = 1$ содержат столбец $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, в то время как при $\sigma = -1$

они пропорциональны столбцу $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. При этом полный базис при $l \neq 0$ содержит

восемь векторов, на которых может быть построена матрица полного оператора:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1, 1, L\rangle, |2\rangle = |1, -1, L\rangle, |3\rangle = |-1, -1, L\rangle, |4\rangle = |-1, 1, L\rangle, \\ |5\rangle &= |1, 1, R\rangle, |6\rangle = |1, -1, R\rangle, |7\rangle = |-1, -1, R\rangle, |8\rangle = |-1, 1, R\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

где третий индекс показывает локализацию соответствующей скалярной функции.

Матричные элементы матрицы H_l полного оператора строятся как $H_{ij} = \langle i | H | j \rangle$, где:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \iint_S \begin{pmatrix} \Phi_x^* & \Phi_y^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{pmatrix} dS. \quad (7)$$

Для упрощения вычислений сделаем ряд стандартных предположений [11], позволяющих получить матрицу H_l :

$$H_l = \begin{pmatrix} P_l & Q_l \\ Q_l & P_l \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где блоки имеют вид:

$$P_l = \begin{pmatrix} A_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_l & 0 & B_l \delta_{l1} \\ 0 & 0 & A_l & 0 \\ 0 & B_l \delta_{l,1} & 0 & B_l \end{pmatrix}, \quad Q_l = \begin{pmatrix} C_l & D_l & 0 & 0 \\ D_l & C_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_l & D_l \\ 0 & 0 & D_l & C_l \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где δ_{ij} дельта Кронекера и суммирование по l не предполагается. Матрица P_l определяет структуру мод идеальных волокон [6], в то время как Q_l описывает связь между волокнами. Для волокна со ступенчатым профилем имеем [6]:

$$\begin{aligned} A_l &= \frac{2\pi\Delta}{N_l} (F_l F_l' - F_l^2) \Big|_{R=1}, \quad B_l = \frac{2\pi\Delta}{N_1} (F_1 F_1' + F_1^2) \Big|_{R=1}, \\ B_l &= -A_l \text{ при } |l| > 1. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $R = r/r_0$ и коэффициент нормировки: $N_l = 2\pi r_0^2 \int_0^\infty R F_l^2(R) dR$. Легко показать,

что постоянные взаимодействия равны:

$$C_l = 2k^2 n_{co}^2 \Delta N_l^{-1} \sum_{n=0}^{n=l} C_l^n \Lambda^{l-n} \int_0^{2\pi} \cos[(l-n)\varphi] d\varphi \int_0^1 \frac{R^{n+1}}{\tilde{R}^l} K_l(\tilde{R}) J_l(R) dR, \quad (11)$$

$$D_l = 2k^2 n_{co}^2 \Delta N_l^{-1} \sum_{n=0}^{n=l} C_l^n \Lambda^n \int_0^{2\pi} \cos[(2l-n)\varphi] d\varphi \int_0^1 \frac{R^{l-n+1}}{\tilde{R}^l} K_l(\tilde{R}) J_l(R) dR, \quad (12)$$

где $\tilde{R}^2 = R^2 + \Lambda^2 + 2\Lambda R \cos \varphi$, $\Lambda = L/r_0$ и L – расстояние между центрами волокон, K_l – модифицированная функция Бесселя, J_l – функция Бесселя, C_l^n – биномиальные коэффициенты. Графики интегралов перекрытия (11), (12) показаны на рис. 1.

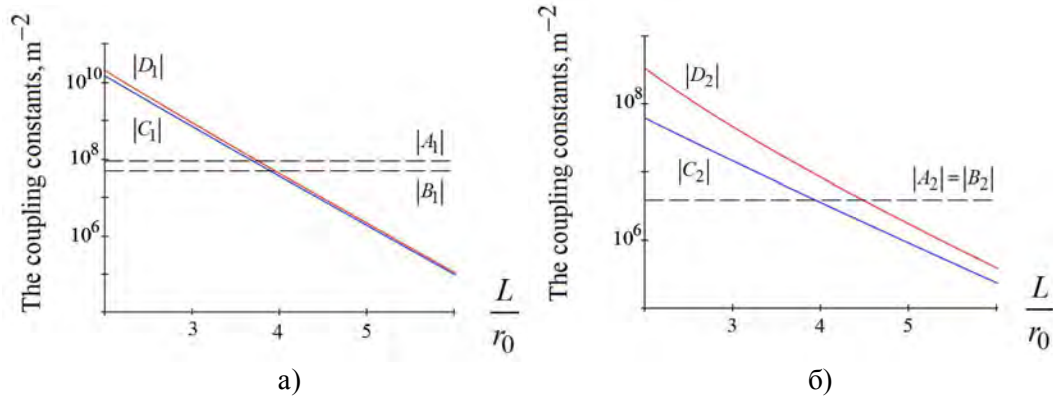


Рис. 1. Зависимость постоянных взаимодействия C_l и D_l от расстояния L между центрами волокон для мод с азимутальными числами $l=1$ (а) и $l=2$ (б); $V = 4.2$, $\Delta = 10^{-3}$, $r_0 = 10\lambda_{He-Ne}$. Пунктирная линия показывает постоянные, характеризующие спин-орбитальное взаимодействие. По оси x используется логарифмическая шкала.

Очевидно, что влияние спин-орбитального взаимодействия существенно только в тех областях, где его постоянные A_l, B_l сравнимы или больше, чем постоянные взаимодействия C_l и D_l . В остальных областях применимо скалярное приближение, и необходимость учитывать градиентный член в волновом уравнении (1) отсутствует.

2. ГИБРИДНЫЕ МОДЫ СВЯЗАННЫХ ВОЛОКОН

Как известно, структура мод определяется решением задачи на собственные значения матрицы H_l :

$$H_l \mathbf{x}_l = \lambda \mathbf{x}_l, \quad (13)$$

где компоненты x_i собственного вектора $\mathbf{x}_l$ определяют вид соответствующей моды $|\psi\rangle: |\psi\rangle = \sum_i x_i |i\rangle$. Здесь $|i\rangle$ берётся из (6). Спектр λ даёт поляризационные

поправки $\delta\beta_i$ к скалярной постоянной распространения [10]: $\delta\beta_i = \lambda_i / 2\tilde{\beta}$.

Используя хорошо разработанные методы [12], можно получить аналитические выражения для гибридных мод связанных волокон.

Примечательно, что их структура не зависит от значения l . Нормированные на единицу моды имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} |\psi_{1l}\rangle &= \frac{1}{2} \cos \theta_{1l} \{|1\rangle - |3\rangle - |5\rangle + |7\rangle\} + \frac{1}{2} \sin \theta_{1l} \{|2\rangle - |4\rangle - |6\rangle + |8\rangle\}, \\ |\psi_{2l}\rangle &= \frac{1}{2} \sin \theta_{1l} \{|1\rangle - |3\rangle - |5\rangle + |7\rangle\} - \frac{1}{2} \cos \theta_{1l} \{|2\rangle - |4\rangle - |6\rangle + |8\rangle\}, \\ |\psi_{3l}\rangle &= \frac{1}{2} \cos \theta_{2l} \{|1\rangle + |3\rangle - |5\rangle - |7\rangle\} + \frac{1}{2} \sin \theta_{2l} \{|2\rangle + |4\rangle - |6\rangle - |8\rangle\}, \\ |\psi_{4l}\rangle &= \frac{1}{2} \sin \theta_{2l} \{|1\rangle + |3\rangle - |5\rangle - |7\rangle\} - \frac{1}{2} \cos \theta_{2l} \{|2\rangle + |4\rangle - |6\rangle - |8\rangle\}, \\ |\psi_{5l}\rangle &= \frac{1}{2} \cos \theta_{3l} \{|1\rangle - |3\rangle + |5\rangle - |7\rangle\} + \frac{1}{2} \sin \theta_{3l} \{|2\rangle - |4\rangle + |6\rangle - |8\rangle\}, \\ |\psi_{6l}\rangle &= \frac{1}{2} \sin \theta_{3l} \{|1\rangle - |3\rangle + |5\rangle - |7\rangle\} - \frac{1}{2} \cos \theta_{3l} \{|2\rangle - |4\rangle + |6\rangle - |8\rangle\}, \\ |\psi_{7l}\rangle &= \frac{1}{2} \cos \theta_{4l} \{|1\rangle + |3\rangle + |5\rangle + |7\rangle\} + \frac{1}{2} \sin \theta_{4l} \{|2\rangle + |4\rangle + |6\rangle + |8\rangle\}, \\ |\psi_{8l}\rangle &= \frac{1}{2} \sin \theta_{4l} \{|1\rangle + |3\rangle + |5\rangle + |7\rangle\} - \frac{1}{2} \cos \theta_{4l} \{|2\rangle + |4\rangle + |6\rangle + |8\rangle\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Управляющие коэффициенты зависят от l . При $l = 1$ имеем:

$$\begin{aligned} \sin \theta_{11} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{A_1}{R_1}}, \quad \cos \theta_{11} = \frac{\text{sgn}(-D_1)}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{A_1}{R_1}}, \\ \sin \theta_{21} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{A_1 - 2B_1}{R_2}}, \quad \cos \theta_{21} = \frac{\text{sgn}(-D_1)}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{A_1 - 2B_1}{R_2}}, \\ \sin \theta_{11} &= \sin \theta_{31}, \quad \cos \theta_{11} = -\cos \theta_{31}, \end{aligned}$$

$$\sin \theta_{21} = \sin \theta_{41}, \quad \cos \theta_{21} = -\cos \theta_{41}. \quad (15)$$

Здесь $R_1 = \sqrt{A_1^2 + 4D_1^2}$, $R_2 = \sqrt{(A_1 - 2B_1)^2 + 4D_1^2}$. Очевидно, что есть только два управляющих угла (θ_{11} и θ_{21}), определяющих модовую структуру. Зависимость модовых коэффициентов при $l=1$ от расстояния между волокнами показана на рис. 2.

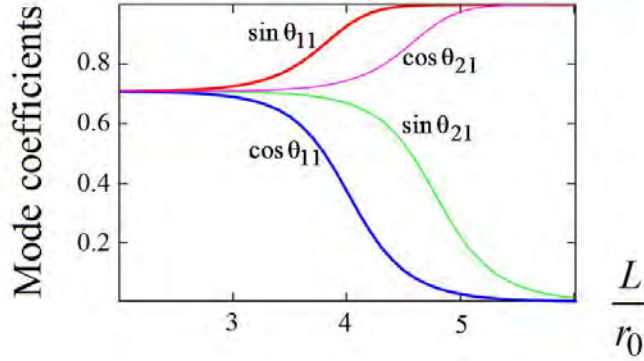


Рис. 2. Зависимость управляющих коэффициентов (15) для азимутального числа $l=1$ от расстояния между центрами волокон L ; $V=4.2$, $\Delta=10^{-3}$, $r_0=10\lambda_{He-Ne}$.

При $l>1$ ситуация ещё проще – есть только один управляющий угол, определяющий модовую структуру:

$$\sin \theta_{1l} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + D_l^2}}}, \quad \cos \theta_{1l} = \frac{\text{sgn}(-D_l)}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + D_l^2}}},$$

$$\sin \theta_{1l} = \sin \theta_{2l} = \sin \theta_{3l} = \sin \theta_{4l}, \quad \cos \theta_{1l} = \cos \theta_{2l} = -\cos \theta_{3l} = -\cos \theta_{4l}. \quad (16)$$

Графики управляющих коэффициентов как функций L для некоторых $l>1$ показаны на рис. 3.

Поляризационные поправки к скалярным постоянным распространения $\tilde{\beta}_l$ при $l=1$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \delta\beta_{1,2} &= \frac{1}{2\tilde{\beta}_1} (A_1 - 2C_1 \pm R_1); \quad \delta\beta_{3,4} = \frac{1}{2\tilde{\beta}_1} (A_1 + 2B_1 - 2C_1 \pm R_2); \\ \delta\beta_{5,6} &= \frac{1}{2\tilde{\beta}_1} (A_1 + 2C_1 \pm R_1); \quad \delta\beta_{7,8} = \frac{1}{2\tilde{\beta}_1} (A_1 + 2B_1 + 2C_1 \pm R_2). \end{aligned} \quad (17)$$

Графики этих поправок как функции L показаны на рис. 4.

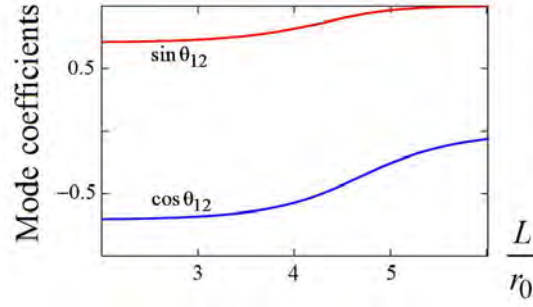


Рис. 3. Зависимость управляющих коэффициентов (16) для азимутального числа $l=2$ от расстояния между центрами волокон L ; $V=4.2$, $\Delta=10^{-3}$, $r_0=10\lambda_{He-Ne}$.

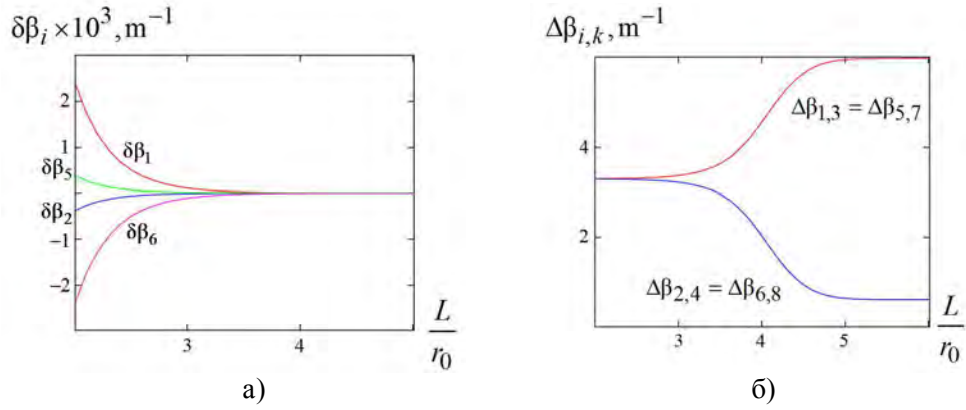


Рис. 4. Зависимость поправок $\delta\beta_i$ к скалярной постоянной распространения от расстояния между центрами волокон L (а). Показаны только четыре постоянные распространения, так как оставшиеся четыре почти в точности совпадают с указанными. Рисунок (б) демонстрирует разницу между близко расположенными постоянными распространения; $\Delta\beta_{i,k} = \delta\beta_i - \delta\beta_k$; $V=4.2$, $\Delta=10^{-3}$, $r_0=10\lambda_{He-Ne}$.

Очевидно, что для $l=1$ мод связанных волокон вырождение отсутствует. Следует заметить, что в идеальных волокнах при $l=1$ один из энергетических уровней остаётся дважды вырожденным и соответствует ОБ $|1,1\rangle$ и $|1,-1\rangle$. В связанных волокнах это остаточное вырождение снимается скалярным спариванием, как показано в (17). При $l>1$ вырождение возникает снова:

$$\delta\beta_{1,2} = \delta\beta_{3,4} = \frac{1}{\tilde{\beta}_l} \left(-C_l \pm \sqrt{A_l^2 + D_l^2} \right), \quad \delta\beta_{5,6} = \delta\beta_{7,8} = \frac{1}{\tilde{\beta}_l} \left(C_l \pm \sqrt{A_l^2 + D_l^2} \right). \quad (18)$$

Спектральные кривые для данного случая представлены на рис. 5.

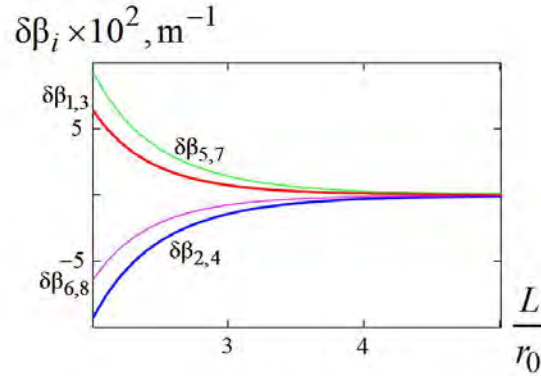


Рис. 5. Зависимость поправок $\delta\beta_i$ к скалярной постоянной распространения для $l = 2$ мод от расстояния между центрами волокон L . Заметьте, что каждая постоянная распространения является дважды вырожденной; $V = 4.2$, $\Delta = 10^{-3}$, $r_0 = 10\lambda_{He-Ne}$.

Интересно исследовать структуру мод (14) в некоторых предельных случаях. Как следует из рис. 2, для далеко расположенных волокон интегралы перекрытия значительно меньше, чем постоянные спин-орбитального взаимодействия отдельных волокон: $C_l, D_l \ll A_l, B_l$. В этом случае моды представляют собой симметричные и антисимметричные комбинации стандартных мод левого-правого волокон.

Другой предельный случай касается близко расположенных волокон, где постоянные спин-орбитального взаимодействия намного меньше интегралов перекрытия: $C_l, D_l \gg A_l, B_l$. В пределе имеем: $|\sin \theta_i| = |\cos \theta_i| = \frac{1}{\sqrt{2}}$. В базисе линейных поляризаций, отмеченных нижним индексом “ l ”, получаем следующие выражения при $l = 1$:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{1,6}\rangle_l &\propto [F_1(r_L)\sin\varphi_L \mp F_1(r_R)\sin\varphi_R] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \\
 |\psi_{2,5}\rangle_l &\propto [F_1(r_L)\cos\varphi_L \mp F_1(r_R)\cos\varphi_R] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 |\psi_{3,8}\rangle_l &\propto [F_1(r_L)\sin\varphi_L \mp F_1(r_R)\sin\varphi_R] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 |\psi_{4,7}\rangle_l &\propto [F_1(r_L)\cos\varphi_L \mp F_1(r_R)\cos\varphi_R] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{19}$$

Как следствие, моды являются симметричными и антисимметричными комбинациями LP -мод. Для произвольного l следует сделать следующую замену: $\varphi \rightarrow l\varphi, F_l \rightarrow F_l$. Очевидно, что выражения (19) будут также справедливы для произвольного расстояния между волокнами, если пренебрегать спин-орбитальным взаимодействием, что соответствует скалярному приближению. Хотя этим взаимодействием, вообще говоря, пренебрегать нельзя, для многомодовых волокон с небольшими значениями постоянных спин-орбитального взаимодействия область, в которой справедливы выражения для мод в скалярном приближении (19), значительно расширяется.

ВЫВОДЫ

В данной работе мы изучили структуру гибридных мод высших порядков двух связанных слабонаправляющих идентичных оптических волокон, которые возникают благодаря взаимному эффекту спин-орбитального взаимодействия внутри волокон и псевдоскалярной связи между полями этих волокон. На основе теории возмущения с вырождением для векторного волнового уравнения получены выражения для мод с азимутальными числами $l \geq 1$. Вычислены поляризационные поправки к скалярным постоянным распространения для широкого диапазона расстояний между волокнами. Показано, что в предельном случае близко расположенных волокон выражения для мод переходят в известные комбинации линейно поляризованных чётных и нечётных мод отдельных волокон. Полученные результаты могут быть использованы для изучения туннелирования оптических вихрей в прямых разветвителях и в вопросах, связанных с информационной безопасностью.

Список литературы

1. Jones A.L. Coupling of optical fibers and scattering in fibers / Jones A.L. // J. Opt. Soc. Am. – 1965. – V. 55. – pp. 261-271.
2. Selected papers on coupled-mode theory in guided-wave optics / ed. Hall D.J. – SPIE Milestone series, MS 84. – SPIE Optical Engineering Press, 1993.
3. Black R.J. Optical waveguide modes / Black R.J. and Gagnon L. – Mc Graw Hill, New York, 2010.
4. Snyder A.W. Modes of optical waveguides / Snyder A.W. and Young W.R. // J. Opt. Soc. Am. – 1978. – V. 68. – pp. 297-309.
5. Optical Vortices (Volume 228 in Horizons of World Physics) / eds. Vasnetsov M. and Staliunas K. – Nova Science, Huntington, N.Y., 1999.
6. Volyar A.V. Fiber singular optics / Volyar A.V. // Ukr. J. Phys. Opt. – 2002. – V.3. – pp. 69-96.
7. Volyar A.V. Tunnelling selection of optical vortices / Volyar A.V. and Fadeeva T.A. // Tech. Phys. Lett. – 2003. – V. 29, No. 7. – pp. 594-597.
8. Volyar A.V. Vectorial topological dipole in output radiation of a fiber optical coupler / Volyar A.V. and Fadeeva T.A. // Tech. Phys. Lett. – 2004. – V. 30, No. 7. – pp. 553-556.
9. Fadeyeva T.A. Polarization metrology of the tunnel vortex selection / Fadeyeva T.A. and Polyakov O.V. // Proc. SPIE. – 2004. – V. 5582 – pp. 278-286.
10. Snyder A.W. Optical waveguide theory / Snyder A.W. and Love J.D. – Chapman and Hall, London, New York, 1985.

11. Alexeyev C.N. Effect of the spin-orbit interaction on polarization conversion in coupled waveguides / Alexeyev C.N., Alexeyev A.N., Boklag N.A., Yavorsky M.A. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 2009. – V. 11 – P. 125404.
12. Horn R.A. Matrix analysis / Horn R.A. and Johnson C.R. – Cambridge University Press, Cambridge, New York, 1985.

Алексеев К.М. Векторна теорія вищих мод паралельних хвильоводів / Алексеев К.М., Яворський М.О., Боклаг Н.О. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 54-63.

Розглянуто структуру гібридних мод вищих порядків двох ідентичних слабо взаємодіючих зв'язаних оптичних волокон. Розраховано спектри поляризаційних поправок.

Ключові слова: моди зв'язаних оптичних волокон, перехрестний зв'язок, зв'язані моди.

Alexeyev C.N. Vector theory of higher order modes of parallel waveguides / Alexeyev C.N., Yavorsky M.A. and Boklag N.A. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 54-63.

It is studied the structure of hybrid higher order modes of two coupled weakly guiding identical optical fibres. The spectra of polarization corrections are calculated.

Keywords: modes of coupled optical fibres, cross-talk, coupled modes.

Поступила в редакцію 11.11.2010 г.

УДК 530.14

УПРАВЛЕНИЕ СПЕКТРОМ ПОЛЯРИТОНОВ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Дзедолик И.В., Каракчиева О.С., Микульская Ю.П.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: dzedolik@crimea.edu*

На основе поляритонной модели исследована зависимость от внешнего электрического поля и температуры спектра электромагнитного импульса, прошедшего через диэлектрический ионный кристалл кубической сингонии. Показано, что с помощью внешнего электрического поля, приложенного к кристаллу, можно управлять спектральным составом импульса, что может быть использовано для создания управляемых фильтров в терагерцевом и оптическом диапазонах.

Ключевые слова: диэлектрический кристалл, поляритон, электромагнитный импульс.

ВВЕДЕНИЕ

Внешнее электромагнитное поле в резонансной области частот эффективно взаимодействует с твердым телом, представляющим собой систему взаимосвязанных заряженных частиц – электронов и протонов, доказательством чему является существенное снижение скорости распространения электромагнитной волны в теле по сравнению с вакуумом, а также частотная дисперсия. Электромагнитная волна вносит в тело энергию, при этом изменяет свои параметры из-за взаимодействия с ним. В результате такого взаимодействия в среде генерируются квазичастицы, представляющие собой связанные состояния электромагнитного поля и поляризации среды – поляритоны [1-5]. На выходе из тела поляритоны отдают свою энергию фотонам электромагнитного поля за вычетом энергии, расходуемой на тепловые осцилляции среды.

Поляритоны в диэлектрических средах и полупроводниках активно исследуются в настоящее время в связи задачами генерации и управления [6-11] излучением терагерцового диапазона. Целью данной работы было исследование зависимости от напряженности внешнего электрического поля и температуры спектра поляритонов, возникающих в диэлектрическом кристалле кубической сингонии при прохождении через него электромагнитного импульса. Показано, что при варьировании напряженности внешнего электрического поля изменяется ширина щели в поляритонном спектре. Если спектр электромагнитного импульса, прошедшего через такой кристалл, попадает в область спектральной щели, то параметры импульса также меняются. Это свойство кристалла дает возможность управлять спектром электромагнитных импульсов на выходе из кристалла, т.е. создать управляемый фильтр в диапазоне частот, в котором лежит щель поляритонного спектра.

Помимо этого, на основе управления пропускной способностью такого фильтра с помощью внешнего электрического поля, возможно конструирование «полевых

спектральных транзисторов», аналогичных по принципу действия электронным полевым транзисторам со встроенным каналом. При пропускании импульса с несущей частотой, лежащей в области спектральной щели фильтра, через «канал спектрального транзистора», амплитудой импульса можно эффективно управлять с помощью внешнего электрического поля.

1. МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИТОННАЯ МОДЕЛЬ

При переходе осциллятора среды из основного состояния 0 в возбужденное состояние 1 отклик среды пропорционален «силе осциллятора»

$$f \sim \left| \int \psi_1^* \mathbf{r} \exp(i\mathbf{kr}) \psi_0 d\mathbf{r} \right|^2 \quad [12],$$

описывающей его мультипольный отклик. В зависимости от соотношения интенсивности внешнего поля и длины волны, а также расстояния между атомами тела и типа решетки в кристалле, при $\mathbf{kr} \ll 1$ преобладает дипольный $\exp(i\mathbf{kr}) \rightarrow 1$ либо квадрупольный $\exp(i\mathbf{kr}) \rightarrow i\mathbf{kr}$ отклик. В области прозрачности для большинства диэлектрических сред преобладает дипольный отклик на внешнее поле.

Рассмотрим движение положительных и отрицательных зарядов в кристалле кубической сингонии. В макроскопической модели в длинноволновом приближении ($ka \ll 1$, где a – размер ячейки) [5, 13] дипольный отклик можно учесть, записывая уравнение движения положительных и отрицательных зарядов в ячейке [11]

$$\ddot{\mathbf{R}} + \Gamma \dot{\mathbf{R}} + \Omega_{\perp}^2 \mathbf{R} = \frac{e^*}{m^*} (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}), \quad (1)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-$ – вектор смещения положительного и отрицательного зарядов, Γ – коэффициент затухания, $\Omega_{\perp}$ – частота поперечных упругих осцилляций связанных зарядов (собственных поперечных колебаний ионов) [5, 13], m^* – приведенная масса, e^* – эффективный заряд элементарной ячейки среды, $\mathbf{E}_0 = const$ – внешнее статическое электрическое поле, $\mathbf{E} \sim \exp(-i\omega t + i\mathbf{kr})$ – высокочастотное электрическое поле.

В общем случае в кристаллах кубической сингонии с N_a атомами в ячейке имеется $3N_a$ ветвей спектра упругих колебаний. Частоты трех ветвей спектра стремятся к нулю при $k \rightarrow 0$ – это акустические колебания, а частоты остальных $3(N_a - 1)$ ветвей оптических колебаний при $k = 0$ не равны нулю [13]. В изотропном кристалле частоты ветвей поперечных колебаний совпадают.

Вектор поляризации среды представим в виде

$$\mathbf{P} = e^* N \mathbf{R} + \chi_{10} \mathbf{E}_0 + (\chi_1 + \chi_2 E_0) \mathbf{E}, \quad (2)$$

где N – число ячеек в единице объема, χ_j – диэлектрическая восприимчивость среды. Первый член в выражении (2) для вектора поляризации учитывает упругие смещения в среде, второе слагаемое – поляризацию среды под действием постоянного электрического поля, первое слагаемое в круглых скобках учитывает

поляризацию среды под действием переменного электрического поля, второе слагаемое в круглых скобках описывает электрооптический эффект Поккельса.

Уравнения для электромагнитного поля в рассматриваемом случае представим в форме

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -c^{-2}(\ddot{\mathbf{E}} + 4\pi\ddot{\mathbf{P}}) \quad (3)$$

$$\nabla(\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}) = 0. \quad (4)$$

В системе уравнений (1), (3), (4) учтена связь зарядов среды через высокочастотное электромагнитное поле.

Статическое электрическое поле $\mathbf{E}_0$ смещает положения равновесия зарядов из точки $\mathbf{R} = 0$. В стационарном приближении при равенстве нулю переменного электрического поля из уравнения (1) находим новое положение равновесия $\mathbf{R}_0 = (e^*/m^*)\Omega_{\perp}^{-2}\mathbf{E}_0$. Вектор поляризации среды в этом случае равен $\mathbf{P}_0 = [(e^{*2}N/m^*)\Omega_{\perp}^{-2}]\mathbf{E}_0 = \chi_{10}\mathbf{E}_0 = (\varepsilon_0 - 1)\mathbf{E}_0/4\pi$. Из этого соотношения получаем выражение для статической диэлектрической проницаемости среды

$$\varepsilon_0 = 1 + \omega_p^2 \Omega_{\perp}^{-2}, \quad (5)$$

где $\omega_p^2 = 4\pi e^{*2}N/m^*$ – эффективная плазменная частота.

При наличии и переменного, и статического электрического полей, перепишем уравнение (1) в форме

$$\Delta\ddot{\mathbf{R}} + \Gamma\Delta\dot{\mathbf{R}} + \Omega_{\perp}^2\Delta\mathbf{R} = \frac{e^*}{m^*}\mathbf{E}, \quad (6)$$

где $\Delta\mathbf{R} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_0$. Решение уравнения (6) имеет вид

$\Delta\mathbf{R} = (e^*/m^*)(\Omega_{\perp}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)^{-1}\mathbf{E}$, тогда решение исходного уравнения (1) представим в виде

$$\mathbf{R} = \frac{e^*}{m^*} \left(\frac{\mathbf{E}_0}{\Omega_{\perp}^2} + \frac{\mathbf{E}}{\Omega_{\perp}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right). \quad (7)$$

Вектор поляризации (2) при подстановке выражения (7) принимает форму

$$\mathbf{P} = \left(\frac{e^{*2}N}{m^*\Omega_{\perp}^2} + \chi_{10} \right) \mathbf{E}_0 + \left(\frac{e^{*2}N}{m^*\Omega_{\perp}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} + \chi_1 + \chi_2 E_0 \right) \mathbf{E}. \quad (8)$$

Представляя вектор поляризации (7) в виде $\mathbf{P} = \frac{\varepsilon_0 - 1}{4\pi}\mathbf{E}_0 + \frac{\tilde{\varepsilon} - 1}{4\pi}\mathbf{E}$, находим выражение для диэлектрической проницаемости среды на частоте ω ,

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_{\infty} + \frac{\omega_p^2}{\Omega_{\perp}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} + 4\pi\chi_2 E_0, \quad (9)$$

где $\varepsilon_{\infty} = 1 + 4\pi\chi_1$ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость среды, измеренная вдали от резонансной частоты $\Omega_{\perp}$.

2. БАЛАНС ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ И ПОЛЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СРЕДЫ

В зависимости от соотношения параметров среды и падающего электромагнитного поля фотоны и фононы в среде будут переносить различную долю энергии. Плотность энергии в среде можно найти, пользуясь методикой баланса энергии полей [5]. Из полевых уравнений

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{B}}, \quad (10)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}} + \frac{4\pi}{c} \dot{\mathbf{P}}, \quad (11)$$

получаем уравнение баланса плотности энергии в среде в виде

$$\nabla \mathbf{S} = -\frac{\partial w}{\partial t}, \quad (12)$$

где $\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ – вектор Пойнтинга, $\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{1}{4\pi} (\mathbf{E} \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{B} \dot{\mathbf{B}}) + \mathbf{E} \dot{\mathbf{P}}$ – изменение плотности энергии электромагнитного поля и поля поляризации среды во времени.

Плотность энергии в среде можно представить в форме

$$w = \frac{m^* N}{2} \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{m^* N \Omega_{\perp}^2}{2} \mathbf{R}^2 + m^* N \Gamma \int \dot{\mathbf{R}}^2 dt - e^* N (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}) \mathbf{R} - \frac{1}{2(\chi_1 + \chi_2 E_0)} [\chi_{10} \mathbf{E}_0 + (\chi_1 + \chi_2 E_0) \mathbf{E}]^2 + \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) + \mathbf{E} \mathbf{P}. \quad (13)$$

Действительно, беря производную по времени от выражения (13), с учетом уравнения движения зарядов (1) и выражения (2) для вектора поляризации $\mathbf{P}$, получаем производную от плотности энергии $\partial w / \partial t$, фигурирующую в правой части уравнения (12). Если в (13) подставить (2), то выражение для плотности энергии среды в присутствии электромагнитного поля принимает вид

$$w = \frac{m^* N}{2} \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{m^* N \Omega_{\perp}^2}{2} \mathbf{R}^2 + m^* N \Gamma \int \dot{\mathbf{R}}^2 dt - e^* N \mathbf{E}_0 \mathbf{R} - \frac{\chi_{10}^2}{2(\chi_1 + \chi_2 E_0)} \mathbf{E}_0^2 + \frac{1}{8\pi} \{ [1 + 4\pi(\chi_1 + \chi_2 E_0)] \mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2 \}. \quad (14)$$

Первые два члена выражения (14) – это кинетическая и потенциальная энергия осцилляций ячеек в единице объема среды, третий член описывает поглощение энергии в среде, четвертый и пятый – плотность электростатической энергии, внесенной в среду внешним электрическим полем, последний член – плотность энергии высокочастотного электромагнитного поля в среде. При повышении частоты осцилляций доля энергии электромагнитного поля (фотонов) в среде увеличивается, а доля энергии поля поляризации (фононов) уменьшается [5] и наоборот.

3. СПЕКТР ПОЛЯРИТОНОВ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СРЕДЕ В ПРИСУТСТВИИ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

3.1. Спектр поляритонов в среде с учетом поглощения

Для вектора электрического поля плоской волны в среде уравнения (3) и (4) имеют вид

$$(k^2 - \omega^2 \epsilon^{-2} \tilde{\epsilon}) \mathbf{E} = \mathbf{k}(\mathbf{kE}), \quad (15)$$

$$\tilde{\epsilon} \mathbf{kE} = 0. \quad (16)$$

В безграничной диэлектрической среде, представляя электрический вектор в виде суммы поперечной и продольной компонент $\mathbf{E} = \mathbf{E}_\perp + \mathbf{E}_\parallel$ (по отношению к волновому вектору $\mathbf{k}$), из уравнений (15) и (16) для поперечного поля $\mathbf{kE}_\perp = 0$ получаем дисперсионное уравнение для поляритонов с учетом поглощения

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(\epsilon_\infty + 4\pi\chi_2 E_0 + \frac{\omega_p^2}{\Omega_\perp^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right). \quad (17)$$

3.2. Спектр поляритонов в слабопоглощающей среде

В слабопоглощающей среде $\Gamma \rightarrow 0$ дисперсионное уравнение (17) можно представить в виде

$$\omega^4 - \left(\Omega_\perp^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_2} + \frac{c^2 k^2}{\epsilon_2} \right) \omega^2 + \Omega_\perp^2 \frac{c^2 k^2}{\epsilon_2} = 0, \quad (18)$$

где $\epsilon_2 = \epsilon_\infty + 4\pi\chi_2 E_0$. Дисперсионное уравнение (18) имеет решения для частот $\omega > 0$ в форме двух ветвей поляритонного спектра [11]

$$\omega_\pm = \left\{ \frac{1}{2} \left(\Omega_\perp^2 + \frac{\omega_p^2 + c^2 k^2}{\epsilon_\infty + 4\pi\chi_2 E_0} \right) \pm \left[\frac{1}{4} \left(\Omega_\perp^2 + \frac{\omega_p^2 + c^2 k^2}{\epsilon_\infty + 4\pi\chi_2 E_0} \right)^2 - \Omega_\perp^2 \frac{c^2 k^2}{\epsilon_\infty + 4\pi\chi_2 E_0} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (19)$$

Поляритонный спектр зависит от напряженности внешнего электрического поля E_0 .

3.3. Частота продольных осцилляций

Помимо поперечных осцилляций, в среде генерируются также и продольные осцилляции в результате связи ионов среды через электромагнитное поле. Если длина волны много больше размеров элементарной ячейки среды $ka \ll 1$, то сдвигом фаз осцилляций соседних ячеек, т.е. пространственной дисперсией можно пренебречь. В длинноволновом приближении представим уравнения для продольных колебаний среды без учета затухания и продольной компоненты высокочастотного электрического поля в виде

$$\ddot{\mathbf{R}}_\parallel + \Omega_\perp^2 \mathbf{R}_\parallel = (e^* / m^*) \mathbf{E}_\parallel, \quad (20)$$

$$\nabla(\mathbf{E}_{\parallel} + 4\pi\mathbf{P}_{\parallel}) = 0, \quad (21)$$

где $\mathbf{P}_{\parallel} = e^* N \mathbf{R}_{\parallel} + \chi_1 \mathbf{E}_{\parallel} + \chi_2 E_0 \mathbf{E}_{\parallel}$. Из уравнения (21) следует, что $\mathbf{k}(\mathbf{E}_{\parallel} + 4\pi\mathbf{P}_{\parallel}) = 0$, т.е. $\mathbf{E}_{\parallel} = -4\pi\mathbf{P}_{\parallel}$. Тогда находим продольное электрическое поле $\mathbf{E}_{\parallel} = -4\pi e^* N \varepsilon_2^{-1} \mathbf{R}_{\parallel}$. Если это выражение для $\mathbf{E}_{\parallel}$ подставить в уравнение продольных колебаний среды (20)

$$\ddot{\mathbf{R}}_{\parallel} = -(\Omega_{\perp}^2 + \omega_p^2 \varepsilon_2^{-1}) \mathbf{R}_{\parallel}, \quad (22)$$

то мы находим частоту продольных осцилляций $\Omega_{\parallel} = [\Omega_{\perp}^2 + \omega_p^2 (\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0)^{-1}]^{1/2}$.

Частота продольных осцилляций среды (продольных фононов) зависит от напряженности внешнего электрического поля E_0 . С учетом выражения (5) $\omega_p^2 = (\varepsilon_0 - 1)\Omega_{\perp}^2$ получаем связь частоты поперечных $\Omega_{\perp}$ и продольных $\Omega_{\parallel}$ фононов в форме $\Omega_{\parallel} / \Omega_{\perp} = [1 + (\varepsilon_0 - 1)(\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0)^{-1}]^{1/2}$.

Выражение для поляритонного спектра (19) с учетом выражения для частоты продольных фононов $\Omega_{\parallel}$ можно переписать в виде

$$\omega_{\pm} = \left\{ \frac{1}{2} \left(\Omega_{\parallel}^2 + \frac{c^2 k^2}{\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0} \right) \pm \left[\frac{1}{4} \left(\Omega_{\parallel}^2 + \frac{c^2 k^2}{\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0} \right)^2 - \Omega_{\perp}^2 \frac{c^2 k^2}{\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (23)$$

Из (23) следует, что при $k \rightarrow 0$ частота верхней ветви ω_{+} спектра стремится к частоте продольных фононов $\omega_{+} \rightarrow \Omega_{\parallel}$, а частота нижней ветви поляритонного спектра равна нулю $\omega_{-} = 0$.

На рис. 1 представлен поляритонный спектр (23) с учетом зависимости от внешнего электрического поля. В среде с положительным значением диэлектрической восприимчивости $\chi_2 > 0$ при увеличении напряженности электрического поля E_0 ширина щели в спектре поляритонов уменьшается. Частота поперечных оптических фононов не зависит от напряженности внешнего электрического поля, а определяется только упругими параметрами данного кристалла. Для двухатомного кристалла кубической сингонии, например $NaCl$, частота поперечных оптических фононов равна $\Omega_{\perp} = 3.09 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, а диэлектрические проницаемости кристалла при температуре $t^0 = 20^{\circ} \text{ C}$ имеют значения $\varepsilon_0 = 5.62$, $\varepsilon_{\infty} = 2.25$.

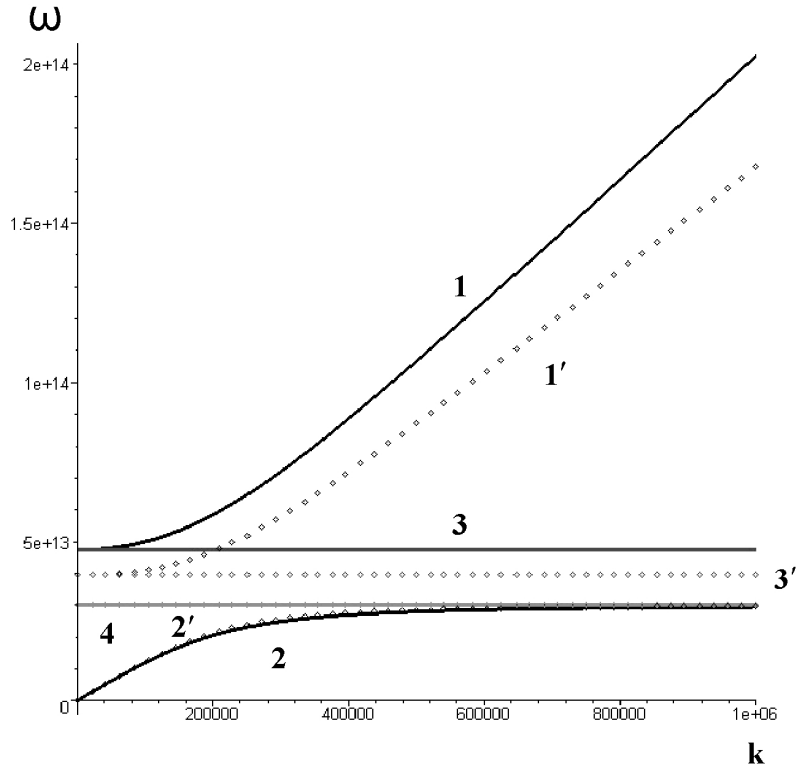


Рис. 1. Спектр поляритонов в диэлектрической среде в присутствии внешнего электрического поля. По оси ординат отложены значения частоты поляритонов ω (c^{-1}), по оси абсцисс – значения волнового вектора k (m^{-1}): верхняя ветвь поляритонного спектра $\omega_+(k, E_0)$, кривая 1 при $E_0 = 0$, кривая 1' – при $4\pi\chi_2 E_0 = 1$; нижняя ветвь поляритонного спектра $\omega_-(k, E_0)$, кривая 2 – при $E_0 = 0$, кривая 2' – при $4\pi\chi_2 E_0 = 1$; прямые 3 и 3' – продольные фононы $\Omega_{||}(E_0)$ при $E_0 = 0$ и $4\pi\chi_2 E_0 = 1$; прямая 4 – поперечные фононы $\Omega_{\perp} = 3.1 \cdot 10^{13} c^{-1}$; диэлектрические проницаемости среды $\varepsilon_0 = 5.6$, $\varepsilon_{\infty} = 2.25$.

При повышении напряженности внешнего электрического поля верхняя ветвь поляритонного спектра (рис. 1, кривая 1') приобретает меньший наклон к оси абсцисс, а частота продольных фононов уменьшается (рис. 1, прямая 3'). Ширина щели в поляритонном спектре

$$\Delta\omega_g = \Omega_{||} - \Omega_{\perp} = \Omega_{\perp} \left\{ \left[1 + (\varepsilon_0 - 1)(\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0)^{-1} \right]^{1/2} - 1 \right\} \quad (24)$$

зависит от напряженности внешнего электрического поля E_0 . Электромагнитные волны, частоты которых попадают в щель поляритонного спектра $\Delta\omega_g$, не распространяются в среде, а отражаются от ее границы, т.е. границу среды можно трактовать как управляемое внешним электрическим полем зеркало. Частота поперечных оптических фононов (рис. 1, прямая 4) не зависит от напряженности внешнего электрического поля.

4. СПЕКТР ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА, ПРОШЕДШЕГО УПРАВЛЯЕМЫЙ ФИЛЬТР

Диэлектрическую среду, к которой приложено внешнее электрическое поле, можно рассматривать как управляемый частотный фильтр. У импульсов, прошедших через такую диэлектрическую среду, спектр которых попадает в область щели поляритонного спектра $\Delta\omega_g$, при сужении или расширении щели меняется спектральный состав.

Например, гауссов импульс $a_G(t) = \exp(-i\omega_0 t - t^2 / T_0^2)$ с длительностью $2T_0$ и с несущей частотой ω_0 имеет гауссову спектральную форму на входе в среду

$$A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{T_0^2}\right) \exp[i(\omega - \omega_0)t] dt = \sqrt{\pi} T_0 \exp\left[-\frac{1}{4}(\omega - \omega_0)^2 T_0^2\right] \quad (25)$$

с полушириной спектра $\Delta\omega = \omega - \omega_0 = 2/T_0$. На выходе из среды толщиной L форму импульса можно определить, подставляя выражения $A(\omega)$ (25) в интеграл

$$A(t, L) = \frac{1}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\Omega_{\perp}} A(\omega) \exp(-i\omega t + ikL) d\omega + \int_{\Omega_{\parallel}}^{\infty} A(\omega) \exp(-i\omega t + ikL) d\omega \right], \quad (26)$$

где

$$k = \frac{\omega}{c} \left[\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0 + \frac{2\pi\Omega_{\perp}^2}{\alpha T (\Omega_{\perp}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)} \right]^{1/2},$$

$$\Omega_{\parallel} = \Omega_{\perp} \left[1 + \frac{2\pi}{\alpha T (\varepsilon_{\infty} + 4\pi\chi_2 E_0)} \right]^{1/2}.$$

Интеграл (25) вычисляется численными методами. Из выражения для интеграла (26) следует, что форма импульса, прошедшего через такую среду, зависит от напряженности внешнего электрического поля E_0 и температуры среды T .

На рис. 2 показаны профили гауссова импульса с несущей частотой ω_0 , попадающей в область щели поляритонного спектра $\Delta\omega_g = 2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, на входе (кривая 1) в среду и на выходе (прямая 2, кривая 3) из среды толщиной L .

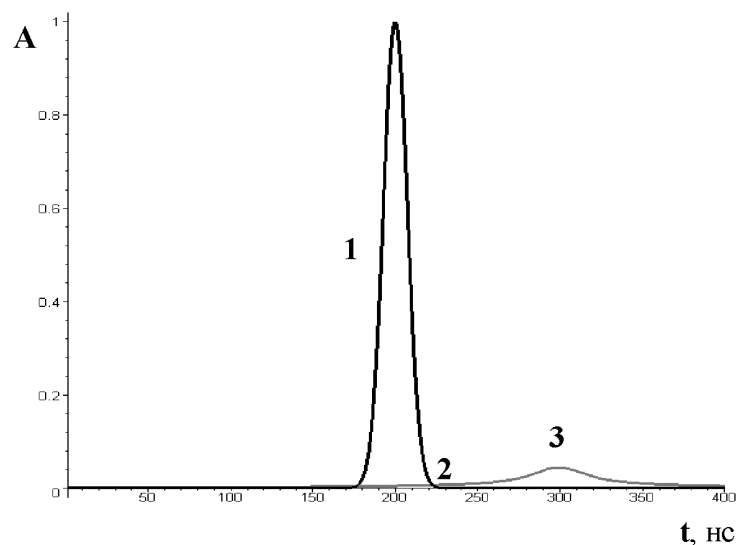


Рис. 2. Профили гауссова импульса с несущей частотой, лежащей в области щели поляритонного спектра в диэлектрической среде: кривая 1 – на входе в среду, прямая 2 – на выходе из среды при напряженности внешнего электрического поля $E_0 = 0$, кривая 3 – на выходе из среды при $E_0 \neq 0$ ($4\pi\chi_2 E_0 = 3$).

Ширина спектра импульса с длительностью $2T_0 = 20$ нс и несущей частотой $\omega_0 = 3 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ равна $\Delta\omega = 4 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$. Так как его спектр лежит в области спектральной щели, при $E_0 = 0$ импульс отражается от границы среды, его амплитуда на выходе из среды равна нулю (рис. 2, прямая 2). При напряженности внешнего электрического поля, определяемой соотношением $4\pi\chi_2 E_0 = 3$, ширина щели уменьшается до значения $\Delta\omega_g = 1.16 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$. В этом случае импульс частично проходит через среду (рис. 2, кривая 3), но его амплитуда на выходе уменьшается приблизительно в 14 раз как за счет дисперсионного расплывания в среде, так и в результате «вырезания» части гармоник поляритонной спектральной щелью.

Таким образом, с помощью внешнего электрического поля можно управлять амплитудой импульса, прошедшего через диэлектрическую среду, т.е. создать «полевой спектральный транзистор», аналогичный по методу управления электронному полевому транзистору со встроенным каналом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Взаимодействие электромагнитного поля и диэлектрической среды приводит к генерации в среде волн поляризации. Связанному состоянию поляризационных волн и электромагнитных волн соответствуют квазичастицы – поляритоны. При

повышении частоты поля доля энергии поляризационных колебаний среды в поляритонах верхней ветви спектра стремится к нулю, а в поляритонах нижней ветви к ста процентам. На оптических частотах основную долю энергии поляритонов верхней ветви в среде переносят фотоны, а на частотах терагерцового диапазона для поляритонов нижней ветви – фононы. Но для любых частот электромагнитного поля в среде всегда возбуждаются поляритоны, которые трансформируются в фотоны на выходе из среды.

В работе показано, что в диэлектрической среде спектр поляритонов зависит от напряженности внешнего электрического поля. Варьируя напряженность внешнего электрического поля, приложенного к диэлектрической среде, можно менять ширину поляритонного спектра. При этом спектр электромагнитного импульса, прошедшего через такую среду, на выходе из среды изменяется.

Физический механизм, основанный на управлении с помощью внешнего электрического поля амплитудой электромагнитного импульса, прошедшего через диэлектрическую среду, можно использовать для создания управляемых спектральных фильтров, а также «полевых спектральных транзисторов» в терагерцевом и оптическом диапазонах.

Список литературы

1. Толпыго К.Б. Физические свойства решетки типа каменной соли, построенной из деформируемых ионов / Толпыго К.Б. // ЖЭТФ. – 1950. – Т. 20, вып. 6. – С. 497–509.
2. Huang K. On the interaction between the radiation field and ionic crystals / Huang K. // Proc. Roy. Soc. – 1951. – V. A 208. – P. 352–365.
3. Fano U. Atomic theory of electromagnetic interaction in dense materials / Fano U. // Phys. Rev. – 1956. – V. 103, No. 5. – P. 1202–1218.
4. Hopfield J.J. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals / Hopfield J.J. // Phys. Rev. – 1958. – V. 112, No. 5. – P. 1555–1567.
5. Борн М. Динамическая теория кристаллических решеток / Борн М., Хуан К. – Москва: Иностранная литература. – 1958. – 488 с.
6. Dzedolik I.V. One-dimensional controllable photonic crystal / Dzedolik I.V. // J. Opt. Soc. Am. B. – 2007. – V. 24, No. 10. – P. 2741–2745.
7. Pereira M.F. Intersubband antipolaritons: Microscopic approach / Pereira M.F. // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 75, 195301. – P. 1-5.
8. Dzedolik I.V. Splitting of an optical pulse as disintegration of a quasi-particle bunch in a transversely inhomogeneous dielectric medium / Dzedolik I.V. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 2009. – V. 11. – 015704. – 6 p.
9. Balili R. Bose-Einstein condensation of microcavity polaritons in a trap / Balili R., Hartwell V., Snoke D. et al. // Science. – 2007. – V. 316. – P. 1007-1009.
10. Воронова Н.С. Бозе-конденсация экситонных поляритонов в оптической микрополости / Воронова Н.С., Лозовик Ю.Е. // ФТТ. – 2008. – Т. 50, вып. 8. – С. 1496-1500.
11. Dzedolik I.V. Polariton Spectrum Control in Dielectric Medium / Dzedolik I.V., Mikulska. – Proceedings of 2nd IEEE International Workshop on “THz Radiation: Basic Research and Applications TERA’2010”, Sevastopol, Ukraine, 12-14 September, 2010. – P. 288-290.
12. Агранович В.М. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов / Агранович В.М., Гинзбург В.Л. – М.: Наука. – 1979. – 432 с.
13. Давыдов А.С. Теория твердого тела / Давыдов А.С. – Москва: Наука. – 1976. – 639 с.

Дзедолік І.В. Керування спектром полярітонів у діелектричному середовищі / Дзедолік І.В., Каракчієва О.С., Мікульська Ю.П. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 64-74.

На основі поляритонної моделі досліджена залежність від зовнішнього електричного поля і температури спектру електромагнітного імпульсу, що пройшов через діелектричний іонний кристал кубічної сингонії. Показано, що за допомогою зовнішнього електричного поля, яке приложене до кристала, можна керувати спектральним складом імпульсу, що може бути використано для створення керованих фільтрів в терагерцевому та оптичному діапазонах.

Ключові слова: діелектричний кристал, поляритон, електромагнітний імпульс.

Dzedolik I.V. Polariton spectrum control in dielectric medium / Dzedolik I.V., Karakchieva O.S., Mikulska J.P. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 64-74.

The depending of spectrum electromagnetic pulse passed through a dielectric ionic crystal of cubic system on external electric field and temperature was researched on basis of polariton model. With a help of external electric field applied to the crystal one can control a spectral composition of the pulse. It can be used for creation of controlled filters in terahertz and optical wave ranges.

Keywords: dielectric crystal, polariton, electromagnetic pulse.

Поступила в редакцію 29.10.2010 г.

УДК 537.312.5, 539.21

ONE-ELECTRON OPTICAL PROPERTIES OF ELLIPSOID METAL NANOSHELLS

Kulish V.V.¹, Tomchuk P.M.²

¹*Physics-Technical Institute, NTUU "KPI", Dept. of Applied Physics, Kyiv, Ukraine*

²*Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Dept. of theoretical physics, Kyiv, Ukraine*

E-mail: kulish_volv@ukr.net

We investigate optical properties of nanoshells (small composite clusters composed of a dielectric core and a metal shell; contribution of the shell dominates in the optical properties of the whole cluster) in the frequency range far from plasmon resonance. In particular, nanoshells with the shape of a stretched rotation ellipsoid are considered. For such shell-type particle the electron wavefunction, the electron energy, the wavenumber spectrum, and the matrix elements of corresponding optical transitions were found. Using these quantities, the classical optical conductivity of such shells (the quantum effects are not considered) and the quantum optical conductivity (relevant addendums for the classical conductivity that are caused by the quantum effects like the electron spectrum discreteness) were found. Oscillating nature of the dependence of these addendums on the incident light frequency is established.

Keywords: nanoshells, optical conductivity, small clusters, spectrum quantization.

INTRODUCTION

Nanotechnologies that use metal nanoparticles become popular recently. As a further development of these technologies, new technologies that use so-called nanoshells [1-4] have become possible after this type of nanoparticles have been obtained. A nanoshell is a composite nanoparticle that consists of a dielectric core and a thin metal shell.

Technical applications of metal nanoparticles in common are mostly based on their unique optical properties. For instance, these particles can effectively absorb light on a given wavelength. Composite nanoparticles of this type represent a special practical interest because they allow widening of the operating range of work wavelengths in comparison to traditional solid metal nanoparticles. Also, nanoshells turn out to be rather promising for a number of technological applications (especially in medicine and biology, see, for example, [4]) because their optical properties can be regulated more flexibly than in traditional systems. This flexibility appears because the internal and the external radii of the metal shell (that dominates in the optical response of the whole particle) can be changed independently.

It should be mentioned that such shell-type particles have become of particular interest quite recently. They have been studied intensively both theoretically [5-11] (using classical and quantum approach) and experimentally [3,5,12,13]. However, their optical properties have been studied near plasmon resonance for the most part. The articles that investigate contribution of individual transitions into the light absorption (the infrared spectrum mostly; experimental studies of thin metal films and small metal particles in the infrared spectrum are represented, for example, by [14]) usually consider one of two

opposite limiting cases. The first case corresponds to the situation when distances between electron quantum levels are small as compared to the light quantum energy, and the sum over electron states is replaced with an integral. The second limiting case corresponds to the situation when distances between energy levels are of the same order with the light quantum energy, and only two or three levels are to be taken into account. However, a typical shell has much more of actual electron energy levels. On the other hand, in this study we demonstrate that the quantum effects related to the electron energy quantization within the shells cannot be neglected. The reason is that the energy states for a thin shell are quasi-one-dimensional, so the distance between them becomes greater as the shell becomes thinner. Related theoretical studies for thin metal films [15] show that such effects make an essential contribution to the film optical properties in the infrared spectrum that we consider.

Note that an oscillating dependence of electrical and optical properties of a metal nanowire on its thickness, similar to the dependence obtained in the current article, was observed experimentally in [16]. Such a dependence for a solid metal nanowire indicates that similar quantum effects in shell-type systems are much stronger. Theoretical studies of thin metal films [15] also show this quantum size effect.

Furthermore, studies on the subject mainly focused on the magnetic absorption (see, e.g., [17-19]), which represents only one component of the total light absorption (this component is related to the magnetic vector of electromagnetic wave). However, in small metal particles the prevalence of the magnetic absorption or the electric absorption is determined by the particle size, particle shape, and the electromagnetic wave frequency [20].

It is important to note that optical properties of small metal particles depend strongly on their shape (see, for example, [20]). This makes necessary separate studies of nanoshells of different shapes, too. Most theoretical studies focused on the cases of spherical and cylindrical shell (see, e.g., [21]). This makes an investigation of the single-electron optical properties of an ellipsoid nanoshell with consideration of above-mentioned quantum effects especially important.

In this work, we perform a theoretical study of the optical properties of ellipsoid nanoshells. We obtain the wavefunctions, the wave number spectrum and the energy spectrum for an electron in a nanoshell with the shape of a stretched rotation ellipsoid. Using them, we obtain the matrix elements of the optical transitions (electric absorption) in single-electron approximation for frequencies far from plasmon resonance and, finally, the optical conductivity of above-mentioned shells.

1. SETTING OF THE PROBLEM. GENERAL EXPRESSION FOR THE OPTICAL CONDUCTIVITY OF A SMALL METAL PARTICLE

Let us consider a nanoshell with the shape of a rotation ellipsoid and an electromagnetic wave that falls on it. We consider single-electron light absorption in such particle. As we mentioned before, the metal shell dominates in the optical response of the whole composite nanoshell. So, we can model our composite nanoshell with just an ellipsoid metal shell.

Size of the particle is considered small comparing to the incident light wavelength, so the field of the electromagnetic wave can be considered uniform on the distances of the order of the particle size. Also, the nanoshell is considered thin enough so the local field inside the shell is approximately uniform (see the chapter “Local field in an ellipsoid nanoshell”). (Local fields in spherical nanoshells were studied theoretically, for instance, in [3] with references on [22-24].)

Considering the symmetry of our system, it is convenient to use the spheroidal coordinates (ξ, η, φ) with the constant parameter a (see the Appendix). Let's consider a shell limited by two rotation ellipsoids. The ellipsoids are described by the equations $\xi = \xi_1$, $\xi = \xi_2$. Their semiaxes have the lengths

$$R_{\parallel}^{(1)} = a\xi_1, \quad R_{\perp}^{(1)} = a\sqrt{\xi_1^2 - 1}, \quad (1)$$

for the internal ellipsoid and

$$R_{\parallel}^{(2)} = a\xi_2, \quad R_{\perp}^{(2)} = a\sqrt{\xi_2^2 - 1} \quad (2)$$

for the external one. The parameter a of the coordinate system can be considered as a characteristic size of the shell.

Our task is to obtain the electron wavefunctions in such shells, the electron energy spectrum, the matrix elements of the optical transitions and finally, using these quantities, to find the optical conductivity (an electric component) of such ellipsoid shell. We will use the following expression (see, for example, [25, 26]) for optical conductivity components for a small metal particle in general case

$$\sigma_j = \frac{\pi e^2 \omega}{V_s} \sum_{i,f} |\langle i | x_j | f \rangle|^2 f_e(E_i)(1 - f_e(E_f))\delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (3)$$

here the optical conductivity tensor $\hat{\sigma}$ written in the diagonal form. The expression is obtained for the case of a spatially uniform electrical field inside the particle.

In our case, it is convenient to introduce two components of the absorbed energy and, consequently, two components of the optical conductivity. If we direct x_3 axis along the rotation axis of the shell ellipsoid, absorbed energy components that correspond to x_1 and x_2 axes are equal because of the system symmetry. Also, because of the system symmetry, the matrix elements that correspond to x_1 and x_2 axes are equal, too. So, we can introduce orthogonal ($\sigma_{\perp} = \sigma_1 = \sigma_2$) and parallel ($\sigma_{\parallel} = \sigma_3$) optical conductivity components.

In this work, we perform theoretical study of optical properties of ellipsoid nanoshells. We obtain the wavefunctions, the wave number spectrum and the energy spectrum for an electron in a nanoshell with the shape of a stretched rotation ellipsoid. Using them, we obtain the matrix elements of the optical transitions (electric absorption) in single-electron approximation for frequencies far from plasmon resonance and, finally, the optical conductivity of above-mentioned shells. Note that optical conductivity of such shell becomes an essentially tensor quantity, and its optical properties become anisotropic.

2. LOCAL FIELD IN AN ELLIPSOID SHELL

As we mentioned in the previous chapter, the expression (3) is obtained for the case of spatially uniform local field inside the particle – in our case, inside the ellipsoid shell.

So, in order to use this expression, we have to find an expression for this local field and to show that it can be considered approximately uniform.

We consider an ellipsoid shell described in the previous chapter. (The rotation axis of the ellipsoid coincides with the Oz axis in the corresponding Cartesian coordinates.) The shell is placed in an external electric field $\mathcal{E}_0$ that can be described with a potential V_0 . (The field $\mathcal{E}_0$ can be considered uniform because the shell size is much smaller than an incident light wavelength. Time-dependent oscillating factor $\cos(\omega t)$ doesn't influence our results and can be omitted.)

According to the superposition principle considering two orientations of $\mathcal{E}_0$ – along Oz axis, so

$$V_0 = V_{0,x} = -\mathcal{E}_0 x = -\mathcal{E}_0 a \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \varphi, \quad (4)$$

and along one of two axes Ox or Oy, say Ox, so

$$V_0 = V_{0,z} = -\mathcal{E}_0 z = -\mathcal{E}_0 a \xi \eta. \quad (5)$$

is enough for a description of an arbitrary oriented field. Using reasons analogous to given in [27] we can seek the potential in the form

$$V = V_0 + V_0 F(\xi), \quad \xi \in (\xi_2, +\infty), \quad (6)$$

where $F(\xi)$ is a certain admissible function of ξ . After solving the Laplace equation in the spheroidal coordinates for a potential given by (6) and using sewing conditions on the shell boundary, we obtain the following expression for a potential inside the shell:

$$V = AV_0 + CV_0 \cdot Df(\xi), \quad \xi \in [\xi_1, \xi_2], \quad (7)$$

here the function $f(\xi)$

$$f(\xi) = f_{\perp}(\xi) = \frac{\xi}{\xi^2 - 1} + \frac{1}{2} \ln \frac{\xi - 1}{\xi + 1} \quad (8)$$

for an orthogonal (to the ellipsoid rotation axis) orientation of the electric vector, and

$$f(\xi) = f_{\parallel}(\xi) = \frac{1}{\xi} + \frac{1}{2} \ln \frac{\xi - 1}{\xi + 1} \quad (9)$$

for a parallel orientation. The coefficient A

$$A = \frac{\frac{\varepsilon}{\varepsilon - 1} \frac{1}{\xi_1(\xi_1^2 - 1)} - f(\xi_1)}{f(\xi_2)\xi_2(\xi_2^2 - 1) \left((\varepsilon - 1)(f(\xi_2) - f(\xi_1)) + \frac{\varepsilon}{\xi_1(\xi_1^2 - 1)} \right) - (\varepsilon - 1)f(\xi_2) - f(\xi_1) + \frac{\varepsilon}{\varepsilon - 1} \frac{1}{\xi_1(\xi_1^2 - 1)}}, \quad (10)$$

and the product of the coefficients C and D

$$CD = \frac{1}{f(\xi_2)\xi_2(\xi_2^2 - 1) \left((\varepsilon - 1)(f(\xi_2) - f(\xi_1)) + \frac{\varepsilon}{\xi_1(\xi_1^2 - 1)} \right) - (\varepsilon - 1)f(\xi_2) - f(\xi_1) + \frac{\varepsilon}{\varepsilon - 1} \frac{1}{\xi_1(\xi_1^2 - 1)}} \quad (11)$$

for both orientations of the incident light electric vector. So, an electric field inside the shell for the orthogonal orientation can be written in the form

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_o (A + CDf_{\perp}(\xi)) - \mathbf{E}_o \mathbf{e}_{\xi} \frac{CD}{\xi^2 - 1} \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - \eta^2}} \cos \varphi, \quad (12)$$

here $\mathbf{e}_{\xi}$ is a unit vector for the coordinate ξ , and for the parallel orientation

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_o (A + CDf_{\parallel}(\xi)) - \mathbf{E}_o \mathbf{e}_{\xi} \frac{CD\eta}{\xi \sqrt{(\xi^2 - 1)(\xi^2 - \eta^2)}}. \quad (13)$$

After performing a limiting process to a solid metal ellipsoidal particle and an spherical metal shell the expressions we obtain (for the potential and the field, correspondingly) transform into known expressions (from [27] and [3], correspondingly), thus validating the results we obtained.

Analysis of the expressions (12) and (13) shows that the field inside a thin ($\xi_2 - \xi_1 \ll \xi_2$) ellipsoid shell can be considered approximately uniform if the following relation fulfils:

$$\left| \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} \xi_1 (\xi_1^2 - 1) (f(\xi_1) - f(\xi_2)) \right| \ll 1. \quad (14)$$

This relation has similar form for the both orientations of the incident light electric field, but we should note that the function $f(\xi)$ that enters (14) is given by (9) for the longitudinal field orientation and by (8) for the orthogonal orientation.

So, we can conclude that if the relation (14) fulfils, a field in an ellipsoidal nanoshell can be considered uniform with enough precision. This allows us to use (3) for a calculation of an optical conductivity of the shell.

3. THE ELECTRON WAVEFUNCTIONS AND THE ENERGY SPECTRUM

To calculate the optical conductivity of the shell we consider, we need, first, to obtain the wavefunctions and the energy spectrum for an electron in the shell, and second, use them to find the matrix elements that enter into (3). This chapter is dedicated to the wavefunctions and the energy spectrum calculations.

Let us consider the shell as an orthogonal potential well for an electron (by the coordinate ξ). The potential energy $V_e(\xi)$ of an electron in such shell can be written

$$V_e = V_e(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi \in (\xi_1, \xi_2] \\ V_{0e}, & \xi \notin (\xi_1, \xi_2] \end{cases}, \quad (15)$$

where V_{0e} is the potential well depth. Here the dielectric inside and outside the shell is considered similar (this simplification doesn't influence our result as long as we can use the infinite potential well model).

The eigenfunctions of an electron in such potential well can be written in the form

$$\psi(\xi, \eta, \varphi) = R(\xi)S(\eta) \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad (16)$$

the functions $R(\xi)$ and $S(\eta)$ are the radial and the angular wavefunction, correspondingly. After substituting a function of such type into the Schrödinger equation and variables separation we obtain for $R(\xi)$ and $S(\eta)$ inside the shell ($\xi \in [\xi_1, \xi_2]$)

$$\frac{d}{d\xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{dR}{d\xi} \right) + \left(-\lambda + (ka)^2 (\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right) R = 0, \quad (17)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left((1 - \eta^2) \frac{dS}{d\eta} \right) + \left(\lambda + (ka)^2 (1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right) S = 0 \quad (18)$$

here k is the electron wave number, λ is the constant of the variables separation. For an electron outside the shell, we must replace k^2 with $k^2 + \frac{2mV_{0e}}{\hbar^2}$ in these equations.

To solve the equations (17) and (18), we apply the theory of a spheroidal functions, see, for instance, [28]. First, we note that for typical nanoshells the condition $ka \gg l$ fulfils. (If we take, say, $k = k_F = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ – the Fermi wave number of gold and $a = 20 \text{ nm}$ – the typical nanoshell size, we obtain for the product $ka = 230 \gg 1$.) This, according to [28], allows us to expand the variables separation constant λ in series:

$$\lambda = \lambda_{lm} = -(ka)^2 + ka(2l - 2m + 1) - \frac{1}{8} \left((2l - 2m + 1)^2 + 5 - 8m^2 \right) + O\left(\frac{1}{ka}\right), \quad (19)$$

here l is an orbital quantum number. This representation allows us to solve (17) in the quasiclassical approximation. After applying certain transformations that we omit, the solution of (17) can be written in the form

$$R(\xi) \sim \frac{\exp(\pm i \int p_1(\xi) d\xi)}{\sqrt{(\xi^2 - 1) p_1(\xi)}} \quad (20)$$

with the function $p_1(\xi)$

$$p_1(\xi) = \sqrt{\frac{\xi^2}{\xi^2 - 1} (ka)^2 - \frac{2l - 2m + 1}{\xi^2 - 1} ka - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)^2}} \approx \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} ka. \quad (21)$$

After taking the integral using the quasiclassical approximation, we can rewrite the radial wavefunction in the form

$$R(\xi) \sim \frac{\sin(ka\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha)}{\sqrt{\xi\sqrt{\xi^2 - 1}}}, \quad (22)$$

where α is a certain initial phase.

The procedure of finding the angular wavefunction $S(\eta)$ is more complex. After applying the results from [28] for the quasi-classical approximation for spheroidal functions, the solution of (18) inside the shell can be written in the form

$$S(\eta) \sim \frac{1}{\sqrt{(1 - \eta^2) p_2(\eta)}} \cos\left(\int_{-\eta_0}^{\eta} p_2(\eta) d\eta - \frac{\pi}{4}\right). \quad (23)$$

Here, in accordance with [28], we suppose that an electron in the shell is placed in the potential well $[-\eta_0, \eta_0]$; the function $p_2(\eta)$ can be written in the form

$$p_2^2(\eta) \approx (ka)^2 \left(-\frac{\eta^2}{1-\eta^2} \right) + \frac{ka(2l-2m+1)}{1-\eta^2} - \frac{1}{8(1-\eta^2)} \left((2l-2m+1)^2 + 5 \right) - \frac{m^2 \eta^2}{(1-\eta^2)^2}, \quad (24)$$

and η_0 is the additional, lesser than 1 root of the equation $p_2(\eta)=0$:

$$\eta_0 = \sqrt{1 + \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 + 4m^2(ka)^2}}{2(ka)^2}}. \quad (25)$$

Taking into consideration the fact that outside the potential well the electron wavefunction decays exponentially and the fact that we can consider $\eta_0 \ll 1$ (this relation, according to [28], implies from the relation $ka \gg 1$), we can, after certain transformations, rewrite $S(\eta)$ in the form

$$S(\tilde{\eta}) \sim \frac{1}{\sqrt[4]{1-\tilde{\eta}^2}} \cos \left(\left(q + \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{\eta} \sqrt{1-\tilde{\eta}^2} + \arcsin \tilde{\eta} + \frac{\pi}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right), \quad (26)$$

where $\tilde{\eta} = \frac{\eta}{\eta_0}$, $q = l - m$.

So, we can write a quasi-classical electron wavefunction in the shell as follows:

$$\begin{aligned} \psi(\xi, \eta, \varphi) = & \frac{A}{\sqrt[4]{\eta_0^2 - \eta^2}} \cos \left(\left(\frac{\eta}{\eta_0} \sqrt{1 - \left(\frac{\eta}{\eta_0} \right)^2} + \arcsin \frac{\eta}{\eta_0} + \frac{\pi}{2} \right) \left(q + \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right) \times \\ & \times \frac{\sin(ka\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha) \exp(im\varphi)}{\sqrt{\xi} \sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{2\pi}} \end{aligned} \quad (27)$$

where A is a normalization constant. Outside the shell ($\eta \notin [-\eta_0, \eta_0]$) we can consider $\psi=0$. The normalization integral for the constant A is

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_{\xi_1}^{\xi_2} d\xi \frac{\sin^2(ka\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha)}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} \int_{-1+\delta}^{1-\delta} \frac{\eta_0 d\tilde{\eta}}{\eta_0 \sqrt{1-\tilde{\eta}^2}} \times \\ \times \cos^2 \left(\left(\tilde{\eta} \sqrt{1-\tilde{\eta}^2} + \arcsin \tilde{\eta} + \frac{\pi}{2} \right) \left(q + \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right) a^3 (\xi^2 - \tilde{\eta}^2 \eta_0^2) = 1 \end{aligned} \quad (28)$$

where $a^3 (\xi^2 - \tilde{\eta}^2 \eta_0^2) d\xi d\eta d\varphi = a^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi$ is a small volume element in the spheroidal coordinates (see the Appendix). After rather complex transformations, the following form of the constant A implies from (28):

$$A = 2 \sqrt{\frac{1}{\pi a^3 (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})}}. \quad (29)$$

So, finally we can rewrite a quasi-classical electron wavefunction in the shell as follows:

$$\begin{aligned} \psi(\xi, \eta, \varphi) = & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2}{a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})}} \frac{\sin(ka\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha)}{a\sqrt{\xi}\sqrt{\xi^2 - 1}} \times \\ & \times \frac{1}{\sqrt[4]{\eta_0^2 - \eta^2}} \cos\left(\left(\frac{\eta}{\eta_0} \sqrt{1 - \left(\frac{\eta}{\eta_0}\right)^2} + \arcsin \frac{\eta}{\eta_0} + \frac{\pi}{2}\right)\left(q + \frac{1}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (30)$$

Now we have to find the wave number spectrum. First, we note that the interval $[\xi_1, \xi_2]$ should contain an integer number of the half-waves for the function $R(\xi)$:

$$ka\sqrt{\xi_2^2 - 1} - ka\sqrt{\xi_1^2 - 1} = \pi n. \quad (31)$$

So, we can write the wavenumber spectrum

$$ka = \frac{\pi n}{\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}} \quad (32)$$

and the corresponding electron energy spectrum

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2 n^2}{a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})}. \quad (33)$$

Note that the electron spectrum (32), (33) for the considered shell is quasi-one-dimensional, similar to the electron spectrum in an infinite rectangular potential well. This fact takes place because the shell we consider is thin.

In order to obtain the initial phase α , we use the fact that in our model the electron wavefunction is equal to zero on the extremities of the interval $[\xi_1, \xi_2]$. This condition can be written in the form

$$\begin{cases} ka\sqrt{\xi_1^2 - 1} + \alpha = 0 \\ ka\sqrt{\xi_2^2 - 1} + \alpha = \pi n \end{cases}. \quad (34)$$

It is not necessary to solve this system because further we will only need α in the combinations that enter (34).

So, we obtained the wavefunctions and the wavenumber spectrum for an electron in an ellipsoid metal shell. As we can see, the expression we obtained for the radial wavefunction $R(\xi)$ tends to the known expression for a radial wavefunction of an electron in a spherical nanoshell [21] when our shell tends to spherical ($\xi \rightarrow \infty$). This validates the results we obtained.

4. THE MATRIX ELEMENTS OF THE OPTICAL TRANSITIONS. THE NANOSHELL OPTICAL CONDUCTIVITY IN THE FORM OF A SUM OVER ELECTRON STATES

Now, having the electron wavefunctions and the energy spectrum, we can calculate the matrix elements of the optical transitions that enter into (3). From the system symmetry the equality $\langle i|x_2|f\rangle = \langle i|x_1|f\rangle$ implies, so we have to calculate only $\langle i|x_3|f\rangle$ and, for instance, $\langle i|x_1|f\rangle$. For the matrix element $\langle i|x_1|f\rangle$ we have

$$\begin{aligned} \langle i|x_1|f\rangle \approx & \frac{2a}{\sqrt{\xi_2^2-1}-\sqrt{\xi_1^2-1}} \frac{\delta_{m,m'+1}+\delta_{m,m'-1}}{2} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \sin\left(ka\sqrt{\xi^2-1}+\alpha\right) \frac{\sin\left(k'a\sqrt{\xi'^2-1}+\alpha'\right)}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} \times \\ & \times \xi^2 \sqrt{\xi^2-1} \cdot d\xi \cdot \frac{2}{\pi} \int_{-\min(\eta_0, \eta_0')}^{\min(\eta_0, \eta_0')} \cos\left(\left(q+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{\eta}{\eta_0} \sqrt{1-\left(\frac{\eta}{\eta_0}\right)^2} + \arcsin\frac{\eta}{\eta_0} + \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right) \times \\ & \times \cos\left(\left(q'+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{\eta}{\eta_0'} \sqrt{1-\left(\frac{\eta}{\eta_0'}\right)^2} + \arcsin\frac{\eta}{\eta_0'} + \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right) \frac{d\eta}{\sqrt[4]{(\eta_0^2-\eta^2)((\eta_0')^2-\eta^2)}} \end{aligned} \quad (35)$$

here we used the expression (27) for an electron wavefunction, the relation $|\eta| < \eta_0 < 1$ (see the previous chapter) and the expression (A5) from the Appendix for a small volume element in the spheroidal coordinates. From here on non-primed quantities relate to the electron initial state, primed ones – to the final state.

Now we note that in this sum we can leave the addends with $q=q'$ only. Addends with $q \neq q'$ give the functions that quickly oscillate by η , so they will be negligibly small after the integration. Also, in typical cases the photon energy $\hbar\omega$ (for instance, 0,1 eV for a CO₂ laser) is much less than the Fermi energy of the shell metal E_F (3-5 eV for typical metals). So, we can introduce the quantity $\nu \equiv \frac{\hbar\omega}{E_F}$ and consider that it satisfies the

relation $\nu < 1$. Using the fact that an electron distribution function for the shell metal is close to the Heavyside function, we, after rather complex transformations, can rewrite (35) in the form

$$\langle i|x_1|f\rangle = \frac{\hbar^2}{m_e^2 \omega^2 a \left(\sqrt{\xi_2^2-1}-\sqrt{\xi_1^2-1}\right)} \left(1 - (-1)^{n+n'}\right) \delta_{m,m'} \delta_{l,l'} \cdot k k'. \quad (36)$$

The matrix element $\langle i|x_3|f\rangle$ requires more complex transformations. The starting expression

$$\begin{aligned}
 \langle i | x_3 | f \rangle = & \frac{2a}{\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}} \delta_{m,m'} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \xi^3 d\xi \frac{\sin(ka\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha) \sin(k'a\sqrt{\xi^2 - 1} + \alpha')}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} \times \\
 & \times \frac{2}{\pi} \int_{-\min(\eta_0, \eta_0')}^{\min(\eta_0, \eta_0')} \frac{\cos\left(\left(q + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{\eta}{\eta_0} \sqrt{1 - \left(\frac{\eta}{\eta_0}\right)^2} + \arcsin \frac{\eta}{\eta_0} + \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt[4]{(\eta_0^2 - \eta^2)((\eta_0')^2 - \eta'^2)}} \times \\
 & \times \cos\left(\left(q' + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{\eta}{\eta_0'} \sqrt{1 - \left(\frac{\eta}{\eta_0'}\right)^2} + \arcsin \frac{\eta}{\eta_0'} + \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \eta d\eta
 \end{aligned} \tag{37}$$

after applying the analogous considerations plus the method of a stationary phase (see, for example, [29]) for the integration by ξ and the numerical integration, can be transformed into the following:

$$\langle i | x_3 | f \rangle = \frac{2\hbar^2 \delta_{m,m'} \delta_{l,l'}}{m_e^2 \omega^2 a (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})} \left((-1)^{n+n'} \frac{\sqrt{\xi_2^2 - 1}}{\xi_2} - \frac{\sqrt{\xi_1^2 - 1}}{\xi_1} \right) k k' \cdot \frac{2}{\pi} \eta_0. \tag{38}$$

To verify the results we obtained, let's compare them with the analogous expressions for a spherical shell. For the latter, the radial wavefunction in the spheroidal coordinates is written

$$R(r) \approx \left(\frac{2}{r_2 - r_1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2} + \alpha\right), \tag{39}$$

where $r_{1,2}$ are the internal and external shell radii, correspondingly. Then, after corresponding transformations the radial part of the matrix element (all three of them are equal because of the system symmetry) can be written

$$\langle i | x | f \rangle_r = \frac{1}{r_2 - r_1} \left((-1)^{n+n'} - 1 \right) \left(\frac{1}{k_+^2} - \frac{1}{k_-^2} \right), \tag{40}$$

where $k_{\pm} = k \pm k'$. For an ellipsoid nanoshell, an intermediate expression for the radial part of the matrix element, for example, by x_l can be written

$$\langle i | x_l | f \rangle_{\xi} = \frac{a}{\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}} \left((-1)^{n+n'} - 1 \right) \left(\frac{1}{c_+^2} - \frac{1}{c_-^2} \right), \tag{41}$$

where $c_{\pm} = (k' \pm k)a$. This expression, really, tends to (39) if an ellipsoid shell is deformed into a spherical; similarly for the matrix element by x_3 . So, such passage to the limit substantiates the results we obtained.

5. CALCULATIONS OF THE OPTICAL CONDUCTIVITY

Using matrix elements of the optical transitions we obtained in the previous chapter, we can obtain the optical conductivity of an ellipsoid metal shell. After substituting these matrix elements into (3) and certain simplifications we can write down

$$\sigma_{\perp} = \frac{\pi e^2 \omega}{V_s} \frac{2\hbar^4}{m_e^4 \omega^4 a^2 (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2} \sum_{i,f} (1 - (-1)^{n+n'}) k^2 (k')^2 f_e(E_i) (1 - f_e(E_f)) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\parallel} = & \frac{\pi e^2 \omega}{V_s} \frac{32\hbar^4}{\pi^2 m_e^4 \omega^4 a^2 (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2} \sum_{i,f} \frac{2l - 2m + 1}{ka} k^2 (k')^2 f_e(E_i) (1 - f_e(E_f)) \times \\ & \times \left(1 - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2\xi_1^2 \xi_2^2} - (-1)^{n+n'} \frac{\sqrt{(\xi_1^2 - 1)(\xi_2^2 - 1)}}{\xi_1 \xi_2} \right) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (43)$$

First, we shall perform the summation over l , m , l' and m' . For the orthogonal conductivity component the summation can be easily performed, we obtain

$$\sigma_{\perp} = \frac{\pi e^2 \omega}{V_s} \frac{8\hbar^4}{\pi^2 m_e^4 \omega^4} \sum_{n,n'} (1 - (-1)^{n+n'}) k^4 (k')^2 f_e(E_n) (1 - f_e(E_{n'})) \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega) \quad (44)$$

The sum that enters into (43) requires more complex transformations. After using the fact that the discrete function $(1 - (-1)^{n+n'})$ can be replaced with its average equal to 1 (in analogous way to the calculation accomplished in [30]), we can write down

$$\begin{aligned} \sigma_{\parallel} = & \frac{\pi e^2 \omega}{V_s} \frac{32\hbar^4}{\pi^4 m_e^4 \omega^4} \left(1 - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2\xi_1^2 \xi_2^2} \right) \frac{32}{3} \frac{\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}}{\pi} \times \\ & \times \sum_{n,n'} (1 - (-1)^{n+n'}) k^4 (k')^2 f_e(E_n) (1 - f_e(E_{n'})) \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (45)$$

The optical conductivity can be easily calculated if we neglect the discreteness of an electron energy levels and replace the sum that enters into (44) and (45) with the corresponding integral. This corresponds to the classical approximation – quantum effects related to the electron spectrum discreteness are not considered. We shall consider them later by calculating the correction to this classical expression.

So, after performing integration in analogous way to [25], we obtain the following classical expressions:

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}^0 = & \frac{32e^2}{\pi^3 \hbar V_s} a^2 (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2 \frac{g(\nu)}{\nu^3} \\ \sigma_{\parallel}^0 = & \frac{32e^2}{\pi^3 \hbar V_s} a^2 (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2 \frac{g(\nu)}{\nu^3} \frac{64}{3\pi^2} \left(1 - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2\xi_1^2 \xi_2^2} \right) (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}) \end{aligned} \quad (46)$$

where

$$g(\nu) = \int_{1-\nu}^1 p^{3/2} \sqrt{p+\nu} dq = \left(\frac{(p(p+\nu))^{3/2}}{3} - \frac{\nu(2p+\nu)\sqrt{p(p+\nu)}}{8} + \frac{\nu^3}{8} \ln(\sqrt{p} + \sqrt{p+\nu}) \right) \Big|_{1-\nu}^1. \quad (47)$$

After applying expressions for the shell volume (46) can be rewritten

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}^0 &= \frac{24e^2}{\pi^4 \hbar a} \frac{\left(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1} \right)^2}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2^2 + \xi_2 \xi_1 + \xi_1^2 - 1)} \frac{g(\nu)}{\nu^3} \\ \sigma_{\parallel}^0 &= \frac{24e^2}{\pi^4 \hbar a} \frac{\left(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1} \right)^2}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2^2 + \xi_2 \xi_1 + \xi_1^2 - 1)} \frac{g(\nu)}{\nu^3} \frac{64}{3\pi^2} \left(1 - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2\xi_1^2 \xi_2^2} \right) \left(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1} \right) \end{aligned} \quad (48)$$

The expressions obtained so far are classical (denoted by the index 0 in $\sigma_{\perp}^0$, $\sigma_{\parallel}^0$) – the quantum effects related with the electron energy quantization in the shell are not considered. As we mentioned before, such effects can become noticeable even in the case of small solid metal particles. And for thin metal shells these effects are much more essential.

Using of the Poisson formula allows us to obtain analytical expressions for the optical conductivity that take into consideration these quantum effects. The Poisson formula applies to an arbitrary function of a natural argument $y_I(n)$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} y_I(n) = \int_0^{\infty} dn \left(y_I(n) + 2 \sum_{s=1}^{\infty} y_I(n) \cos(2\pi sn) \right). \quad (49)$$

Before applying (49) to (44) and (45) we should note that δ -function of a discrete argument doesn't have mathematical sense. To give it necessary physical sense, we should use the fact that δ -function is a limit of a flock of classical functions. During a passage to the limit area under the graph of such classical function remains equal to 1 while the width of the peak (of graph figure, in general) tends to zero and height to infinity.

It is convenient for us in such situation to use the concept of the 'spread' δ -function:

$$\delta^*(x) = \begin{cases} 0, & x < -\frac{\Delta E}{2} \\ \frac{1}{\Delta E}, & -\frac{\Delta E}{2} < x < \frac{\Delta E}{2} \\ 0, & x > \frac{\Delta E}{2} \end{cases} \quad (50)$$

when the case $\Delta E \rightarrow 0$ corresponds to the 'classical' δ -function.

Then, we notice that we can replace $E_n \rightarrow E_n + \hbar\omega$ in (44) and (45). The possibility of such replacement implies from the look of the δ -function that expresses the energy conservation law in (44) and (45). After using such replacement, we can introduce the concept of the energy states density – the following function:

$$G(E) = \sum_{n'=1}^{\infty} (1 - (-1)^{n-n'}) \delta(E_{n'} - E_n). \quad (51)$$

So, the expressions (44) and (45) contain $G(E + \hbar\omega)$. After introducing the δ -function in the above-described way, the energy states density

$$G^*(E) = \sum_{n'=1}^{\infty} (1 - (-1)^{n-n'}) \delta^*(E_{n'} - E_n) \quad (52)$$

becomes a classical function and the Poisson formula can be applied to it. (During the process we replace the discrete function $(1 - (-1)^{n-n'})$ with its average equal to 1 in analogous way to the calculation accomplished in [30].) Using the electron energy spectrum (33), we obtain

$$G^*(E_{\perp}) = \frac{a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})\sqrt{2m_e}}{\pi\hbar\sqrt{E}} \times \left(1 + 2 \sum_{s'=1}^{\infty} \cos\left(\frac{2a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})}{\hbar} s' \sqrt{2m_e E} \right) \frac{\sin(s' X)}{s' X} \right) \quad (53)$$

where

$$X = a \frac{\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_e}{E}} \Delta E. \quad (54)$$

As it is easily seen, the first addend in (53) gives the known expression for the one-dimensional energy states density. The addends of the series in (53) consider the oscillations of the states density caused by a spectrum quantization. After taking the limit $\Delta E \rightarrow 0$ we obtain relevant result for the function $G(E)$.

Now we can apply this summation method to (44) and (45). We apply it twice (summation over n and n'). Note that in this double sum we only keep the addends with $s=s'$; other addends are quickly oscillating and can be considered negligibly small after the integration. Taking into consideration the proximity of the electron energy to the Fermi energy and using the inequality $E_F \gg \theta$ (here E_F is the Fermi energy of the shell metal and the quantity θ is the temperature in energy units), we obtain after complex transformations

$$\sigma_{\perp}(\omega) = \sigma_{\perp}^0(\omega) \left(1 + \frac{2\pi\theta \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} \right)^{-1} (\Phi(E_F) - \Phi(E_F - \hbar\omega))}{(\hbar\omega)^3 g(\nu)} \right) = \frac{24e^2}{\pi^4 \hbar a} g(\nu) \times$$

$$\times \frac{(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2^2 + \xi_2\xi_1 + \xi_1^2 - 1)} \left(1 + \frac{2\pi\theta \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} \right)^{-1} (\Phi(E_F) - \Phi(E_F - \hbar\omega))}{(\hbar\omega)^3 g(\nu)} \right) , (55)$$

$$\sigma_{\parallel}(\omega) = \sigma_{\parallel}^0(\omega) \left(1 + \frac{2\pi\theta \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} \right)^{-1} (\Phi(E_F) - \Phi(E_F - \hbar\omega))}{(\hbar\omega)^3 g(\nu)} \right) = \frac{24e^2}{\pi^5 \hbar a} \times$$

$$\times \frac{(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2^2 + \xi_2\xi_1 + \xi_1^2 - 1)} g(\nu) \cdot \frac{64}{3\pi^2} \left(1 - \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2\xi_1^2\xi_2^2} \right) (\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}) \times , (56)$$

$$\times \left(1 + \frac{2\pi\theta \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} \right)^{-1} (\Phi(E_F) - \Phi(E_F - \hbar\omega))}{(\hbar\omega)^3 g(\nu)} \right)$$

here the function

$$\Phi(E_F) = E_F^{\frac{3}{2}} (E_F + \hbar\omega)^{\frac{1}{2}} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin \tilde{\varphi}_s(E_F)}{sh(\pi\theta\tilde{\varphi}_s'(E_F))} , (57)$$

and $\tilde{\varphi}_s$ is the following function of energy:

$$\tilde{\varphi}_s(E) \equiv_s \frac{2a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1})}{\hbar} \sqrt{2m_e} (\sqrt{E + \hbar\omega} - \sqrt{E}) . (58)$$

Numerical calculations show that the first five terms in the sum over s secure a sufficient accuracy for the quantum correction for typical shells and light frequencies.

As we can see, expressions for both conductivity components consist of two parts – classical conductivity, given by (48), and quantum corrections that consider quantum effects related with electronic spectrum quantization. Also, from the look of the expressions for electronic spectrum (32), (33) we can see that electronic spectrum for our shell becomes quasi-one-dimensional, similar to that of a one-dimensional potential well for electron. Really, if a shell is thin enough, a system becomes quasi-one-dimensional, so dependence of the optical conductivity components from ν should not depend from the shell shape. A shape of the shell is considered by a factor before this dependence. (See, for example, the expressions for a spherical shell [21].)

Graphical representation of the relative quantum correction $\frac{\Delta\sigma_{\perp}}{\sigma_{\perp}^0} = \frac{\Delta\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\parallel}^0} \equiv \kappa$ as a function of the ratio ν for an ellipsoid nanoshell with parameters $E_F=5.53$ eV (the Fermi energy of Au), temperature $\Theta=300$ K, longitudinal shell thickness $a(\sqrt{\xi_2^2-1}-\sqrt{\xi_1^2-1})=100$ nm (for a thick shell oscillations behaviour becomes clear) is given on Fig. 1.

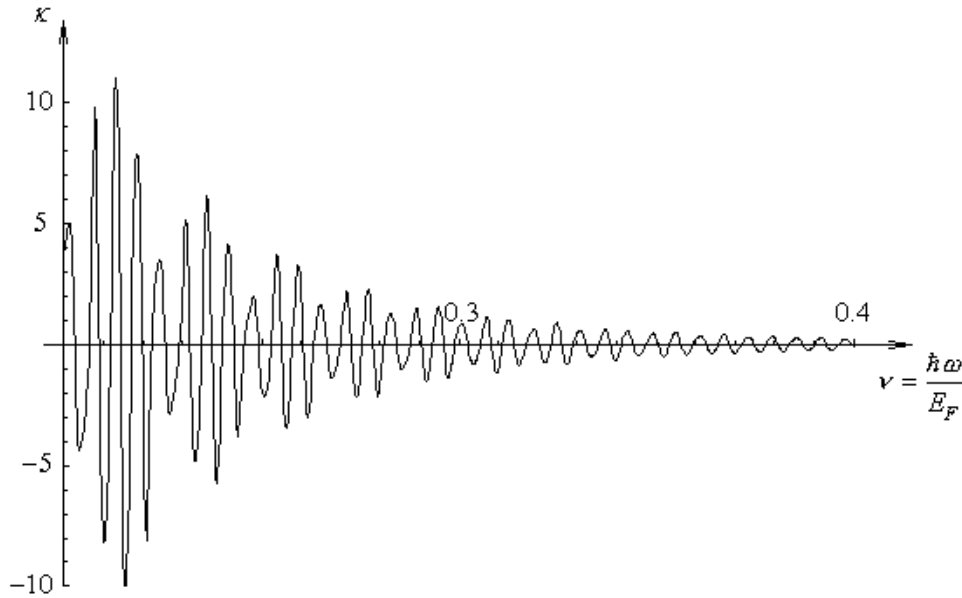


Fig. 1. Relative oscillatory quantum correction κ for an ellipsoid shell with $E_F=5.53$ eV (the Fermi energy of Au), temperature $\Theta=300$ K, longitudinal shell thickness 100 nm as a function of the ratio ν of the photon energy to the Fermi energy of the shell metal.

We can see from the graph (and the numerical evaluation shows it, too) that these quantum corrections are essential and cannot be neglected, as in was predicted in introduction. For a thinner shell the contribution of these corrections is even more

essential. For example, for $a(\sqrt{\xi_2^2 - 1} - \sqrt{\xi_1^2 - 1}) = 10$ nm (typical shell thickness) amplitude of the oscillations of the relation κ exceeds 200 in the vicinity of the point $\nu = 0.2$.

So, the graph shows that considering of an electron energy quantization leads to the appearance of an oscillating dependence of the optical conductivity components from the incident light frequency. Analysis shows that the oscillations frequency depends from the shell thickness. As we mentioned in introduction, such type of dependence was noticeable even for relatively thick nanowires [14]. So, when investigating one-electron light absorption by nanoshells for the energies much less than the Fermi energy of the shell metal one should consider the effects caused by the electron energy spectrum quantization.

Note that unlike the case of a spherical shell [21], optical conductivity of an ellipsoid shell is essentially a tensor quantity with two (for the considered case of a rotation ellipsoid) unequal, in general, components.

Note also that when $\hbar$ formally tends to 0 (the classical case), the optical conductivity oscillations frequency (determined from (55) or (56)) tends to the frequency of classical oscillations. These are the oscillations with an electron passage frequency from one shell wall to other [31]. This fact also validates the results we obtained.

RESULTS AND REMARKS

Thus, we obtained the quasi-classical wavefunctions and calculated the wave number spectrum and the energy spectrum for an electron in a nanoshell with the shape of a stretched rotation ellipsoid. The metal shell was considered as a thin shell. We showed that in this case the system is quasi-one-dimensional (similar to the one-dimensional potential well for electron). As a result, the distance between the energy levels increases, and the quantum effects related to the discreteness of the electron energy spectrum become essential.

Then, we found the matrix elements of the corresponding optical transitions and used them to represent the optical conductivity as the sum over electron states. This sum was used to derive the analytical expression for the optical conductivity of the considered shells.

Firstly, we found the analytical expressions for the classical (with electron spectrum quantization ignored) conductivity (the electric absorption) of these particles. From this classical expression we can already see that for an ellipsoid nanoshell the optical conductivity becomes an essentially tensor quantity (it cannot be reduced to one scalar).

Secondly, we considered the quantization effect and found the correction to these classical expressions. It was shown that this quantum correction makes an essential contribution into the total shell absorption. It was also shown that this correction depends on the incident light frequency in an oscillatory way. So, this oscillating effect should be taken into consideration when investigating light absorption of thin nanoshells for the energies much less than the Fermi energy of the shell metal as this quantum addend exceeds classical addend considerably. A dependence of the analogous nature was observed in the experiments with solid metal nanowires [14] and in the quantum theories

of thin metal films (see, e.g., [15]). Such an oscillatory dependence can be explained as follows. The light absorption is stronger when the energy $\hbar\omega$ is close to the difference between one of the electron energy levels and the Fermi energy. A smooth oscillating curve is observed instead of discrete peaks due to the thermal smearing of the electron distribution function by energy.

Note that a tensor nature of the optical conductivity and, consequently, the dependence of the conductivity from an incident light polarization (implies from the fact that the field that enters into our expressions is a local field) are essentially new properties of an ellipsoid nanoshell comparing to a spherical shell. Note also that both expressions obtained for the optical conductivity components consist of two factors – a factor that depends from the light frequency and a factor that considers the particle shape. Therefore, for a thin shell the problem becomes quasi-one-dimensional (an electron in a one-dimensional potential well) so the dependence of the shell absorption from the light frequency is not influenced by the particle shape. We can guess that an analogous effect should take place for a thin enough nanoshell of an arbitrary smooth shape.

APPENDIX. SHPEROIDAL COORDINATES

The spheroidal coordinates (ξ, η, φ) are linked to the rectangular coordinates through the following relations:

$$\begin{cases} x = a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\cos\varphi \\ y = a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\sin\varphi, \\ z = a\xi\eta \end{cases} \quad (\text{A1})$$

here

$$\xi \in [1, +\infty), \quad \eta \in [-1, 1], \quad \varphi \in [0, 2\pi), \quad (\text{A2})$$

a is a constant parameter.

The coordinate φ is equivalent to the polar angle in the spherical coordinates; the equation $\xi=\text{const}$ describes a rotation ellipsoid with semiaxes $R_{\parallel} = a\xi$, $R_{\perp} = a\sqrt{\xi^2 - 1}$ (where $R_{\parallel}$ is a semiaxis directed along a rotation axis of the ellipsoid), so the parameter a satisfies the relation

$$a^2 = R_{\parallel}^2 - R_{\perp}^2. \quad (\text{A3})$$

It is easily seen that

$$z^2 = a^2\eta^2 + (x^2 + y^2)\frac{\eta^2}{1 - \eta^2}, \quad (\text{A4})$$

so the equation $\eta=\text{const}$ describes a hyperboloid. We choose the upper hyperbola when $\eta>0$ and the lower hyperbola when $\eta<0$. Also, a differential of a volume for the spheroidal coordinates

$$dV = a^3(\xi^2 - \eta^2)d\xi d\eta d\varphi \quad (\text{A5})$$

will be used in our calculations, too.

References

1. Averitt R.D. Ultrafast electron dynamics in gold nanoshells / Averitt R.D., Westcott S.I., Halas N.J. // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58. – p.203-206.
2. Averitt R.D. Ultrafast optical properties of gold nanoshells / Averitt R.D., Westcott S.I., Halas N.J. // *J. Opt. Soc. Am.* – 1999 – Vol. 16, № 10. – p.1814-1823.
3. Averitt R.D. Linear optical properties of gold nanoshells / Averitt R.D., Westcott S.I., Halas N.J. // *J. Opt. Soc. Am.* – 1999 – Vol. 16, № 10. – p.1824-1831.
4. Metal nanotubes / [Hirsch L.R., Gobin A.M., Lowery A.R. et al.] // *Ann. Biomed. Eng.* – 2006. – Vol.34, №1. – p. 15-22.
5. Plasmonic interactions between a metallic nanoshell and a thin metallic film / [Le F., Lwin N.Z., Halas N.J., Nordlander P.] // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76. – 165410.
6. Nordlander P. Optical properties of metallic nanoshells / Nordlander P., Prodan E. // *Proceedings of SPIE.* – 2002. – Vol. 4810. – p. 91-98.
7. Prodan E. Effects of dielectric screening on the optical properties of metallic nanoshells / Prodan E., Nordlander P., Halas N.J. // *Chem. Phys. Lett.* – 2003. – Vol. 368. – p. 94-101.
8. Chang R., Leung P.T., Nonlocal effects on optical and molecular interactions with metallic nanoshells / Chang R., Leung P.T. // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73. – 125438.
9. Prodan E. Exchange and correlation effects in small metallic nanoshells / Prodan E., Nordlander P. // *Chem. Phys. Lett.* – 2001. – Vol. 349. – p. 153-160.
10. Prodan E. Electronic structure and polarizability of metallic nanoshells / Prodan E., Nordlander P. // *Chem. Phys. Lett.* – 2002. – Vol. 352. – p. 140-146.
11. Zhu J. Theoretical study of the light scattering from gold nanotubes: Effects of wall thickness / Zhu J. // *Materials Science and Eng. A.* – 2007. – Vol. 454-455. – p. 685-689.
12. Synthesis and plasmonic properties of silver and gold nanoshells on polystyrene cores of different size and of gold-silver core-shell nanostructures / [Yong K.-T., Sahoo Y., Swihart M.T., Prasad P.N.] // *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* – 2006 – Vol.290 – p. 89-105.
13. Averitt R.D. Plasmon Resonance Shifts of Au-Coated Au₂S Nanoshells: Insight into Multicomponent Nanoparticle Growth / Averitt R.D., Sarkar D., Halas N.J. // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol. 78, № 22. – p.4217-4220.
14. Infrared spectroscopy of Pb layer growth on Si(111) / [Pucci A., Kost F., Fahsold G., Jalochofski M.] // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 74. – 125428.
15. Kurbatskiy V.P. Optical conductivity and absorption of thin metal films in the infrared spectrum / Kurbatskiy V.P., Korotun A.V., Pogosov V.V. // *Ukr. J. Phys.* – 2008. – Vol. 53. – p. 569-573.
16. Garcia N. Quantum-level phenomena in nanowires / Garcia N., Costa-Kramer I.L. // *Europhysics News.* – 1996. – Vol. 27. – p. 89-91.
17. Zavitaev E.V. About the interaction of an electromagnetic radiation with a cylindrical particle of a finite length / Zavitaev E.V., Yushkanov A.A., Yalamov Yu.I. // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 2003. – Vol. 124. – p. 1112-1120 (in Russian).
18. Zavitaev E.V. Absorption of an electromagnetic radiation by a non-uniform spherical particle / Zavitaev E.V., Yushkanov A.A. // *Opt. i Spektrosk.* – 2004. – Vol. 97 – p. 131-138 (in Russian).
19. Zavitaev E.V. Absorption of an electromagnetic radiation by a non-uniform cylindrical particle / Zavitaev E.V., Yushkanov A.A. // *Pisma Zh. Teor. Fiz.* – 2004. – Vol. 30. – p. 74-81 (in Russian).
20. Tomchuk P.M. Optical absorption of small metal particles / Tomchuk P.M., Tomchuk B.P. // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 1997. – Vol. 112. – p. 661-678 (in Russian).
21. Kulish V.V, Tomchuk P.M. Optical properties of metal nanotubes and metal nanoshells / Kulish V.V., Tomchuk P.M. // *Surface Science.* – 2008. – Vol. 602. – p. 1045–1052.
22. Aden A.L. Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres / Aden A.L., Kerker M. // *J. Appl. Phys.* – 1951. – Vol. 22 – p. 1242-1246.
23. Neeves A.E. Composite structures for the enhancement of nonlinear-optical susceptibility / Neeves A.E., Birnboim M.H. // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 1989. – Vol. 6. – p. 787-796.
24. Enhanced optical properties of metal-coated nanoparticles / [Haus J.W., Zhou H.S., Takami S. et al.] // *J. Appl. Phys.* – 1993. – Vol. 73. – p. 1043-1048.

25. Ruppini R. Size and shape effects on the broadening of the plasma resonance absorption in metals / Ruppini R., Yatom H. // Phys. Status Solidi B. – 1976. – p. 647-654.
26. Kawabata A. Electronic Properties of Fine Metallic Particles. II. Plasma Resonance Absorption / Kawabata A., Kubo R. // J. Phys. Soc. Jpn. – 1966. – Vol. 21. – p. 1765-1772.
27. Landau L.D. Theoretical physics. Vol. 8. Electrodynamics of the continuous media/ Landau L.D., Lifshits E.M. – Moscow: Nauka, 1976. – 621 p. (in Russian).
28. Komarov I.V. Spheroidal and Coulomb spheroidal functions / Komarov I.V., Ponomarev I.V., Slavyanov S.Yu. – Moscow: Nauka, 1976. – 320 p. (in Russian).
29. Erdeyi A. Asymptotic expansions / Erdeyi A. – Moscow: Gos. izd-vo fiz.-mat. lit., 1962. – 268 p. (in Russian).
30. Wood D.M. Quantum size effects in the optical properties of small metal particles / Wood D.M., Ashcroft N.W. // Phys. Status Solidi B. – 1982. – Vol. 25. – p. 6255-6274.
31. Tomchuk P.M. Shape and size effects on the energy absorption by small metallic particles / Tomchuk P.M., Grigorchuk N.I. // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73. – 155423.

The author expresses his gratitude to the Dr. of Physics and Mathematics, corresponding member of the APSU Gorobets Yu.I. for discussions of the article.

Кулиш В.В. Одноэлектронные оптические свойства эллипсоидальных металлических наноболочек / Кулиш В.В., Томчук П.М. // Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского. Серия: Физико-математические науки. – 2010 – Т.23(62), №3. – С. 75-93.

Мы исследуем оптические свойства наноболочек (малых композитных кластеров, состоящих из диэлектрического ядра и металлической оболочки; вклад металлической оболочки является доминирующим в оптических свойствах всего кластера) в области частот, далекой от плазмонного резонанса. Мы исследуем наноболочки в форме вытянутого эллипсоида вращения. Для таких оболочечных частиц были найдены волновая функция электрона, спектр энергий и волновых чисел электрона, а также матричные элементы соответствующих оптических переходов. С использованием этих величин были найдены классическая оптическая проводимость (без учета квантовых эффектов) таких оболочек и квантовая оптическая проводимость (добавки к классической проводимости, квантовыми эффектами, такими как дискретность электронного спектра). Установлен осциллирующий вид зависимости этих слагаемых от частоты света, падающего на оболочку.

Ключевые слова: наноболочки, оптическая проводимость, малые кластеры, квантование спектра.

Куліш В.В. Одноелектронні оптичні властивості еліпсоїдальних металевих наноболонки / Куліш В.В., Томчук П.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010 – Т.23(62), №3. – С. 75-93.

Ми досліджуємо оптичні властивості наноболонки (малих композитних кластерів, що складаються з діелектричного ядра та металевої оболонки; внесок металевої оболонки є домінуючим у оптичних властивостях всього кластера) у області частот, далекій від плазмонного резонансу. Ми досліджуємо наноболонки у формі витягнутого еліпсоїду обертання. Для таких оболонкових часток були знайдені хвильова функція електрона, спектр енергій і хвильових чисел електрона, а також матричні елементи відповідних оптичних переходів. З використанням цих величин були знайдені класична оптична провідність (без урахування квантових ефектів) таких оболонки та квантова оптична провідність (добавки до класичної провідності, квантовими ефектами, такими як дискретність електронного спектру). Встановлено осцилюючий вигляд залежності цих доданків від частоти світла, що падає на оболонку.

Ключові слова: наноболонки, оптична провідність, малі кластери, квантування спектру.

Поступила в редакцию 02.11.2010 г.

УДК 539.22

ИДЕАЛЬНАЯ ТУРБУЛЕНТНОСТЬ В НЕЛИНЕЙНОЙ "КВАНТОВОЙ" ФИЗИКЕ ПОЛИМЕРОВ

Краснюк И.Б., Мельник Т.Н., Юрченко В.М.

*Физико-технический институт им. А.А. Галкина НАНУ, Донецк, Украина
E-mail: krasnjukigr@rambler.ru*

Рассматриваются краевые задачи для линейных систем уравнений Шредингера с нелинейными граничными условиями для волновых функций. При этом нелинейность в граничных условиях порождает возникновения поверхностных пространственно-временных структур, которые в дальнейшем проникают в ограниченную область, не изменяя формы. Эти структуры асимптотически неустойчивы под действием возмущений, но их "времена жизни" сравнимы с временем проведения эксперимента. В нелинейной оптике для идеальных оптических резонаторов такие (объемные) структуры известны и называются темными и светлыми солитонами. В нелинейной физике полимеров известны осциллирующие асимптотически стационарные структуры, которые называются ламеллярными структурами. Оказывается, что в полимерных цепях могут существовать пространственно-временные распределения ламеллярного типа, которые индуцируются поверхностными процессами кристаллизации или плавления полимерных цепей. Существенную роль при этом могут играть поверхностные нуклеирующие добавки.

Ключевые слова: полимерные цепи, нелинейная оптика.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время не вызывает удивления возникновение хаоса и различного рода фрактальных объектов в тех или иных областях естествознания. В частности, такие объекты возникают в теории эволюционных задач, задаваемых как обычными дифференциальными уравнениями (ОДУ), так и уравнениями в частных производных (УЧП). Однако, как отмечает А.Н. Шарковский (см., например, [1]), в случае УЧП, в силу бесконечномерности задачи, можно (и необходимо!) говорить не только о сложной динамике переходов между мгновенными состояниями системы (как в случае ОДУ), но и о сложной "внутренней архитектуре" самих состояний в каждый момент времени. В самом деле, именно усложнение "внутреннего" строения состояний динамической системы (ДС) в каждый момент времени приводит к пространственно-временной (а не к пространственной, как это общепринято) хаотизации системы, которую авторы [1] называют турбулентностью в широком смысле.

Эволюционные краевые задачи для УЧП порождают на пространстве начальных состояний бесконечномерные ДС сдвигов вдоль решений. Для уравнений параболического типа аттракторы соответствующих ДС являются конечномерными подмножествами фазового пространства (такая ситуация имеет место для уравнения Навье-Стокса [2]). Иная ситуация имеет место в случае краевых задач для уравнений гиперболического типа. Такие задачи порождают фазовые пространства, которые являются некомпактными, что приводит к тому, что

соответствующие ДС не имеют аттрактора в фазовом пространстве. Тем не менее, и для некомпактных фазовых пространств мы можем говорить о существовании "идеальных" аттракторов с простой динамикой: когда аттрактор состоит из неподвижных точек и циклов, но с очень сложной внутренней структурой самих "точек", из которых состоит аттрактор, так как эти точки являются элементами определенных функциональных пространств [2].

Если краевая задача порождает бесконечномерную ДС сдвигов, то теория одномерных отображений позволяет понять, почему и как в краевых задачах возникает и развивается турбулентность, и предложить сценарии возникновения самоорганизации и автостохастичности. Эти сценарии описаны в ряде математических работ А.Н. Шарковского (1983-2010). С точки зрения приложений к модельным краевым задачам физики твердого тела они реализованы теоретически в ряде работ [3]-[5]. Например, в [6] реализован сценарий возникновения жидко-кристаллических распределений и их последовательной хаотизации через бифуркации удвоения периода в ориентированных блок-сополимерных цепях. В [7] описан аналогичный сценарий возникновения жидко-кристаллических кластеров в окрестности неупорядоченной фазы для бинарных сплавов. В [3] предложен сценарий возникновения оптической турбулентности в задачах взаимодействия излучения с веществом (на примере Na - лазера).

Мы применяем указанные выше идеи и методы к реализации программы возникновения идеальной турбулентности в системах квантовых осцилляторов с нелинейными динамическими связями на границе оптической среды [4]. Теоретические результаты данной работы подтверждаются экспериментальными наблюдениями явлений самопереключения однонаправленных распределенно-связанных волн (ОРСВ). Теоретические основы явления ОРСВ с линейным коэффициентом связи изложены в [8]. Обзор явления самопереключения импульсов и теории самопереключения ОРСВ с нелинейным коэффициентом связи можно найти в [9].

Мы покажем как нелинейная перекачка света может реализоваться на границе оптической среды: в результате такого поверхностного обмена энергией возникают поверхностно-индуцированные темные и светлые солитоны [10] в объеме оптической среды. Динамические граничные условия (см. постановку задачи), моделирующие "самопереключение" света на границе резонатора, могут быть реализованы в технических устройствах с помощью дискретного оптического транзистора [9]. Мы ограничимся исследованием переключения излучения в квадратично-нелинейных оптических системах, которое математически моделируется с помощью логистического отображения (см. пример 1).

1. ПРОБЛЕМА ВЫБОРА МОДЕЛИ

Наноструктуры – это структуры, занимающие промежуточное положение между молекулами и микроскопическими объектами, то есть объектами порядка 1 мкм. В последнее время усилился интерес к построению моделей среды на наноуровне, которые называют мезоскопическими моделями сплошной среды. Это объясняется тем, что при описании наноструктур возникает проблема создания

адекватной, как математической, так и физической модели исследуемого объекта. При этом часто математическая модель не описывается дифференциальными уравнениями в частных производных [11]. Примером такой модели являются дифференциально-разностные уравнения (ДРУ) нейтрального типа [12]. К ДРУ сводятся нелинейные краевые задачи для уравнения Кана-Хиллиарда с "вязкостью" [13]. Это уравнение моделирует распределения жидко-кристаллических или аморфно-кристаллических "одномерных" кластеров в ограниченных несимметричных полимерных пленках [13]. При этом исходная краевая задача допускает редукцию к ДРУ с запаздывающим аргументом, которое, в свою очередь, при дополнительных требованиях вполне интегрируемости граничных условий [13], допускает редукцию к системе РУ с непрерывным временем.

Решения РУ на больших временах обладают свойством самоподобия (в частности, фрактальности). Свойство самоподобия возникает на промежуточном уровне между микро- и макроуровнями (то есть, на мезоуровне). Оказывается, что материалы, мезоскопическая структура которых обладает свойством масштабной инвариантности (скейлинга), имеют уникальные физические свойства, которые суть результат их внутренней самоподобной "архитектуры". Для подобного материала нельзя определить такое основное понятие, как плотность и, следовательно, для него нет адекватной математической модели [11]. Мы определим множество физических параметров, возникающих при кристаллизации и плавлении бинарных сплавов или полимерных смесей, изменение которых приводит к последовательности бифуркаций удвоения периода предельных решений (принадлежащих аттрактору краевой задачи), которые приводят, соответственно, к возникновению последовательности самоподобных структур релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа [13]. Существуют узкие области, занимающие значения параметров, при которых возникают фрактальные структуры с дробной размерностью Хаусдорфа. Примеры возникновения таких скейлинговых структур, возникающих при кристаллизации бинарных сплавов в аморфно-кристаллических пленках, можно найти в [7]. При этом мы используем классические модели физики полимеров.

2. КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ

В то же время, как показал Де Жэн [6], при моделировании идеальных полимерных цепей во внешнем потенциале можно использовать уравнение Шредингера: при этом одна конформация цепи соответствует одной выделенной траектории частицы, а волновая функция последней представляется когерентной суперпозицией амплитуд различных траекторий [6, 14, 4].

Пусть для определенности полимерная цепь вложена в решетку Флори-Хаггинса с параметром a . Тогда она описывается как некоторая траектория из N шагов, соединяющая точки $x_0, \dots, x_N$. Если на каждый мономер действует некоторый потенциал $U(x)$, то с этой конкретной реализацией ассоциируется статистический вес [6]

$$\exp\left(-\frac{1}{T}(U(x_0)+\dots+U(x_N))\right) \quad (1)$$

где T – температура. Рассмотрим сумму всех весов по траекториям с концами $x_0 = x'$ и $x_N = x$, где x' и x фиксированы. Назовем эту сумму величиной

$$2qz^N G_N(x', x) \quad (2)$$

где z – число соседей одного узла решетки. Множитель z^N представляет собой не что иное, как полное число траекторий из N – шагов. Функция $G_N(x', x)$ вещественна, положительна и симметрична: $G_N(x', x) = G_N(x, x')$. При $N = 0$ функция G_N сводится к дельта-функции $G_0(x', x) = \delta_{x'x}$. При рассмотрении дискретной решетки необходимо использовать дискретную дельта-функцию, которая в непрерывном пределе переходит в $\delta(x' - x)a^3$ (см. [6], с.277).

Легко получить уравнение для G_N , добавляя к цепи одно звено,

$$G_{N+1}(x', x) = \frac{1}{z} \sum_{x''} G_N(x', x'') \exp\left(-\frac{U(x'')}{T}\right) \quad (3)$$

где $\sum$ означает суммирование по всем узлам, которые являются соседями узла x' . Если предположить, что величина $U(x)/T$, то это позволяет записать уравнение (3) для центрально симметричной решетки в виде

$$G_{N+1}(x', x) - G_N(x', x) \approx \frac{\partial G_N}{\partial N}(x', x) = -\frac{U(x)}{T} G_N(x', x) + \frac{a^2}{6} \frac{\partial^2 G_N(x', x)}{\partial x^2} \quad (4)$$

где x' можно рассматривать как параметр. Уравнение (4) удобно переписать в виде

$$-\frac{\partial G}{\partial N} = -\frac{a^2}{6} \frac{\partial^2 G_N}{\partial x^2} + \frac{U(x)}{T} G \quad (5)$$

Де Жен отмечает (см.[6], с.278), что уравнение (5), подобно уравнению Шредингера, где переменная N аналогична времени (не считая множителя i). Мы используем эту аналогию между статистикой идеальной цепи и задачами квантовой механики с целью показать формальное единство квантового описания (статистических) полимерных цепей и лазерных пучков в нелинейной оптике. При этом в оптике существуют асимптотические по малому параметру $\hbar \rightarrow 0$ решения, быстро убывающие вне некоторых точек, кривых и поверхностей. Тогда (во всяком случае, формально, аналогичные распределения должны существовать для ряда модельных задач физики полимеров.

Отметим, что для вычисления квазиклассической асимптотики в задачах механики узких лазерных пучков (в окрестности некоторой точки x конфигурационного пространства) необходимо учитывать все классические траектории, приходящие в данную точку (см. [14], с.15). Построение

асимптотических решений дифференциальных УЧП с малым параметром сводится к решению системы: уравнения Гамильтона-Якоби (уравнение характеристик) и уравнения переноса. Такую систему называют системой канонических уравнений или канонической системой.

В данной работе (помимо стандартных задач о существовании светлых и темных солитонов в задачах нелинейной оптики [14]) предлагается с помощью канонической системы моделировать также идеальные (и возможно, неидеальные) полимерные цепи. Концентрация таких цепей определяется по формуле

$$c(s) = N |\psi(s)|^2 \quad (6)$$

где N – число мономеров, $\psi(s)$ – волновая функция (Формула (6) имеет место потому, что в точке s сходятся две цепи, каждой из которых ставится в соответствие множитель ψ).

2.1. Постановка задачи

В качестве примера мы рассмотрим систему уравнений Шредингера, которая описывает взаимодействие двух идеальных цепей в объемном потенциале. Такая система описывает распределения концентрации для каждой из компонент А и В соответственно [13,7,15]. Математическая модель имеет вид [14, 4]

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} + V(x) \psi_k - \frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi_k = 0, \quad k = 1, 2, \quad (7)$$

$\hbar$ – малый параметр, с начальными условиями

$$\psi_k(x, 0) = e^{iS_0^{(k)}(x)/\hbar} \psi_0^{(k)}(x) \quad (8)$$

и граничными условиями

$$W_j(\psi_1^2, \psi_2^2) = C_j, \quad j = 0, 1, \quad (9)$$

W_j – заданные функции, C_j – постоянные. Асимптотическое решение задачи с точностью до $O(\hbar^2)$ будем искать в виде

$$\psi_k = \exp(iS_0^{(k)}(x)/\hbar) \psi_0^{(k)}(x, t) \quad (10)$$

Подставляя функцию (10) в уравнения (7), (8), получаем, что

$$\left[\frac{\partial S_k}{\partial t} + V(x) + \frac{1}{2} (\nabla S_k)^2 \right] \psi_k + (-i\hbar) \left[\frac{\partial S_k}{\partial x} \frac{\partial \psi_k}{\partial x} + \frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \frac{1}{2} \psi_k \Delta S \right] + \frac{(-i\hbar)^2}{2} \Delta \psi_k = 0 \quad (11)$$

Для того, чтобы функция ψ_k вида (10) удовлетворяла асимптотически уравнениям Шредингера с точностью до $O(\hbar^2)$, достаточно, чтобы функции $S_k(x, t)$ являлись решениями задачи Коши для уравнений Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S_k}{\partial t} + V(x) + \frac{1}{2}(\nabla S_k)^2 = 0, \quad S_k(x, 0) = S_0^{(k)}(x), \quad (12)$$

а $\psi_k(x, t)$ удовлетворяла задаче Коши для уравнений переноса [14]:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \frac{\partial \psi_k}{\partial x} \frac{\partial S_k}{\partial x} + \frac{1}{2} \psi_k \Delta S = 0, \quad \psi_k(x, 0) = \psi_0^k(x) \quad (13)$$

2.2. Определение фазы из уравнения Гамильтона-Якоби

Мы ограничимся исследованием случая $V(x) \equiv 0$, что приводит к уравнению Гамильтона-Якоби для "свободной частицы":

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = 0 \quad (14)$$

Решение уравнения (14) будем искать в виде $S(x, t) = \lambda_1 x + \lambda_2 t$, где λ_1, λ_2 - вещественные постоянные, удовлетворяющие (в силу уравнения (14)) требованию

$$\lambda_2 + \frac{1}{2} \lambda_1^2 = 0 \quad (15)$$

Соотношение $\lambda_1 = \alpha$ дает начальное условие для уравнения (14), которое можно записать в виде

$$S(x, 0) = S_0(x) = \alpha x \quad (16)$$

Уравнение (14) вместе с начальным условием (16) представляет собой задачу Коши для нелинейного уравнения Гамильтона-Якоби. Очевидно, что

$$S(x, t) = \alpha x - \frac{1}{2} \alpha^2 t \quad (17)$$

Выберем для искомой функции $\psi(x, t)$ начальное условие

$$\psi(x, 0) = \exp\left(\frac{i}{h}(\lambda_1 x + \lambda_2 t)\right) \phi_0(x) \quad (18)$$

где $\phi_0(x)$ - достаточно гладкая функция. Тогда

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{h}(\lambda_1 x + \lambda_2 t)\right) \phi(x, t) \quad (19)$$

где $i = \sqrt{-1}$, $h > 0$. В результате мы можем интерпретировать произведение $\psi \bar{\psi} = |\psi|^2$ как вероятность обнаружить данную случайную конфигурацию полимерной цепи с заданной плотностью. Разумеется, при асимптотическом распределении (при $t \rightarrow \infty$) одной из компонент бинарной смеси (это может быть система полимер-полимер, полимер-растворитель, растворитель-растворитель) конечное статистическое распределение зависит от плотности начальной конфигурации $\phi_0(x)$, то есть представляет собой условную вероятность

обнаружить конфигурацию в заданной точке пространства в некоторый момент времени.

Заметим, что структура начальных конфигураций очень важна, так как здесь имеется (часто наблюдаемая в гидродинамике [16]) чувствительная зависимость от начальных данных. Напомним, что системы, чувствительные к начальным условиям, ведут себя таким образом, что малые изменения начальных данных приводят к большим и непредсказуемым последствиям на больших временах. В этом смысле никакой регулярности на больших временах обнаружить не удастся. Как отмечают авторы [16], экспериментатор, исследующий поведение реальной системы, напрасно будет искать повторяющиеся траектории, поскольку (неизбежные) ошибки в начальных условиях (совместно с действующим на время эксперимента шумом) приведут к различным структурам при каждом повторении опыта.

2.3. Определение огибающей волнового пакета полимерных цепей

В результате при выборе линейной фазы уравнение переноса имеет вид:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \lambda_k^1 \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = 0, \quad k = 1, 2. \quad (20)$$

Из (20) вытекает уравнение

$$\frac{\partial \psi_k^2}{\partial t} + \lambda \frac{\partial \psi_k^2}{\partial x} = 0, \quad k = 1, 2. \quad (21)$$

Выберем $\lambda_1^{(1)} = \lambda > 0$, $\lambda_1^{(2)} = \lambda < 0$. Тогда систему (21) можно записать в виде двух гиперболических уравнений:

$$\frac{\partial \psi_1^2}{\partial t} + \lambda \frac{\partial \psi_1^2}{\partial x} = 0, \quad k = 1, 2, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \psi_2^2}{\partial t} - \lambda \frac{\partial \psi_1^2}{\partial x} = 0. \quad (23)$$

Поставим для решений системы (22, 23) граничные условия

$$\psi_1^2 = \psi_1^2, \quad \psi_1^2 = \Phi(\psi_1^2), \quad (24)$$

где $\Phi: I \mapsto I$ – заданная функция, которая преобразует некоторый открытый ограниченный интервал в себя. Будем искать решения краевой задачи в виде: $\psi_1^2 = f_1(t - x/\lambda)$, $\psi_2^2 = f_2(t + x/\lambda)$. Подстановка функций f_1, f_2 в граничные условия приводит к функциональным уравнениям

$$f_1(t) = f_2(t), \quad f_2(t + l/\lambda) = \Phi(f_1(t - l/\lambda)). \quad (25)$$

Выполним во втором из этих уравнений сдвиг $t \mapsto t + l/\lambda$. В результате получим разностное уравнение с непрерывным временем

$$f_2(t + 2l/\lambda) = \Phi(f_2(t)), \quad t \geq 0. \quad (26)$$

При подходящем выборе отображения Φ и начальных распределений решения уравнения (26) представляют собой асимптотически $2^N l/\nu$ – периодические функции, где N – наименьшее общее кратное периодов притягивающих циклов отображения Φ [13].

Известно, что нелинейные РУ (а, по существу, ДРУ с запаздывающим аргументом) допускают существование странных аттракторов. В свою очередь, из странности аттрактора вытекает его фрактальность (необходимое условие). Таким образом, фазовые портреты нелинейных хаотических систем представляют собой фракталы. Следовательно, огибающая колебаний волновой функции для рассматриваемой выше нелинейной краевой задачи для линейных уравнений Шредингера может иметь не столь простую структуру как это показано на рис.1 (для монотонного отображения Φ , которое имеет одну отталкивающую и две притягивающие неподвижные точки), а представлять собой график фрактального множества с дробной размерностью (в случае немонотонного или многозначного отображения Φ).

Каковы же сами распределения волновых функций, если их огибающие имеют столь сложную структуру (гомеоморфную несчетному нигде не плотному множеству Кантора второй категории по Бэру)?

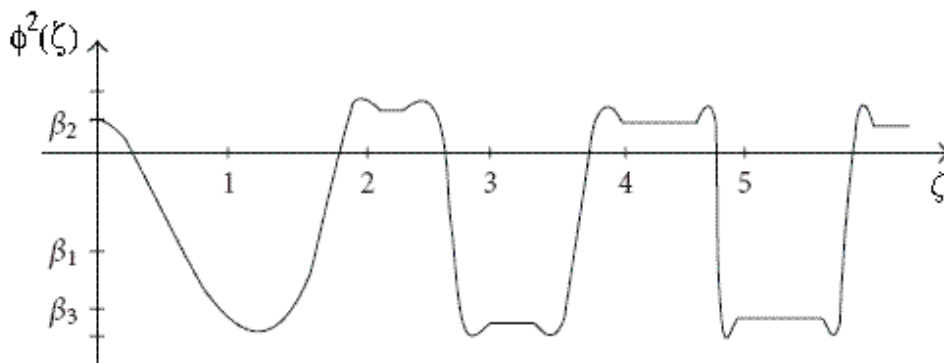


Рис. 1. Огибающая колебаний плотности одной из компонент "квантованной" полимерной цепи. β_1 – отталкивающая неподвижная точка отображения, порождаемого разностным уравнением (26); β_2, β_3 – притягивающие неподвижные точки; $\zeta = t - x/\nu$, где ν – скорость распространения оптических солитонов (в нелинейной оптике или скорость распространения кристаллической фазы в физике полимеров; x – координата фронта распространения бегущей волны.

3. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Граничные условия (24) имеют простой физический смысл в задачах нелинейной оптики. В самом деле, если $\psi = J$, где J – интенсивность излучения,

$$J(x, t) = |J(x, t) \exp(kx - \omega t)| \quad (27)$$

k – волновой вектор, направленный вдоль оси x ; ω – частота приложенного поля, то функциональные граничные условия определяют связь между мощностью падающего и отраженного излучения (квадратами амплитуд падающей и отраженной волн излучения [3]. Такую связь можно реализовать на эксперименте при помощи нелинейного оптического преобразователя – аналога нелинейного туннельного диода в электрической цепи [12].

При моделировании полимерных цепей физическая интерпретация функциональных граничных условий не столь тривиальна, поскольку непонятно как реализовать на эксперименте взаимосвязь между квадратами плотностей полимерных цепей A и B . Однако такая связь между амплитудами вытекает из дифференциальных граничных условий, которые можно реализовать на эксперименте с помощью поверхностного циклического нагрева и охлаждения (при этом температуру мы будем рассматривать как бифуркационный параметр). Соответствующие граничные условия определяют скорость образования поверхностной упорядоченной фазы на поверхности образца, которая в дальнейшем проникает в объем образца, не изменяя своей формы. [13, 15, 7]).

Тогда функциональные граничные условия допускают физическую интерпретацию, если предположить, что рассматриваемая краевая задача включена в семейство краевых задач с дифференциальными граничными условиями вида:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t}(0, t) = F_1(\psi_1(0, t), \psi_2(0, t)), \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial t}(0, t) = F_2(\psi_1(0, t), \psi_2(0, t)) \quad (28)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t}(l, t) = F_1(\psi_1(l, t), \psi_2(l, t)), \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial t}(l, t) = F_2(\psi_1(l, t), \psi_2(l, t)) \quad (29)$$

F_1, F_2, G_1, G_2 – заданные функции, зависящие от поверхностной энергии активации, нуклеирующих добавок, температуры как параметра и других параметров задачи [13, 15, 7]. Граничные условия (28), (29) имеют простой физический смысл, так как левые части уравнений (28), (29) определяют скорости изменения поверхностных плотностей кристаллической (или жидкой) фазы соответственно. Эти скорости, в свою очередь, пропорциональны вероятностям образования кристаллитов (или вероятностям их плавления) на плоских стенках, ограничивающих бинарную смесь.

Покажем, что имеет место редукция от дифференциальных граничных условий, имеющих простой физический смысл, к функциональным граничным условиям. Для этого предположим, что система ОДУ (28) допускает интеграл

$$W_1(\psi_1^2(0, t), \psi_2^2(0, t)) = \mu_1 \quad (30)$$

а система (29) – интеграл

$$W_1(\psi_1^2(0, t), \psi_2^2(0, t)) = \mu_2 \quad (31)$$

μ_1, μ_2 – постоянные, которые определяются из начальных условий так, что:

$$\mu_1 = W_1(\psi_1^2(0, 0), \psi_2^2(0, 0)) \quad (32)$$

$$\mu_2 = W_1(\psi_1^2(0, t), \psi_2^2(0, t)) \quad (33)$$

Пусть существует открытый ограниченный интервал $I \in \mathbb{R}^1$ такой, что для всех $\psi_1, \psi_2 \in I$ при каждом $t > 0$ функциональные соотношения (32), (33) глобально разрешимы (возможно, неоднозначно) таким образом, что

$$\psi_1^2(0, t) = \Phi_{1, \mu_1}(\psi_2(0, t)), \quad \psi_2^2(l, t) = \Phi_{2, \mu_2}(\psi_1(l, t)) \quad (34)$$

где $\Phi_{1, \mu_1}, \Phi_{2, \mu_2} : I \rightarrow I$ – некоторые достаточно гладкие структурно-устойчивые отображения. Пусть $\Phi_{1, \mu_1} := Id$, где Id – тождественное отображение; $\Phi_2 = \Phi_{2, \mu_2}$. В результате мы приходим от дифференциальных граничных условий (физическая интерпретация которых понятна) к функциональным граничным условиям.

4. УСЛОВИЕ МАЛОСТИ ПОТЕНЦИАЛА

Выберем нормировку $c = \psi^2$, где c – концентрация. Тогда самосогласованный потенциал можно записать в виде

$$U(x) = Tvc(x) = T\mathbf{v}|\psi(x)|^2 \quad (35)$$

где $\mathbf{v}$ – параметр исключенного объема. В уравнении Гамильтона-Якоби следует положить $V(x) = U(x)/T$, что приводит к уравнению

$$\frac{\partial S_k}{\partial t} + \mathbf{v}|\psi_k|^2 + \frac{1}{2}(\nabla S_k)^2 = 0, \quad S_k(x, 0) = S_0^{(k)}(x), \quad (36)$$

здесь $\mathbf{v} = a^3(1 - 2\kappa)$ – параметр исключенного объема, κ – параметр Флори-Хаггинса. В большинстве случаев параметр κ положителен. Это объясняется тем, что взаимодействия (мономер-мономер, мономер-растворитель, растворитель-растворитель) сводятся к вандерваальсову притяжению [15]. В уравнении (36) величина $\mathbf{v}|\psi|^2 = \mathbf{v}c$ безразмерна, так как безразмерна величина $\mathbf{v}$ ([6], с.275). Это означает, что $|\psi|^2$ имеет размерность a^{-n} , где n – размерность пространства.

Следовательно, мы должны выполнить нормировку $\psi \mapsto \psi/\psi_0$. При исследовании флуктуаций концентрации в окрестности среднего состава можно положить $|\psi_0|^2 = 1/2$. Таким образом, структуры релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа (в данном идеальном случае) являются поверхностно-индуцированными структурами в идеальных цепях.

При этом следует отметить, что в конфигурационной статистике макромолекул их цепное строение и (связанный с ним) эффект исключенного объема играют ведущую роль. Этот эффект означает, что в одном и том же элементе объема пространства не может находиться более одного звена (или мономера) одновременно (см. [17]). Эффект исключенного объема является эффектом дальнего порядка, так как доминирующую роль при формировании пространственной конфигурации макромолекулы играет объемное взаимодействие ее мономеров с большими разностями их порядковых номеров на полимерной цепи.

Взаимодействие между любыми (двумя) мономерами, соединенными между собой более чем одним звеном, можно описать короткодействующим потенциалом отталкивания $U(x)$ с радиусом действия x_0 , который не превосходит длину одного звена (то есть при $x_0 < l$, где l – длина звена). Тогда выражение

$$v_0 = \int (1 - \exp(-U(x)/T)) d^n x \quad (37)$$

определяет величину исключенного объема в n – мерном пространстве. Здесь T – абсолютная температура, выраженная в энергетических единицах.

Таким образом, предположение о малости U/T означает малость параметра исключенного объема v_0 . Согласно [17] (в большинстве случаев), неравенство $U/T \ll 1$ может быть оправдано, так как величиной порядка единицы является величина NU/T , а не U/T . Тем не менее, представленный в данной статье метод получения пространственно-временных колебаний для концентрации $c = \psi^2$ имеет место лишь для идеальных цепей. Проблема учета реальных значений $U/T \sim 1$ остается открытой.

5. ПРИМЕР

В качестве примера используем параболу $f_\lambda: u \mapsto \lambda u(1-u)$, $u \in [0,1]$, $0 < \lambda \leq 4$, где параметр λ характеризует нелинейный коэффициент связи между двумя (падающей и отраженной) оптическими волнами (см., например, [3]). При $1 + \sqrt{6} < \lambda < \lambda^*$, где $\lambda^* = 3.57$ – значение λ , которое является предельным для бифуркационных значений удвоения периода, отображение f_λ имеет циклы периодов $1, 2, 2^2, \dots, 2^k$ где $k > 1$. При $\lambda > \lambda^*$ отображение f_λ имеет цикл, отличный от степени 2, порождает слабую идеальную турбулентность в первом случае [18] и идеальную турбулентность – во втором случае [19].

Под идеальной турбулентностью мы будем понимать турбулентность в системах без внутреннего сопротивления [18]. Понятие идеальной турбулентности предложено А.Н. Шарковским (1983). При этом первоначально использовалось понятие "сухая турбулентность" [1, 20, 21] (по аналогии с "сухой водой" Фейнмана

[22]. В научной терминологии понятие турбулентность идеальная представлено в [23].

Будем говорить, что начальное состояние $\phi \in C^l$, где C^l – пространство l – раз дифференцируемых функций, порождает идеальную турбулентность, если найдется функция $g \in \omega^\Delta[\phi]$, график которой является фрактальным. Здесь $\omega^\Delta[\phi]$ есть непустое компактное ω – предельное множество. При этом типична ситуация, когда некоторые (а возможно, и все) "точки" множества $\omega^\Delta[\phi]$ являются полунепрерывными сверху (то есть, разрывными) функциями. Следовательно, их графики могут оказаться фрактальными: точнее, для $\xi \in \omega^\Delta[\phi]$ какая-либо из фрактальных размерностей $\text{graph} \xi$ больше топологической размерности области D – области определения функции $\xi(y)$.

Будем говорить, что имеет место слабая идеальная турбулентность, если ϕ не порождает идеальную турбулентность (то есть график предельной функции как элемента аттрактора не является фрактальным), но существует функция $\xi \in \omega^\Delta[\phi]$, которая является разрывной на бесконечном множестве точек из области ее определения D : то есть на бесконечном множестве точек $y' \in D$ значения функции $\xi(y)$, принадлежащие 2^E , не являются одноточечными множествами. Это означает, что E может быть интервалом.

Наконец, имеет место третий случай, когда существует множество $\Lambda \in (\lambda^*, 4]$ положительной меры Лебега такое, что f_λ при $\lambda \in \Lambda$ имеет единственную гладкую эргодическую инвариантную меру. Тогда динамическая система порождает слабую идеальную турбулентность. В частности, отображение $u \mapsto 4u(1-u)$ имеет инвариантную меру с плотностью $p(u) = 1/\pi\sqrt{u(1-u)}$ и носителем $[0,1]$. В этом случае для каждой несингулярной функции $\phi \in C^l$ предельное множество $\omega^\#[\phi]$ состоит из единственной случайной функции (с независимыми значениями) $\xi^*(y)$, которая задается не зависящей от y функцией распределения

$$F_\xi(u, y) = \int_0^u p(s) ds = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{u} \quad (38)$$

и глобальный аттрактор $A^\#$ состоит из одной траектории – точки ξ^* [19].

Список литературы

1. Шарковский А.Н. Колебания, описываемые автомодельными разностными и дифференциально-разностными уравнениями / Шарковский А.Н. // Proc. VIII Int. Conf. Nonlinear Oscillations – 1978. – V. 2. – P. 1073-1078.
2. Ладыженская О.А. О нахождении глобального аттрактора для уравнения Навье-Стокса и других уравнений с частными производными / Ладыженская О.А. // Успехи мат. наук. – 1987. – Т. 42б. – С. 25-60.

3. Краснюк І.Б. Возникновение стохастических структур под действием спонтанного излучения / Краснюк І.Б., Рискиев Т.Т. // Оптика и спектроскопия. – 1993. – Т. 75. – № 3. – С. 517-527.
4. Краснюк І.Б. Решения предтурбулентного типа в задачах квантовой механики / Краснюк І.Б., Стрельцов А.А. // Узбекский физический журнал. – 1994. – № 1. – С. 12-18.
5. Краснюк І.Б. Нелинейные граничные задачи для уравнения Больцмана: периодические решения и их бифуркации / Краснюк І.Б. // Теоретическая и математическая физика. – 1997. – Т. 110. – № 2. – С. 323-333.
6. Де Жен П. Идеи скейлинга в физике полимеров / Де Жен П. – М.: Мир, 1982. – 368 с.
7. Каскадный процесс кристаллизации расплава / Краснюк І.Б., Таранец Р.М., Стефанович Л.И., Юрченко В.М. // Материаловедение. – 2008. – № 7. – С. 50-58.
8. Майер А.А. Экспериментальное наблюдение явления самопереключения однонаправленных распределенно-связанных волн / Майер А.А. // Успехи физических наук. – 1996. – Т. 166. – № 11. – С. 1171-1196.
9. Майер А.А. Оптическое самопереключение однонаправленных распределенно-связанных волн / А.А. Майер // Успехи физических наук. – 1995. – Т. 165. – С. 1037-1075.
10. Incoherently coupled dark-line bright soliton pair / J. Liang, Y. Wu, L. Yan. S. Pair // Chinese Journal of Physics. – 2008. – V. 46. – No. 4. – P. 425-429.
11. Бондаренко А.Н. Дис. д-ра физ.-мат. наук: 05.13.18, Новосибирск. – 2005, 308 С, РГБ ОД, 71:06-1/114.
12. Шарковский А.Н. Разностные уравнения и их приложения / Шарковский А.Н., Майстренко Ю.Л., Романенко Е.Ю. – Киев: Наукова думка, 1980. – 237 с.
13. Krasnyuk I.B. The Spatiotemporal Oscillations of Order Parameter for Isothermal Model of the Surface-Directed Spinodal Decomposition in Bounded Binary Mixtures / Krasnyuk I.B., Taranets R.M. // Research Letters in Physics. – 2009. – Article ID 250203, doi:10.1155/2009/250203).
14. Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях / Маслов В.П. – М.: Наука, 1977. – 384 с.
15. Краснюк І.Б. Колебания концентрации в ограниченных бинарных смесях с учетом поверхностных эффектов / Краснюк І.Б., Стефанович Л.И., Юрченко В.М. // Журнал технической физики. – 2007. – Т. 77, № 11. – С. 55-63.
16. Йорк Дж.А. Хаотическое поведение и гидродинамика, В кн.: Гидродинамические неустойчивости и переход к турбулентности / Йорк Дж.А., Йорк Э.Д. [под редакцией Суинни Х., Голлаба Дж.]. – М.:Мир, 1984. – С. 101-123.
17. Алхимов В.И. Эффект исключенного объема в статистике самоизбегающих блужданий / Алхимов В.И. // Успехи физических наук. – 1994. – Т. 164, № 6. – С. 561-601.
18. Cooke K.L. Differential difference equations and nonlinear initial-boundary-value problems for linear hyperbolic partial differential equations / Cooke K.L., Crumme D. // J. Math. Anal. and Appl. – 1968. – V. 24. – P. 372-387.
19. Романенко Е.Ю. Динамические системы и моделирование турбулентности / Романенко Е.Ю. // Украинский математический журнал. – 2007. – Т. 59, № 2. – С. 217-230.
20. Sharkovsky A.N. "Dry" turbulence" / Sharkovsky A.N. // Short. Comm. Int. Congr. Math. – 1983. V. 10(12). – P. 4.
21. Sharkovsky A.N. "Dry" turbulence" / Sharkovsky A.N. // Proc. Int. Workshop "Nonlinear and Turbulent Processes in Physics". – 1984. – V. 3. – P. 1621-1626.
22. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике / Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. – М.:Мир, 1977. – Т. 7 – 421 с.
23. Enciclopedia of Nonlinear Science / [ed. by Alwyn Scott] – New York, Rontledge, 2005.

Краснюк І.Б. Ідеальна турбулентність в нелінійній "квантовій" фізиці полімерів / Краснюк І.Б., Мельник Т.М., Юрченко В.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 94-107.
 Розглядаються крайові задачі для лінійних систем рівнянь Шредингера з нелінійними граничними умовами для хвильових функцій. При цьому нелінійність в граничних умовах породжує виникнення поверхневих просторово-часових структур, що в подальшому проникають до обмеженої області, не

змінюючи форми. Ці структури є асимптотично нестійкими під впливом збурень, та їхні "часи життя" є порівнянними з часом проведення експерименту. В нелінійній оптиці для ідеальних оптичних резонаторів такі (об'ємні) структури відомі і називаються темними і світлими солітонами. В нелінійній фізиці полімерів відомі асимптотично стаціонарні структури, що осцилюють, які називаються ламелярними структурами. Виявляється, що в полімерних ланцюгах можуть існувати просторово-часові розподіли ламелярного типу, що indukуються поверхневими процесами кристалізації або розплаву полімерних ланцюгів. Істотну роль при цьому можуть відігравати поверхневі нуклеюючі домішки.

Ключові слова: полімерні ланцюги, нелінійна оптика.

Krasnyuk I.B. Ideal turbulence in nonlinear "quantum" physics of polymers / Krasnyuk I.B., Melnik T.N., Yurchenko V.M. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 94-107.

The boundary-value problem for linear Schrodinger's equations with nonlinear conditions for wave functions has been considered. The boundary conditions produce surface spatial-temporal structures entering the volume of pattern which is ideal optical resonator or ideal mixture. The structures are asymptotically unstable but they exist on the times that are comparable with times of experiments. In optic such structures are known as dark and white solitons. In polymer physics an oscillating asymptotically stationary structures also are known as lamellar structures. It will be proved that for polymer blends there are surface-induced spatial-temporal structures of the lamellar type that may be produced by the surface processes of crystallization or melting.

Keywords: polymer chains, nonlinear optics.

Поступила в редакцію 09.11.2010 г.

УДК 537.612

ВЛИЯНИЕ БОЛЬШОЙ ДВУХОСНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННОГО КРИСТАЛЛА С $S=1$

Фридман Ю.А., Гореликов Г.А., Клевец Ф.Н.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: frid@tnu.crimea.ua, gorelikov.gennadii@rambler.ru, phil_klevets@mail.ru

В работе исследовано влияние двухосной одноионной анизотропии на фазовые состояния ванфлековского магнетика.

Ключевые слова: ферромагнетик, анизотропия, фазовые переходы.

ВВЕДЕНИЕ

Магнетики с большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» обладают рядом необычных свойств. Если константа одноионной анизотропии превосходит константу обменного взаимодействия, в магнетике формируется одинаковое для всех ионов синглетное спиновое состояние. Физически это означает, что из трех возможных одноионных спиновых состояний с проекциями $S^z = \pm 1, 0$ на ось C_3 нижайшим оказывается последнее. Теоретические исследования таких

систем восходят к работе Мория [1]. В ней было показано, что при $\frac{6}{2J_0} > 1$, даже

при абсолютном нуле температур ($T = 0$) в отсутствие внешнего поля реализуется немагнитное, квадрупольно-упорядоченное основное состояние. В таких магнетиках квантовые свойства отдельных спинов в эффективном магнитном поле играют решающую роль в формировании динамических и термодинамических свойств магнетиков. В [2] было показано, что конкуренция двух типов взаимодействий – одноионной анизотропии и обмена, приводит к существованию своеобразных типов спиновых структур при $T = 0$: одноионная анизотропия также создает эффективное поле, но не ферромагнитного, а квадрупольного типа. Соответствующий квадрупольный порядок в рассматриваемом случае можно представить как хаотичное упорядочение спинов в плоскости, перпендикулярной оси ферромагнетизма, выделенной, например, внешним полем, и характеризовать

квадрупольным параметром порядка $q = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1)$. Таким образом,

несмотря на отсутствие векторного магнитного порядка, соответствующие структуры являются спин-упорядоченными, и порядок в них определяется тензорными характеристиками. По этой причине их свойства отличаются от свойств парамагнетиков, в частности, оказываются близкими к свойствам

антиферромагнетиков (а конкретно – одноосных в поле, параллельном оси анизотропии). Такие системы называют также ванфлековскими парамагнетиками [3,4].

Развитие твердотельных технологий требует создания материалов с все более сложной кристаллической структурой. К таким системам относятся, например, магнетики с двухосной одноионной анизотропией. Однако, исследования зависимости фазовых состояний от величины константы гексагональной анизотропии, насколько нам известно, не проводились.

1. МОДЕЛЬ

В качестве исследуемой системы рассматривается анизотропный ферромагнетик, занимающий все пространство. Рассматриваемый ферромагнетик обладает большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», а также анизотропией типа «легкая ось», лежащей в «легкой плоскости». Такая модель одноионной анизотропии представляет собой ничто иное, как двухосную одноионную анизотропию. В качестве базисной плоскости выберем плоскость XOY. Система находится во внешнем магнитном поле, перпендикулярном базисной плоскости ($\vec{H} \parallel OZ$). Спин магнитного иона предполагается равным единице ($S=1$) – это то минимальное значение спина, при котором возможно существование одноионной анизотропии. Гамильтониан исследуемого магнетика имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{f,f'} J(f-f') \vec{S}_f \vec{S}_{f'} + \frac{\beta}{2} \sum_f (S_f^z)^2 - \frac{\beta_{xy}}{2} \sum_f (S_f^x S_f^y + S_f^y S_f^x) - H \sum_f S_f^z, \quad (1)$$

где $J(f-f')$ – константа билинейного обменного взаимодействия; f – номер узла в кристалле; S_f^i – i -я компонента спинового оператора в узле f ; $\beta > 0$ – константа легкоплоскостной одноионной анизотропии; $\beta_{xy} > 0$ – константа легкоосной одноионной анизотропии. Дальнейшие вычисления будем проводить для случая низких температур ($T=0$), в котором наиболее ярко проявляются свойства большой одноионной анизотропии.

Для описания данной системы удобно использовать диаграммную технику операторов Хаббарда [5,6,7,8]. Такой метод решения позволяет точно учесть одноионную анизотропию путем включения ее в одноузельный гамильтониан, а также проводить вычисления при произвольном соотношении материальных констант. Операторы Хаббарда строятся на полном базисе собственных состояний одноионного гамильтониана, включающего в себя эффекты самосогласованного поля [9].

Выделим в обменной части гамильтониана (1) среднее поле $\langle S_f^z \rangle$, связанное с упорядочением магнитного момента, а также дополнительные поля $\langle Q_{2f}^p \rangle = q_2^p$ (

$p = 0, xy$), определяемые квадрупольными моментами. В результате получим одноузельный гамильтониан следующего вида:

$$\mathcal{H}_0(f) = -\bar{H}S_f^z + \frac{\beta}{6}Q_{2f}^0 - \frac{\beta_{xy}}{2}Q_{2f}^{xy} + \varepsilon_0, \quad (2)$$

где $\bar{H} = H + J_0 \langle S^z \rangle$, $\varepsilon_0 = \frac{\beta}{6}NS(S+1) + \frac{1}{2}J_0 \langle S^z \rangle^2$; $Q_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1)$,

$Q_{2f}^{xy} = S_f^x S_f^y + S_f^y S_f^x = \frac{1}{2i} \{ (S_f^+)^2 - (S_f^-)^2 \}$ – операторы Стивенса.

Из решения одноузельной задачи с гамильтонианом (2) получаем следующие энергетические уровни магнитного иона

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \chi, \quad E_0 = 0, \quad E_{-1} = \frac{\beta}{2} + \chi, \quad (3)$$

и собственные функции гамильтониана (2)

$$\Psi_f(1) = sh\theta|1\rangle + ch\theta|-1\rangle, \quad \Psi_f(0) = |0\rangle, \quad \Psi_f(-1) = ch\theta|1\rangle + sh\theta|-1\rangle, \quad (4)$$

где $\chi = \sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta_{xy}}{2}\right)^2}$, $ch\theta = \left[\frac{\chi - \bar{H}}{2\chi}\right]^{\frac{1}{2}}$, $sh\theta = -i \frac{\beta_{xy}}{2\sqrt{2\chi(\chi - \bar{H})}}$.

На собственных функциях $\Psi_n(M)$ построим операторы Хаббарда $X_f^{M'M} \equiv |\Psi_f(M')\rangle \langle \Psi_f(M)|$, описывающие переход магнитного иона из состояния $|M\rangle$ в состояние $|M'\rangle$ [5,6,7,8]. Для рассматриваемой системы приходим к следующему виду связи спиновых операторов с операторами Хаббарда:

$$S_f^+ = \sqrt{2} \{ ch\theta (X_f^{01} + X_f^{-10}) + sh\theta (X_f^{0-1} - X_f^{10}) \}, \quad S_f^- = (S_f^+)^+, \quad (5)$$

$$S_n^z = ch2\theta (X_n^{-1-1} - X_n^{11}) + sh2\theta (X_n^{-11} - X_n^{1-1}).$$

В представлении (5) одноузельный гамильтониан (2) диагонален. Как следует из (5), параметры порядка системы при $T=0$ можно представить в виде:

$$\langle S^z \rangle = -ch2\theta, \quad q_2^0 = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 2, \quad q_2^2 = 0, \quad q_2^{xy} = -2sh2\theta. \quad (6)$$

Рассмотрим, какие однородные фазовые состояния в данной системе будут реализовываться в зависимости от соотношения материальных констант.

1. При $H \gg \beta, \beta_{xy}, J$ (случай большого внешнего поля) в системе реализуется ферромагнитная фаза с магнитным моментом, направленным вдоль внешнего магнитного поля (параллельно оси OZ). При этом нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а волновая функция этого состояния $\Psi(1) = -i|1\rangle$.

Параметры порядка системы, как следует из (6), имеют вид:

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0, \quad q_2^{xy} = 0. \quad (7)$$

Необходимо отметить, что реализация ферромагнитной фазы возможна также и в отсутствие внешнего поля, но только в случае сильных обменных взаимодействий ($J \gg \beta, \beta_{xy}$).

2. В случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии ($\beta \gg H, J, \beta_{xy}$), как следует из (3), происходит инверсия энергетических уровней, и нижайшим оказывается уровень E_0 . Волновая функция этого состояния $\Psi(0) = |0\rangle$, а параметры порядка системы равны:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = -2, q_2^2 = 0, q_2^{xy} = 0. \quad (8)$$

Хотя, как следует из (8), средняя намагниченность (на один узел) в этом состоянии равна нулю, данное фазовое состояние не является парамагнитным, поскольку для парамагнитного состояния характерно следующее условие: $\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{2}{3}$. В рассматриваемом случае выполняется иное соотношение, а именно

$$\langle (S^z)^2 \rangle = 0, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

Такое фазовое состояние мы будем называть квадрупольно упорядоченным (QU₂-фазой), поскольку отличным от нуля параметром порядка является компонента тензора квадрупольных моментов q_2^0 [10]. В некоторых работах такое фазовое состояние называют ванфлековским парамагнетиком [3,4].

3. Для рассматриваемой системы возможна реализация еще одной нетривиальной ситуации при $H=0$. В случае преобладания наклонной легкоосной анизотропии ($\beta_{xy} \gg \beta, J$) в системе реализуется еще одно квадрупольное состояние (QU₁-фаза). В этой фазе нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона, как видно из (3), является E_1 . Однако параметры порядка системы в этом случае имеют вид:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 0, q_2^{xy} = 2. \quad (9)$$

$$\text{Основное состояние в этой фазе } \Psi(1) = -\frac{i}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle.$$

Нашей задачей является исследование фазовых переходов в рассматриваемой системе. Для этого определим спектры элементарных возбуждений в соответствующих фазах. Хорошо известно, что спектры элементарных возбуждений определяются полюсами функции Грина

$$G^{\alpha\alpha'}(f, \tau; f', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_f^\alpha(\tau) \tilde{X}_{f'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где $\hat{T}$ - оператор Вика, $\tilde{X}_n^\alpha(\tau)$ - оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, усредненный с полным гамильтонианом системы. Процедура

получения дисперсионного уравнения подробно описана, например, в [6,7,8]. Как показано в этих работах, дисперсионное уравнение, определяющее спектры элементарных возбуждений, получено при точном учете одноионной анизотропии.

2. ФЕРРОМАГНИТНАЯ ФАЗА

В случае больших магнитных полей параметры порядка системы определяются соотношениями (7). В результате решения дисперсионного уравнения получаем две следующих ветви

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k) &= \chi - \frac{\beta}{2} - J(k) \approx \alpha k^2 + H - \frac{\beta}{2} + \frac{1}{8} \frac{\beta_{xy}^2}{H + J_0}, \\ \varepsilon_2(k) &= \sqrt{4\chi^2 - \frac{\beta_{xy}^2}{\chi} J(k)} \approx \sqrt{4(H + J_0)^2 + \beta_{xy}^2 - \frac{\beta_{xy}^2}{H + J_0} J_0}.\end{aligned}\quad (10)$$

Здесь $\alpha = J_0 R_0^2$, R_0 – радиус взаимодействия.

Как видно из полученных выражений, ветвь $\varepsilon_2(k)$ является высокочастотной, и точка фазового перехода из ферромагнитной фазы определяется из спектра $\varepsilon_1(k)$.

Легко видеть, что спектр размягчается при

$$H_{FM} = \frac{\beta}{2} - \frac{\beta_{xy}^2}{8(\frac{\beta}{2} + J_0)}.\quad (11)$$

Соотношение (11) определяет поле перехода из ферромагнитной фазы. Как видно, двухосная анизотропия увеличивает область существования ФМ фазы.

3. QU₂-ФАЗА

Рассмотрим теперь решения дисперсионного уравнения в случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии. В этом случае параметры порядка имеют вид (8). При этом происходит инверсия энергетических уровней, и нижайшим становится E_0 . Наличие двухосной анизотропии приводит к снятию вырождения возбужденных энергетических уровней. Полученные спектры магнонов имеют вид:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(\frac{\beta}{4} - J_0 + \alpha k^2\right)\beta} \pm \sqrt{H^2 + \frac{\beta_{xy}^2}{4}}.\quad (12)$$

Из полученных выражений следует, что реализация фазового перехода возможна при следующем значении поля:

$$H_{QU_2} = \frac{1}{2} \sqrt{(\beta - 4J_0)\beta - \beta_{xy}^2}.\quad (13)$$

Из (13) видно, что анизотропия β_{xy} существенно уменьшает область существования QU_2 фазы. При $\beta_{xy} = 0$ выражение (13) в точности соответствует результатам работы [11]. Кроме того, видно, что QU_2 фаза реализуется при $\sqrt{(\beta - 4J_0)\beta} > \beta_{xy}$, т.е. при $\beta_c = 2J_0 + \sqrt{4J_0^2 + \beta_{xy}^2}$.

4. QU_1 -ФАЗА

Как было сказано выше, в данной системе возможна реализация еще одного фазового состояния в случае отсутствия внешнего поля и преобладания наклонной легкоосной анизотропии ($\beta_{xy} \gg \beta, J$). Параметры порядка в QU_1 -фазе принимают значения (9), а нижайшим энергетическим уровнем является E_1 . При этом получаем следующие выражения для спектров магнонов:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= \sqrt{\beta_{xy}(\beta_{xy} - 2J(k))} \approx \sqrt{\beta_{xy}(\beta_{xy} - 2J_0 + \alpha k^2)}, \\ \varepsilon_2(k) &= \frac{1}{2} \sqrt{(\beta_{xy} - \beta)(\beta_{xy} - \beta - 4J(k))} \approx \frac{1}{2} \sqrt{(\beta_{xy} - \beta)(\beta_{xy} - \beta - 4J_0 + \alpha k^2)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Исследуя полученные выражения, находим значение константы наклонной анизотропии $(\beta_{xy})_{QU_1}$, при котором спектр размягчается:

$$(\beta_{xy})_{QU_1} = \beta + 4J_0. \quad (15)$$

Кроме того, как было отмечено выше, в случае большого обменного взаимодействия при нулевом поле в системе возможна реализация ферромагнитной фазы. Спектр магнонов в этой фазе легко получить из спектра $\varepsilon_1(k)$ в (10), приняв в нем $H=0$. Из полученного спектра получается следующее выражение для критического значения константы β_{xy} :

$$(\beta_{xy})_{FM} = 2\sqrt{\beta J_0}. \quad (16)$$

Таким образом, в системе возможна реализация фазовых состояний, представленных на соответствующих диаграммах (рис.1, 2).

Как видно из рис.1, в исследуемой системе фазовые переходы между ферромагнитной и QU_2 -фазой происходят через некоторое смешанное состояние, область существования которого по полю

$$\Delta H = H_{FM} - H_{QU_2} \approx J_0 - \frac{J_0 \beta_{xy}^2}{2\beta(\beta - 2J_0)}.$$

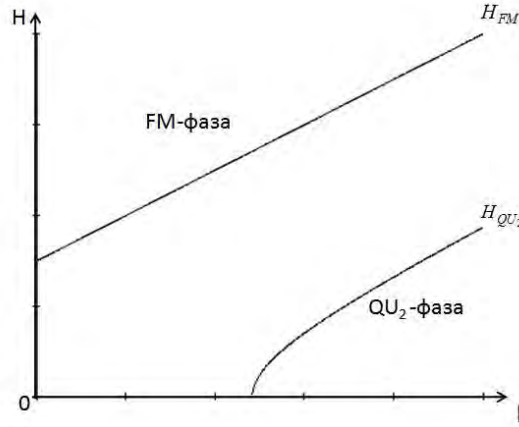


Рис. 1. Качественная фазовая диаграмма анизотропного гейзенберговского магнетика в случае наличия внешнего поля. H_{FM} и H_{QU_2} определяются выражениями (11) и (13), соответственно.

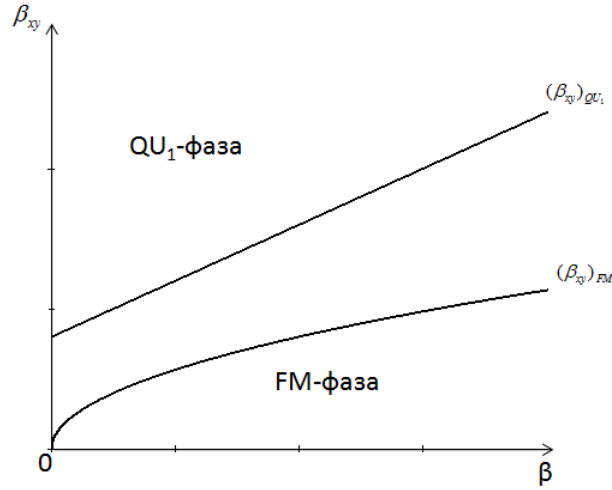


Рис. 2. Качественная фазовая диаграмма анизотропного гейзенберговского магнетика при отсутствии внешнего поля. $(\beta_{xy})_{QU_1}$ и $(\beta_{xy})_{FM}$ определяются выражениями (15) и (16), соответственно.

В случае отсутствия внешнего магнитного поля в системе возможна реализация фазовых состояний, показанных на рис. 2. В данном случае фазовый переход между двумя однородными состояниями также осуществляется через неоднородное. Область существования этого состояния по константе наклонной анизотропии имеет вид:

$$\Delta\beta_{xy} = (\beta_{xy})_{QU_1} - (\beta_{xy})_{FM} = \beta - 2\sqrt{\beta J_0} + 4J_0.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований нами установлено, что влияние большой двухосной анизотропии приводит к следующим эффектам:

1. В исследуемой системе возможна реализация трех однородных фазовых состояний: ферромагнитной фазы в случае больших магнитных полей, QU_1 -фазы в случае отсутствия магнитного поля и преобладания наклонной легкоосной анизотропии, а также QU_2 -фазы в случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии. Фазовые переходы между ферромагнитной фазой и QU_2 -фазой по полю и между ферромагнитной фазой и QU_1 -фазой осуществляются через неоднородные фазовые состояния.

2. Двухосная анизотропия увеличивает область существования ферромагнитного состояния, и уменьшает область существования QU_2 -фазы.

3. В отсутствие внешнего поля, большая двухосная анизотропия приводит к реализации QU_1 -фазы.

Список литературы

1. Moriya T. Theory of Magnetism of NiF_2 / Moriya T. // Phys. Rev. – 1960. – V. 117. – P. 635.
2. Онуфриева Ф.П. Низкотемпературные свойства спиновых систем с тензорными параметрами порядка / Онуфриева Ф.П. // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 89 – С. 2270.
3. Калита В.М. Многоподрешеточная магнитная фаза, индуцированная внешним полем в синглетном магнетике / Калита В.М., Локтев В.М. // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 125 – С. 1149.
4. Kalita V.M. Magnetization and magnetostriction of Van Vleck antiferromagnets with magnetic anisotropy of “easy-plane” type / Kalita V.M., Ivanova I., Loktev V.M. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 78 – P. 104415.
5. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Зайцев Р.О. // ЖЭТФ. – 1975. – Т. 68. – С. 207.
6. Мицай Ю.Н. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн / Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А. // ТМФ. – 1989. – Т. 81. – С. 263.
7. Вальков В.В. Квантовая спин-волновая теория ферромагнетиков с произвольным видом одноионной анизотропии / Вальков В.В., Валькова Т.А., Овчинников С.Г. // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 88. – С. 550.
8. Fridman Yu.A. Phase states of an $S=1$ magnet with anisotropic exchange interactions / Fridman Yu.A., Kosmachev O.A., Klevets Ph.N. // JMMM. – 2008. – V. 320. – P. 435.
9. Локтев В.М. Квантовая теория одноосного ферромагнетика в поперечном магнитном поле / Локтев В.М., Островский В.С. // УФЖ. – 1978. – Т. 23 – С. 1708.
10. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями / Нагаев Э.Л. – М.: Наука, 1988. – 231 с.
11. Фридман Ю.А. Спиральная магнитная структура в гейзенберговских и негейзенберговских магнетиках / Фридман Ю.А., Матюнин Д.А., Клевец Ф.Н., Гореликов Г.А. // ФТТ. – 2010. – Т. 52 – С. 1123.

Фрідман Ю.А. Вплив великої двовісної анізотропії на фазові стани магнітоупорядкованого кристала з $S=1$ / **Фрідман Ю.А., Гореліков Г.А., Клевець Ф.М.** // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 108-116.

У роботі досліджено вплив двовісної одноіонної анізотропії на фазові стани ванфлековського магнетика.

Ключові слова: ферромагнетик, анізотропія, фазові переходи.

Fridman Yu.A. Influence of biaxial anisotropy on phase states of magnetoordering crystal with $S=1$ / **Fridman Yu.A., Gorelikov G.A., Klevets Ph.N.** // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 108-116.

In this article we investigated the influence of biaxial anisotropy on phase states of van Flex magnet.

Keywords: ferromagnetic, anisotropy, phase transitions.

Поступила в редакцію 09.11.2010 г.

УДК 539.391+514.764.2

ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПО ЕЕ МОМЕНТАМ

Рошупкин С.Н.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

E-mail: rsn@tnu.crimea.ua

Рассмотрена общая теория линейного отклика. Рассмотрена эволюция корреляционной функции на коротких временах. Показано, что корреляционная функция может быть восстановлена по ее частотным моментам.

Ключевые слова: корреляционная функция, теория линейного отклика, частотные моменты.

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании динамических процессов в многочастичных системах обычно используют в качестве зонда внешнюю силу, которая лишь слегка выводит систему из равновесия, а затем измеряют зависящий от времени линейный отклик на эту силу. Большое число экспериментальных методов попадает в эту категорию: исследование формы линии экспериментальных, инфракрасных и рамановских спектров; изучение формы линии в экспериментах по дипольной или спиновой релаксации; исследование поглощения звука и кинетических характеристик и др. Во всех этих экспериментах изучаются динамические характеристики спонтанных флуктуаций относительно равновесного состояния. Для объяснения этих флуктуаций требуется гораздо меньше информации, чем содержится в микроскопическом состоянии или матрице плотности. Согласно теории линейного отклика эти флуктуации можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций: парных произведений некоторых динамических переменных $A(t)$ и $B(t')$, взятых в различные моменты времени t и t' и усредненных по каноническому ансамблю:

$$S_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle. \quad (1)$$

Эти функции представляют собой мощный и гибкий инструмент для теоретического исследования неравновесных характеристик. Особый интерес представляют флуктуации измеримых величин, зависящих от пространственных координат и времени и описывающих в длинноволновой области коллективное движение, характерное для многих систем. С помощью корреляционной функции плотности частиц

$$S_{nn}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left\langle n(\vec{r}, t) n(\vec{r}', t') \right\rangle, \quad (2)$$

описывают, например, рассеяние света, рентгеновских лучей и нейтронов, скажем, в нормальной жидкости. При рассеивании электронов измеряется функция

$S_{\rho\rho}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$, которая получается при замене в выражении (2) плотности частиц $n(\vec{r}, t)$ плотностью заряда $\rho(\vec{r}, t)$. В магнитных системах при рассеянии нейтронов измеряется корреляционная функция намагниченности $M(\vec{r}, t)$ и т.д. Важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Правила сумм представляют собой интегралы, которые можно оценить численно, если известны межчастичный потенциал и статические корреляционные функции. Сведения о статических корреляционных функциях можно получить с помощью численных расчетов. По этой причине можно считать, что частотные моменты корреляционной функции известны.

В предлагаемой вниманию работе показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

1. ЛИНЕЙНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК И ПРАВИЛА СУММ

Проанализируем теперь динамический отклик системы на внешнее магнитное поле $\delta h_b(\vec{r}, t)$, которое некоторым заданным образом изменяется в пространстве и во времени. Подобный подход объясняется, конечно, тем, что таким образом проводится большинство экспериментов: к системе прикладывают какую либо внешнюю силу, смотрят, что происходит, и делают выводы о свойствах самой системы. Разумеется, некоторые эксперименты не укладываются в эту схему, но многие укладываются; невозможно охватить все сразу. В присутствии внешнего магнитного поля $\delta h_b(\vec{r}, t)$ гамильтониан явно зависит от времени и определяется выражением

$$H(t) = H + \delta H_b(t) = H - \int d\vec{r} M(\vec{r}) \delta h_b(\vec{r}, t), \quad (3)$$

в представлении Шредингера, когда оператор $M(\vec{r})$ не зависит от времени. Зависимость от времени содержится в матрице плотности $\rho(t)$, которая описывает состояние системы таким образом, что среднее от величины $M(\vec{r})$ или любого другого оператора равно

$$\langle M(\vec{r}, t) \rangle = \text{Sp} \rho(t) M(\vec{r}), \quad \text{Sp} \rho(t) = 1. \quad (4)$$

Для дальнейшего нужно решить уравнение для матрицы плотности [1]

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)], \quad (5)$$

при начальном условии

$$\rho(-\infty) = \rho^0, \quad [H, \rho^0] = 0. \quad (6)$$

Начальное условие отражает тот факт, что до включения δh_b система стационарна; конечно, должно быть выполнено условие, что $\delta h_b \rightarrow -\infty$. Для дальнейших преобразований несущественно, какой вид имеет ρ^0 , однако она предполагается известной. Поскольку обычно система вначале находится в равновесном состоянии, удобно выбрать в качестве ρ^0 выражение, соответствующее каноническому ансамблю с фиксированным N , или большому каноническому ансамблю, или какому-либо другому стационарному состоянию. Теперь нужно найти линейный (по δh_b) отклик. Но в первом приближении уравнение (5) легко «решается». А именно: $\rho(t) = \rho^0 + \delta\rho(t)$, где

$$\delta\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau e^{-iH(t-\tau)/\hbar} [\delta H_b(\tau), \rho^0] e^{iH(t-\tau)/\hbar}. \quad (7)$$

Теперь с помощью простых преобразований легко убедиться в том, что изменение средней намагниченности $\delta \langle M(\vec{r}, t) \rangle = Sp \rho(t) M(\vec{r}) - Sp \rho^0 M(\vec{r})$ можно записать в виде [3]

$$\delta \langle M(\vec{r}, t) \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' \left\langle \frac{i}{\hbar} \left[M(\vec{r}, t), M(\vec{r}', t') \right] \right\rangle_{\text{равн}} \times \delta h_b(\vec{r}', t'), \quad (8)$$

где $\langle A \rangle_{\text{равн}} = Sp \rho^0 A$ (в дальнейшем индекс «равн» будем опускать). В формуле (8)

$M(\vec{r}, t)$ - гейзенберговские операторы для невозмущенной системы:

$$M(\vec{r}, t) = e^{iHt/\hbar} M(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar}. \quad (9)$$

Выражение (8) является основным результатом теории линейного отклика [2]. Из него следует, что функция отклика представляет собой усредненный коммутатор, а не корреляционную функцию, как можно было бы ожидать. Однако это несущественно, так как обе функции оказываются эквивалентными [3]. Обычно определяют функцию отклика следующим образом:

$$\chi''_{MM}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left\langle \frac{1}{2\hbar} \left[M(\vec{r}, t), M(\vec{r}', t') \right] \right\rangle. \quad (10)$$

Поскольку система трансляционно-инвариантна в пространстве и во времени:

$$\chi''(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \chi''(\vec{r} - \vec{r}', t - t'),$$

Можно ввести преобразование Фурье:

$$\chi''(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\omega(t-t') + i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \chi''(\vec{k}, \omega). \quad (11)$$

Легко показать [2], что $\chi''(\vec{k}, \omega)$ - вещественная, нечетная по ω функция и что она зависит лишь от $k = |\vec{k}|$, поскольку χ'' - коммутатор эрмитовых операторов, а равновесное состояние инвариантно относительно обращения времени и отражений и пространственно изотропно. Полезной бывает комплексная функция отклика $\chi(k, z)$, определяемая выражением

$$\chi(k, z) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''(k, \omega)}{\omega - z}. \quad (12)$$

Эта аналитическая функция комплексной переменной z при условии, что $\text{Im } z \neq 0$. На вещественной оси имеет разрез. Из выражения (10) следует, что

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^n \chi''(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left\langle \frac{1}{2\hbar} \left[\left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^n M(\vec{r}, t), M(\vec{r}', t') \right] \right\rangle. \quad (13)$$

При совпадающих временах $t = t'$ это означает, что

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^n \chi''(k, \omega) = \int d(\vec{r} - \vec{r}') e^{-i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \left\langle \left(\frac{1}{\hbar}\right)^n \left[\dots \left[M\left(\vec{r}, t\right), H \right], \dots, H \right], M\left(\vec{r}', t\right) \right] \right\rangle. \quad (14)$$

Таким образом, в правой части равенства (14) содержится последовательность коммутаторов, взятых в один и тот же момент времени, которую в принципе, а в некоторых случаях и фактически можно вычислить точно. Правила сумм дают коэффициенты разложения $\chi(k, z)$ при больших z . Из определения (12) видно, что при больших z

$$\chi(k, z) = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\langle \omega^{(n)}(k) \rangle}{z^n} \chi(k), \quad (15)$$

где

$$\langle \omega^{(n)}(k) \rangle = \frac{\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^n \chi''(k, \omega)}{\int \frac{d\omega}{\pi} \chi''(k, \omega)}. \quad (16)$$

При выводе формулы (15) использовано разложение

$$\frac{1}{1-\omega/z} = 1 + \frac{\omega}{z} + \left(\frac{\omega}{z}\right)^2 + \dots, \quad (17)$$

которое, разумеется, может быть лишь асимптотическим. Оно справедливо, когда $|z|$ значительно больше всех частот, имеющих в системе, при этом имеются в виду все частоты ω , для которых $\chi''(k, \omega)$ отлична от нуля. Можно также связать правила сумм с разложением в ряд Тейлора по времени t . Выражение (15) эквивалентно равенству

$$\chi''(k, t) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} \langle \omega^{(n+1)}(k) \rangle \chi(k), \quad (18)$$

откуда ясно, что высокочастотное разложение эквивалентно разложению для коротких временных интервалов.

2. ПРОБЛЕМА МОМЕНТОВ

Рассмотрим момент n -ого порядка M_n функции $\chi(\omega)$

$$M_n = \int_a^b \omega^n \chi(\omega) \rho(\omega) d\omega, \quad (19)$$

где $\rho(\omega)$ -весовая функция. Заметим, что линейной заменой переменной можно изменить пределы интегрирования. В результате изменится область определения $\chi(\omega)$ и новые моменты будут линейно выражаться через конечное число исходных. Например, пусть

$$x = 2\pi \frac{(\omega - a)}{(b - a)}. \quad (20)$$

Тогда

$$M_n = \frac{2\pi}{b-a} \int_0^{2\pi} \left(\frac{(b-a)x}{2\pi} \right)^n \chi\left(\frac{(b-a)}{2\pi} x - a \right) \rho\left(\frac{(b-a)}{2\pi} x - a \right) dx. \quad (21)$$

Положим

$$\chi(\omega) = \varphi(x), \quad \rho(\omega) = \omega(x), \quad (22)$$

и

$$\mu_n = \int_0^{2\pi} x^n \varphi(x) \omega(x) dx. \quad (23)$$

Тогда

$$\mu_n = \left(\frac{2\pi}{b-a} \right)^{n+1} \int_a^b (\omega - a)^n \chi(\omega) \rho(\omega) d\omega, \quad (24)$$

и следовательно

$$\mu_n = \left(\frac{2\pi}{b-a} \right)^{n+1} \sum_{k=0}^n C_n^k (-a)^{n-k} M^k. \quad (25)$$

Отсюда видно, что в силу линейности преобразования пределы интегрирования в (19) можно изменить, не прибегая к каким-либо бесконечным процессам. Обычно рассматриваются пределы $(-\infty, \infty)$, $(0, \infty)$ и $(-1, 1)$. Для решения проблемы моментов необходимо установить связь между моментами и коэффициентами разложения функции χ по полиномам, ортогональным с весом ρ в промежутке (a, b) . Предположим, что интервалом интегрирования является $(-\infty, \infty)$, а весовой множитель равен $\exp(-\omega^2)$. Можно, конечно, выделить множитель $\exp(-\omega^2)$ из функции $\chi(\omega)$ и определить новую неизвестную функцию $\psi(\omega)$ соотношением

$$\chi(\omega) = \exp(-\omega^2) \psi(\omega). \quad (26)$$

Соответствующими ортогональными полиномами на интервале $(-\infty, \infty)$ будут $H_n(\omega)$. Разложим теперь $\chi(\omega)$ следующим образом:

$$\chi(\omega) = \sum_n a_n H_n(\omega), \quad a_n = \frac{1}{n! 2^n \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) H_n(\omega) e^{-\omega^2} d\omega. \quad (27)$$

Так как $H_n(\omega)$ -полиномы, то интеграл, входящий в выражение для a_n , можно непосредственно выразить через M_n . Например, $H_0(\omega) = 1$, так что

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) e^{-\omega^2} d\omega = \frac{M_0}{\sqrt{\pi}}. \quad (28)$$

В общем случае

$$H_n(x) = \sum_k \frac{(-1)^k n!}{k!(n-k)!} (2x)^{n-2k}, \quad (29)$$

где при четном n последним членом разложения является постоянная, а при нечетном – член с первой степенью x . Тогда

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_k \frac{(-1)^k}{k!(n-k)!} \frac{M_{n-2k}}{2^{2k}}. \quad (30)$$

При помощи (30) легко найти функцию χ . Существует и другой подход к проблеме моментов. Покажем, что эта проблема эквивалентна интегральному уравнению первого рода. Обратимся, например, к разобранному выше случаю.

Умножим обе части уравнения (19) на $\exp(-x^2)(2x)^n/n!$, получим

$$\frac{(2x)^n}{n!} e^{-x^2} M_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(2x\omega)^n}{n!} e^{-(x^2+\omega^2)} \chi(\omega) d\omega. \quad (31)$$

Суммируя теперь в обеих частях по n , имеем

$$e^{-x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2x)^n}{n!} M_n = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-\omega)^2} \chi(\omega) d\omega. \quad (32)$$

Предполагая, что ряд в левой части сходится, мы видим, что проблема моментов сводится к интегральному уравнению первого рода. Конечно, это уравнение можно решить, разложив χ по полиномам Эрмита. Однако существуют приближенные методы решения интегральных уравнений которые часто могут оказаться более практичными, чем использование соотношения (30) [4]. Подобным образом можно поступать и в случае других промежутков интегрирования. Интервалу $(0, \infty)$ соответствуют весовая функция $e^{-\omega}$ и полиномы Лагерра. Промежутку $(-1, 1)$ и $\rho = 1$ соответствуют полиномы Лежандра. Если $\rho = \sqrt{1 - \omega^2}$, то соответствующими полиномами являются полиномы Чебышева. Весьма важно заметить, что разложение χ по ортогональным полиномам зависит от весовой функции ρ . Действительно характер сходимости для различных весовых функций может быть совершенно различен. Однако, как указывалось выше, выделяя множитель из $\chi(\omega)$ и рассматривая оставшийся множитель как неизвестную функцию, можно произвольным образом менять вес. Обозначим вес через $w(\omega)$, так что

$$M_n = \int_a^b \omega^n \rho(\omega) w(\omega) \varphi(\omega) d\omega, \quad \chi = w\varphi. \quad (33)$$

Наиболее подходящий (т.е. обеспечивающей наиболее быструю сходимость) будет также весовая функция w , которая возможно более близка к неизвестной функции χ . Очевидно, если она в точности равна χ , то в разложении φ по полиномам будет только один член, а именно $\varphi = 1$. Весьма выгодно использовать любую доступную информацию, чтобы построить наилучшее возможное приближение к χ , и затем взять это приближение в качестве w .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В предлагаемой вниманию работе показано, что спонтанные флуктуации относительно равновесного состояния можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций. При этом важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

Список литературы

1. Каданов Л. Квантовая статистическая механика / Каданов Л., Бейм Г. – М.: Мир, 1964.
2. Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц / Мартин П., Швингер Ю. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
3. Rice S.A. The statistical mechanics of simple liquids / Rice S.A., Gray P. – N. Y., Interscience, 1965.
4. Верлань А.Ф. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы / Верлань А.Ф., Сизинев В.С. – К.: Наукова Думка, 1986.

Рощупкін С.М. Відновлення кореляційної функції по її моментам / Рощупкін С.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 117-124.

Розглянута загальна теорія лінійного відклику. Розглянута еволюція кореляційної функції при малому часі. Показане, що кореляційна функція може бути відновлена по її частотним моментам.

Ключові слова: кореляційна функція, теорія лінійного відклику, частотні моменти.

Roshchupkin S.N. The constructing correlation function from its frequency moments / Roshchupkin S.N. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 117-124.

General theory of linear response function was described. We consider evolution of correlation function at short time. It is shown that correlation function may be constructing from its frequency moments.

Keywords: correlation function, the theory of linear response, frequency moments.

Поступила в редакцію 11.10.2010 г.

УДК 537.9

ТОЧНОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЯ МОМЕНТОВ ЛИНИИ ЯМР В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Рябушкин Д.С.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: druabushkin@crimea.edu*

Теоретически исследован вопрос о точности определения моментов линии поглощения ядерного магнитного резонанса в а) системах с гауссовым распределением случайных полей на ядрах (в жестком случае и при наличии подвижности марковского характера), б) двухспиновых системах с учетом межмолекулярного взаимодействия, в) двухспиновых системах, совершающих случайные перескоки между двумя положениями равновесия. Для всех случаев определена зависимость доли второго и четвертого моментов, теряемой в шумах, от отношения сигнал/шум.

Ключевые слова: магнитный резонанс, моменты линии ЯМР, двухспиновая система, подвижность, марковский характер, диполь-дипольное взаимодействие.

ВВЕДЕНИЕ

В силу многочастичности систем, изучаемых методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР), вычисление формы линии поглощения не может быть выполнено напрямую, без использования упрощающих предположений. Однако во многих случаях достаточно знать не саму линию, а ее усредненные характеристики, называемые моментами. Моментом n -го порядка, в соответствии с общим определением, называется величина вида [1]

$$M_n = \frac{\int (\omega - \omega_0)^n f(\omega) d\omega}{\int f(\omega) d\omega},$$

где ω и ω_0 – текущая и резонансная частоты, $f(\omega)$ – линия поглощения, интегрирование производится по всем частотам.

Несмотря на то, что значения моментов «завязаны» на неизвестную функцию частоты, существуют формулы, позволяющие вычислять начальные моменты точно при условии, что известна кристаллическая структура исследуемого образца [1, 2]. Как правило, в приложениях рассматриваются лишь второй (главным образом) и четвертый моменты, поскольку именно они определяют основные особенности наблюдаемых сигналов. Вклад шестого, восьмого и других моментов более высокого порядка обычно незначителен, а их учет сопровождается как весьма громоздкими выкладками, так и малосодержательными результатами.

При вычислении моментов по записанным экспериментальным сигналам исследователь всегда сталкивается с проблемой так называемых «хвостов», т.е. тех

участков на крыльях спектра, которые скрыты в шумах. Хотя их амплитуда относительно невелика и с удалением от резонансной частоты спадает, вклад «хвостов» может быть значительным, поскольку в определение моментов входит разность текущей и резонансной частот в соответствующей степени. Таким образом, чем выше порядок момента, тем существеннее могут быть его потери при обработке экспериментальных результатов. В общем случае провести оценку той доли моментов, что недоступна для изучения, нельзя, ибо не существует единого метода вычисления формы линии ЯМР. Однако можно рассмотреть типичные частные случаи и, исходя из результатов анализа, обобщить полученные оценки и на другие системы.

Во всех рассмотренных ниже задачах считалось, что взаимодействие моментов является диполь-дипольным, т.е. гамильтониан имеет вид [2]

$$\hbar H = \frac{\gamma^2 \hbar^2}{2} \cdot \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{R^3} \cdot (I_1 \cdot I_2 - 3 I_{1z} I_{2z}),$$

где γ – гиромагнитное отношение (считается, что все ядра принадлежат к одному сорту), θ – угол между внешним постоянным магнитным полем и межъядерным вектором, R – расстояние между спинами, I_1 и I_2 – операторы собственных механических моментов ядер, а I_{1z} и I_{2z} – операторы проекций спинов на направление внешнего поля.

1. ЛИНИЯ ГАУССА

В теории магнитного резонанса используется нормированная на единицу линия поглощения вида [2]

$$f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}M_2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta\omega}{M_2}\right)^2\right],$$

где $\Delta\omega$ – разность текущей и резонансной частот, M_2 – второй момент линии поглощения.

Хотя реальная линия поглощения ЯМР, вообще говоря, не является гауссовой, а представляет из себя нечто среднее между гауссовой и лоренцевой кривыми, все же в теории магнитного резонанса данная зависимость нашла широкое применение, поскольку позволяет описать большинство наблюдаемых экспериментальных особенностей, причем для самых разнообразных систем (Лоренцева линия в данном случае не может быть пороанализирована, поскольку для нее соответствующие интегралы расходятся).

Ниже приведены найденные значения потерь второго и четвертого моментов линии Гаусса (в процентах) в зависимости от отношения сигнал/шум.

Таблица 1

Потери второго и четвертого моментов гауссовой линии ЯМР

Сигнал/шум	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Потери второго момента, %	20	11	8	6	5	4	3	3	2	2
Потери четвертого момента, %	47	31	24	19	17	15	13	12	11	10

2. ГАУСС-МАРКОВСКИЙ ПРОЦЕСС

Если наряду с гауссовым распределением случайных полей на ядрах в образце имеет место молекулярная подвижность марковского характера, то спад свободной прецессии (ССП) принимает вид [3]:

$$G(t) = \exp \left[-\frac{1}{2} \overline{M_2} t^2 - \Delta M_2 \tau_c^2 \left(\exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) - 1 + \frac{t}{\tau_c} \right) \right],$$

где $\Delta M_2 = M_2 - \overline{M_2}$ – разность вторых моментов линий поглощения в жесткой и быстроподвижной решетках, τ_c – время корреляции (т.е. среднее время жизни системы в данной решеточной конфигурации). В данном случае спектр поглощения можно получить лишь численно, произведя Фурье-преобразование СПП.

При наличии внутренней подвижности происходит сужение видимой части линии поглощения и одновременно возрастание амплитуды сигнала на «хвостах». Последнее приводит к росту потерь моментов спектра ЯМР. В качестве безразмерного параметра, характеризующего интенсивность внутренней молекулярной подвижности, выбрана величина $\Delta M_2 \tau_c^2$. Ниже приведены данные для трех типичных случаев – началу движений ($\Delta M_2 \tau_c^2 = 50$), переходной области ($\Delta M_2 \tau_c^2 = 3$), интенсивных движений ($\Delta M_2 \tau_c^2 = 0,1$).

Таблица 2

Потери второго момента в гаусс-марковском процессе

Сигнал/шум	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Потери в %, начало движений	26	17	13	11	10	9	8	8	7	7
Потери в %, переходная область	46	33	27	24	21	19	18	17	16	15
Потери в %, интенсивные движения	88	81	75	71	68	65	63	61	60	59

Что касается потерь четвертого момента, то даже для случая начала движений они составляют от 70% до 45% при отношениях сигнал/шум от 10 до 100 соответственно.

3. ДВУХСПИНОВАЯ СИСТЕМА С МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

ССП изолированной двухспиновой системы с диполь-дипольным взаимодействием очень прост [2]:

$$G(t) = \cos(\sqrt{M_2}t)$$

Межмолекулярное взаимодействие можно учесть феноменологически, добавив к данному выражению сомножитель вида $\exp(-\frac{1}{2}\overline{M_2}t^2)$, то есть представив ССП в виде [4]:

$$G(t) = \cos(\sqrt{M_2}t) \exp(-\frac{1}{2}\overline{M_2}t^2),$$

где $\overline{M_2}$ – второй момент линии, суженной интенсивной подвижностью. В данном случае потери второго момента для упомянутых выше трех типичных значениях безразмерного параметра имеют следующие значения (прочерк означает, что потери составляют менее 1%).

Таблица 3

Потери второго момента для двухспиновой системы с учетом межмолекулярного взаимодействия

Сигнал/шум	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Потери в %, начало движений	4	2	1	-	-	-	-	-	-	-
Потери в %, переходная область	7	4	3	2	2	1	1	1	-	-
Потери в %, интенсивные движения	20	11	8	6	5	4	4	3	3	3

Потери четвертого момента существенно больше, как следует из приводимой ниже таблицы.

Таблица 4

Потери четвертого момента для двухспиновой системы с учетом межмолекулярного взаимодействия

Сигнал/шум	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Потери в %, начало движений	7	4	3	2	2	1	1	1	-	-
Потери в %, переходная область	17	11	7	6	5	4	4	3	3	3
Потери в %, интенсивные движения	46	30	23	19	16	14	12	11	10	9

4. ДВУХСПИНОВАЯ СИСТЕМА, СОВЕРШАЮЩАЯ СЛУЧАЙНЫЕ ПРЫЖКИ МЕЖДУ ДВУМЯ РАВНОВЕСНЫМИ ПОЛОЖЕНИЯМИ

Данная задача, несмотря на очевидные усложнения, обусловленные учетом подвижности, решается в аналитическом виде [5]. При этом линия поглощения трансформируется от двух выраженных дублетов (в жестком случае) до существенно сглаженной кривой. Числовые данные близки к тем, что получены для двухспиновой системы с учетом межмолекулярного взаимодействия.

ВЫВОДЫ

1. Для всех рассмотренных систем потери второго момента в жесткой решетке и при отношениях сигнал/шум, характерных для современных экспериментальных установок (начиная с 50) не превышают 5%, что совершенно несущественно в структурных исследованиях кристаллов.
2. Потери четвертого момента при тех же условиях могут достигать в некоторых конкретных случаях 17%. Это обстоятельство необходимо учитывать, например, при использовании методов восстановления линии ЯМР по нескольким начальным моментам спектра.
3. При увеличении интенсивности внутренних молекулярных движений происходит резкое нарастание потерь, достигающее в типичных случаях нескольких десятков процентов.

Список литературы

1. Van-Vleck J.H. The dipolar broadening of magnetic resonance lines in crystals / Van-Vleck J.H. // Physical Review. – 1948. – v. 74, No. 5. – pp. 1163-1183.
2. Абрагам А. Ядерный магнетизм / Абрагам А. – М. : ИЛ, 1961. – 551 с.
3. Anderson P.W. Narrowing in Paramagnetic Resonance / Anderson P.W., Weiss P.R. // Reviews of Mod. Phys. – 1953. – v. 25, No. 1. – pp. 269-276.

4. Сергеев Н.А. Форма сигнала солид-эха в ЯМР твердого тела / Сергеев Н.А., Сапига А.В., Рябушкин Д.С. // Физика твердого тела. – 1989. – т. 31, № 2. – с. 294-296.
5. Рябушкин Д.С. Двухимпульсное эхо в динамических молекулах воды / Рябушкин Д.С., Нерода Е.С. // Ученые записки ТНУ им. В.И.Вернадского, серия «Физико-математические науки». – 2010. – т. 23(62), № 1, ч. 1. – с. 94-97.

Рябушкін Д.С. Точність обчислення моментів лінії ЯМР у твердих тілах / Рябушкін Д.С. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 125-130.

Теоретично досліджене питання про точність визначення моментів лінії поглинання ядерного магнітного резонансу в а) системах з гауссовим розподілом випадкових полів на ядрах (у твердому випадку й при наявності рухливості марковского характеру), б) двухспиновых системах з урахуванням міжмолекулярної взаємодії, в) двухспиновых системах з випадковими перескоками між двома положеннями рівноваги. Для всіх випадків визначена залежність частки другого й четвертого моментів, що губиться в шумах, від відношення сигнал/шум.

Ключові слова: магнітний резонанс, моменти лінії ЯМР, двухспиновая система, рухливість, марковский характер, диполь-дипольна взаємодія.

Ryabushkin D.S. Accuracy of evaluation of NMR line moments in solids / Ryabushkin D.S. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 125-130.

Theoretically investigated the question on accuracy of definition of the moments of a line of absorption of nuclear magnetic resonance in systems a) with Gauss distribution of casual fields on nuclei (in a rigid case and in presence of mobility of Markov character), b) two-spin systems with taking into account of the intermolecular interaction, c) the two-spin systems making casual jumps between two positions of balance. For all cases dependence of a share of the second and fourth moments, lost in noise, on the relation signal/noise is defined.

Keywords: magnetic resonance, moments of a line of nuclear magnetic resonance, two-spin system, mobility, Markov character, a dipole-dipolar interaction.

Поступила в редакцию 02.11.2010 г.

УДК 537.86

ЭФФЕКТИВНАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ТОНКОЙ ПЛАСТИНЫ В ПОЛЕ ПРОДОЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ

Пономаренко В.И., Попов В.В., Скальская О.Л.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: slavapop@gmail.com*

Решена задача рассеяния в прямоугольном волноводе, содержащем тонкую диэлектрическую пластину. Показано, что диэлектрическую пластину можно рассматривать как предельно тонкий слой с эффективной диэлектрической проницаемостью, описываемой дельта-функцией Дирака. Получена связь между параметрами реальной пластины и эффективной диэлектрической проницаемостью предельно тонкого слоя.

Ключевые слова: диэлектрическая пластина, задача рассеяния, прямоугольный волновод.

ВВЕДЕНИЕ

Тонкие пластины диэлектрика с высокими значениями относительной комплексной диэлектрической проницаемости ε_r , $|\varepsilon_r| \geq 100$, именуемые далее диэлектрическими лентами (ДЛ), выполненные в виде электропроводящей бумаги либо получаемые методом напыления в вакууме, находят применение, в частности, в радиопоглощающих структурах [1, 2]. Для решения задач дифракции на таких структурах в случае, когда электромагнитная волна распространяется вдоль слоев, с целью упрощения решения в [3] предложено рассматривать ДЛ как области с эффективной диэлектрической проницаемостью, задаваемой дельта-функцией Дирака:

$$\varepsilon_e = \varepsilon_0 \left[1 + \varepsilon \delta \left(\frac{x - x_0}{a} \right) \right], \quad (1)$$

где x – координата в нормальном к ДЛ направлении, x_0 – положение средней плоскости ДЛ, ε_0 – диэлектрическая проницаемость в вакууме, a – параметр, имеющий размерность длины, введенный для придания безразмерности аргументу дельта-функции. Величину ε предложено вычислять из условия равенства статических поверхностных сопротивлений реальной ДЛ и сопоставляемого ей предельно тонкого слоя, именуемого далее дельта-плоскостью (ДП). Последнее, однако, допустимо лишь в случае, когда толщина ДЛ мала по сравнению с глубиной скин-слоя в ее материале, а также в предположении малости вещественной части ε_r по сравнению с мнимой, что выполняется не всегда (в частности, не имеет места в электропроводящей бумаге). Целью настоящей работы является вычисление на основе решения волноводной задачи рассеяния входящего в (1) параметра ε без

указанных ограничений, а также оценка точности метода расчета рассеянного поля, основанного на замене ДЛ ее предельно тонким аналогом ДП.

1. ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ В ПРЯМОУГОЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ, РАЗДЕЛЕННОМ ДЕЛЬТА - ПЛОСКОСТЬЮ

Дельта-плоскость имеет координату x_0 по оси y прямоугольного волновода, рис. 1, и занимает область II ($z > 0$). В области I ($z < 0$) распространяется в положительном направлении оси z волна основного типа H_{10} .

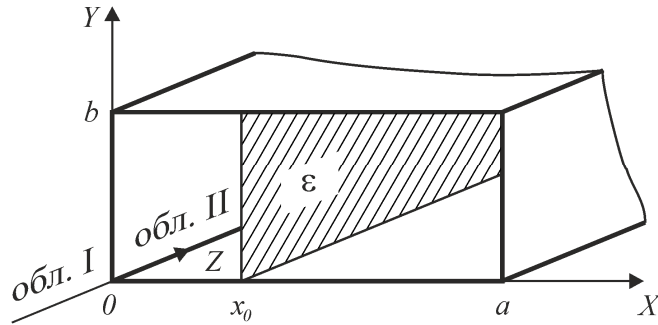


Рис. 1. Прямоугольный волновод, разделенный бесконечной дельта-плоскостью.

Ввиду однородности структуры и поля в волноводе вдоль оси y рассеянное поле в областях I, II является суперпозицией Н-мод этих областей:

$$E_{ly} = \sum_{m=1}^{\infty} (\delta_{m,1} e^{i\gamma_m z} + A_m e^{-i\gamma_m z}) \sin \frac{m\pi}{a} x, \quad \gamma_m = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2}, \quad (2)$$

$$E_{IIy} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \psi_n(x) e^{i\Gamma_n z}, \quad (3)$$

где λ – длина волны в вакууме. Система функций $\{\psi_n(x)\}$ задаёт распределение мод области II по оси X . Функции $\psi_n(x)$ и постоянные распространения Γ_n в области II определяются путём подстановки n -го члена ряда (2) в уравнение Гельмгольца. Получим:

$$\begin{cases} \psi_n''(x) + k_0^2 \nu^2 \psi_n(x) + k_0^2 \varepsilon \psi(b) \delta\left(\frac{x-b}{a}\right) = 0, \\ \psi_n(0) = \psi_n(a) = 0, \quad \nu_n^2 = 1 - \Gamma_n^2 \end{cases} \quad (4)$$

Решение уравнения (4) аналогично нахождению функции Грина краевой задачи [4]:

$$\psi(x) = \frac{\pi \kappa \varepsilon \psi(b)}{\nu \sin(\pi \kappa \nu)} \times \begin{cases} \sin\left(\pi \kappa \frac{b}{a} \nu\right) \sin\left[\pi \kappa \nu \left(1 - \frac{x}{a}\right)\right], & x \geq b, \\ \sin\left(\pi \kappa \frac{c}{a} \nu\right) \sin\left(\pi \kappa \frac{x}{a} \nu\right), & x \leq b. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь обозначено $\kappa = 2a/\lambda$, $c = a - b$. Полагая в (5) $x = b$, получим дисперсионное уравнение, определяющее величины $\Gamma_n^2 = 1 - \nu_n^2$:

$$\frac{\sin\left(\pi \kappa \frac{c}{a} \nu\right) \sin\left(\pi \kappa \frac{b}{a} \nu\right)}{\nu \sin(\pi \kappa \nu)} = \frac{1}{\pi \kappa \varepsilon}. \quad (6)$$

Налагая условие непрерывности компонент электрического и магнитного полей на границе $z = 0$ областей I и II, получим пару функциональных уравнений, проектируя которые на ортогональную систему функции $\psi_n(x)$, получим бесконечную СЛАУ относительно неизвестных амплитуд $\{A_n\}$, $\{B_n\}$, состоящую из двух подсистем. После исключения величин $\{B\}$, получим следующую СЛАУ:

$$\frac{S_1}{\gamma_1 + \Gamma_n} = \sum S_m A_m \frac{1}{\gamma_m - \Gamma_n}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Система вида (7) допускает аналитическое решение методом прямого обращения [5]. Получим

$$A_m = -\frac{\sin(\pi \varepsilon / \alpha)}{\sin(m \pi \varepsilon / \alpha)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\Gamma_n - \gamma_m}{\Gamma_n + \gamma_1} \prod_{n=1}^{\infty (m)} \frac{\gamma_n + \gamma_1}{\gamma_n - \gamma_m} \quad (8)$$

Сходимость входящих в (8) бесконечных произведений доказывается с учетом асимптотического поведения Γ_n , γ_n при $n \rightarrow \infty$.

2. ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ В ПРЯМОУГОЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ, РАЗДЕЛЕННОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНОЙ

Пластина толщиной τ с диэлектрической проницаемостью, ε_r , расположена в области II волновода ($z > 0$), занимая в направлении оси x область $x_0 - \frac{\tau}{2} \leq x \leq x_0 + \frac{\tau}{2}$. Решение задачи о собственных Н-модах волновода с диэлектрической пластиной приведено в [6]. Постоянные распространения определяются из трансцендентного уравнения более сложного по сравнению с (6) вида, которое при выполнении условия $\tau \ll a$ переходит в дисперсионное уравнение (6), если положить:

$$\varepsilon = \frac{\lambda}{2\pi\alpha} \sqrt{\varepsilon_r} \operatorname{tg} \left(\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_r} \tau \right). \quad (9)$$

Задача рассеяния волны основного типа на пластине конечной толщины сводится методом сшивания, аналогично полученному выше решению задачи рассеяния на дельта-плоскости, к решению бесконечной СЛАУ, определяющей амплитуды рассеянного поля в области I. Последняя, в отличие от СЛАУ (7), не имеет аналитического решения, в связи с чем эта система решалась численно методом редукции. Численные расчеты проводились при $\frac{\tau}{\lambda} = 0.01$ в диапазоне длин волн, соответствующем одномодовому режиму волновода. Вещественная и мнимая части ε_r изменялись в пределах от 1 до 10^3 . Сравнение значений амплитуды A_1 рассеянной моды основного типа, имеющей смысл коэффициента отражения, рассчитанной для пластины конечной толщины, со значениями, вычисленными по формуле (8), с подстановкой (9), показало, что разница не превышает 0.02, как для действительной, так и для мнимой частей коэффициента отражения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе решения задачи рассеяния волны основного типа в прямоугольном волноводе, содержащем тонкую диэлектрическую пластину, показано, что последнюю можно рассматривать как предельно тонкий слой с эффективной диэлектрической проницаемостью, описываемой дельта-функцией Дирака. Получена связь между параметрами реальной пластины и эффективной диэлектрической проницаемостью предельно тонкого слоя. Показано, что замена реальной пластины предельно тонкой позволяет получить аналитическое решение задачи рассеяния.

Результаты настоящей работы могут быть использованы разработчиками радиопоглощающих покрытий для моделирования структур, содержащих тонкие пластины с высокой диэлектрической проницаемостью.

Список литературы

1. Suomin C. Novel Planar Electromagnetic Absorber Designs Using Genetic Algorithms / Suomin C., Daniel S.W., John L.V. // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 2006. – Vol. 54, No 6. – P. 1811-1817.
2. Costa F. Analysis and Design of Ultra Thin Electromagnetic Absorbers Comprising Resistively Loaded High Impedance Surfaces / Costa F., Monorchio A., Manara G. // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 2010. – Vol. 58, No 5. – P. 1551-1558.
3. Пономаренко В.И. Расчёт коэффициента отражения электромагнитных волн шахтной структурой из проводящих полос / Пономаренко В.И., Мировицкий Д.И., Бугадян И.Ф. // Радиотехника. – 1984. – Т. 39, № II – С. 68 – 71.
4. Арсенин В.Я. Математическая физика. Основные уравнения и специальные функции / Арсенин В.Я. – М.: Наука, 1966. – 367 с.
5. Митра Р. Аналитические методы теории волноводов / Митра Р., Ли С. – М.: Мир, 1974. – 324 с.
6. Левин Л. Теория волноводов: Монография / Левин Л. – М.: Радио и Связь, 1981. – 310 с.

Пономаренко В.І. Ефективна діелектрична проникність тонкої пластини в полі поздовжньої електромагнітної хвилі / Пономаренко В.І., Попов В.В., Скальська О.Л. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 131-135.

Розв'язано задачу розсіювання в прямокутному хвилеводі, що містить тонку діелектричну пластину. Показано, що діелектричну пластину можна розглядати як гранично тонкий шар з ефективною діелектричною проникністю, описуваної дельта-функцією Дірака. Отримано зв'язок між параметрами реальної пластини і ефективною діелектричною проникністю гранично тонкого шару.

Ключові слова: діелектрична пластинка, задача розсіювання, прямокутний хвилевод.

Ponomarenko V.I. Effective dielectric permittivity of thin strip in the field of longitudinal electromagnetic wave / Ponomarenko V.I., Popov V.V., Skalskaya O.L. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 131-135.

We solved the scattering problem in a rectangular waveguide with a thin dielectric strip. It has been shown, that the dielectric strip may be considered as an infinite thin layer with the effective permittivity in a form of Dirac delta-function. A relation between parameters of the real strip and the effective permittivity of the infinitely thin layer has been established.

Keywords: dielectric strip, scattering problem, rectangular waveguide.

Поступила в редакцію 03.11.2010 г.

УДК 533.924; 621.039.066

ВЛИЯНИЕ БОМБАРДИРОВКИ ИОНАМИ ДЕЙТЕРИЯ НА МОРФОЛОГИЮ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ РЕКРИСТАЛЛИЗОВАННОГО ВОЛЬФРАМА

Беляева А.И., Галуза А.А.¹, Савченко А.А., Слатин К.А.

*Национальный Технический Университет “Харьковский Политехнический Институт”,
Харьков, Украина*

¹Институт электрофизики и радиационных технологий НАНУ, Харьков, Украина

E-mail: belyaeva@kharkov.com

В работе исследуется влияние бомбардировки ионами дейтерия на структуру и оптические свойства поверхности образцов зеркал из рекристаллизованного вольфрама. Облучение проводилось при различной температуре образцов в интервале 300÷700 К. Основными методиками были эллипсометрия, рефлектометрия и микроинтерферометрия. Обнаружено, что температурная зависимость оптических свойств облученного рекристаллизованного W имеет аномальную особенность в окрестности температуры 535 К. Показано, что при этой температуре значения коэффициента отражения, измеренные рефлектометрией, и рассчитанные по данным эллипсометрии, качественно различаются. В работе предложена физическая модель обнаруженного эффекта.

Ключевые слова: рекристаллизованный вольфрам, дейтерий, блистеринг, оптические свойства, рефлектометрия, эллипсометрия.

ВВЕДЕНИЕ

Благодаря ряду уникальных свойств, таких, как малый коэффициент распыления и высокая температура плавления, вольфрам (W) в настоящее время является перспективным материалом для элементов, непосредственно обращенных к плазме в термоядерных реакторах, таких как ITER [1] и DEMO [2]. В частности, W рассматривается как перспективный материал для внутрикорпусных зеркал оптической диагностики плазмы в ITER [3].

Как элемент, непосредственно обращенный к плазме, W зеркало будет подвержено бомбардировке сильным потоком низкоэнергетических частиц дейтерия и трития, включающих гелиевую золу. Поэтому следует ожидать изменения оптических свойств W зеркала после длительного воздействия на него водородно-гелиевой плазмой. Влияние облучения низкоэнергетическими ионами водорода и гелия на оптический коэффициент отражения W зеркал исследуется уже на протяжении ряда лет [4, 5]. Степень ухудшения коэффициента отражения была продемонстрирована в зависимости от типа ионов, температуры облучения, энергии ионов и ионного потока.

Одним из факторов, влияющих на оптические свойства W зеркал, является блистеринг. Блистеринг появляется на поверхности W при облучении ионами водородной плазмы с энергиями, много меньшими порога смещения [6, 7].

Была обнаружена температурная зависимость топографии поверхности

образцов рекристаллизованного W, подвергнутых облучению ионами D-плазмы с низкой энергией (38 эВ/D) и большим потоком (10^{22} D/м²) при флюенсе 10^{26} D/м²с [6, 7]. После воздействия плазмой в температурном диапазоне образца 320÷370 К на поверхности W формируются лишь редкие блистеры диаметром 0.5÷2 мкм (рис. 1а [7]). С ростом температуры плотность блистеров увеличивается, и после воздействия при $T = 520\div 570$ К наблюдается интенсивный блистеринг двух типов: большие плоские блистеры размером 10÷30 мкм и малые конусообразные, диаметр которых не превосходит единиц микрон (рис. 1б [7]). При $T = 600\div 700$ К наблюдаются лишь редкие блистеры вблизи границ зерен (рис. 1в [7]), а при $T > 700$ К блистеринг отсутствует.

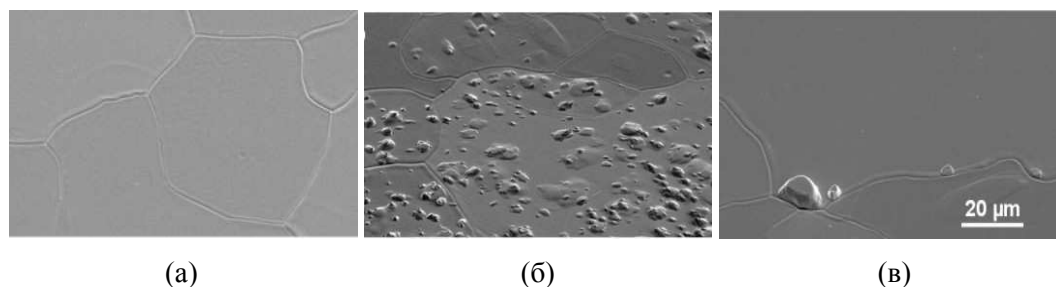


Рис. 1. SEM-фотографии рекристаллизованного W, облученного ионами чистой D плазмы (38 эВ/D) при температурах 330K (а), 535K (б) и 600K (в) до флюенса 10^{26} D/м² [7].

Настоящая работа посвящена изучению зависимости оптических свойств зеркал рекристаллизованного W, подвергнутых облучению большим потоком низкоэнергетических ионов D плазмы, от температуры образцов при облучении.

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МЕТОДИКА

Образцы зеркал представляли собой пластины поликристаллического W чистотой 99,99% (A.L.M.T. Corp., Japan), размером $10\times 10\times 2$ мм³, полностью рекристаллизованные в атмосфере водорода при $T=2070$ К после порезки и полировки. Для создания пучка плазмы с параметрами, близкими к параметрам плазмы в диверторе ITER, использовался линейный генератор плазмы (JAEA, Tokai, Japan) [8]. Для создания чистой D плазмы в секцию возбуждения закачивался газ D₂ под давлением ~1 Па. При этом был получен плазменный пучок, обогащенный D₂⁺ (~80%). К образцу прикладывалось напряжение смещения -80 В, создающее падающий поток с энергией 38 эВ/D (с учетом потенциала плазмы ~-4 В). Поток и флюенс ионов D составляли 10^{22} D/м²с и 10^{26} D/м², соответственно.

В работе принято следующее определение образцов: буква W (вольфрам) за которой следует число, соответствующее температуре образца при облучении в кельвинах; 0 соответствует необлученному образцу. Т.е., W320 соответствует образцу вольфрама, облученному при $T=320$ К, а W0 - необлученному.

После поступления в Харьков все образцы были подвергнуты очистке ионами

плазмы дейтерия ($E_i \approx 60$ эВ, флюенс $\sim 2.5 \cdot 10^{23}$ ион/м²), полученной в условиях электронно-циклотронного резонанса в установке DSM-2 [9]. Эта процедура была проведена для очистки образцов от загрязнений, которые могли образоваться при хранении образцов на воздухе после окончания экспериментов в Японии по воздействию на них большого флюенса ионов дейтериевой плазмы.

Оптические измерения включали в себя: (1) прямые измерения коэффициента зеркального отражения (КО) $R(\lambda)$ в интервале длин волн 220÷650 нм при нормальном падении света и (2) измерение показателя преломления n и коэффициента поглощения k с помощью эллипсометрической методики [10]. Измерения эллипсометрических параметров (Ψ и Δ) выполнялись при различных углах падения на длине волны $\lambda = 633$ нм [11].

Микрофотографии поверхности образцов были получены с помощью микроскопов ММИ-2 (малое увеличение) и МИИ-4 (большое увеличение). Интерферограммы получены с помощью интерферометрического комплекса [12].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ

2.1. Данные микроскопии и микроинтерферометрии

Получены микрофотографии исследуемых образцов вольфрама. На рис. 2а и 2б с малым увеличением даны фотографии поверхности образцов W535 и W600, соответственно. В случае образца W535 (рис. 2а) облученная область представляет собой светлый центральный круг, который четко виден на микрофотографии, где облученная область контрастно отличается от более темной не облученной. На остальных образцах (W695, W405, W483, W600, W320) она видна лишь при некоторых углах падения света. В качестве примера на рис. 2б облученная область образца W600 обведена пунктирной линией. Поскольку внешне образцы (W695, W405, W483, W600, W320) не отличаются друг от друга, в дальнейшем все примеры будут приводиться для образца W600.

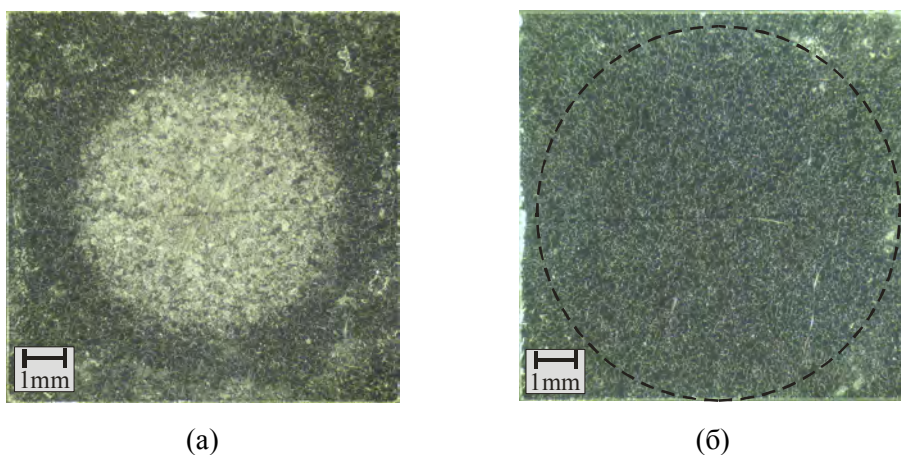


Рис. 2. Общий вид поверхности образцов W535 (а) и W600 (б).

Микрофотография показала, что облученная и необлученная области представляют собой поверхность, разбитую на зерна произвольной формы с размерами 20-250 мкм, что количественно совпадает с результатами [6]. На рис. 3а даны примеры соседствующих зерен малого (А) и большого (В) размеров. Методом интерферометрии выявлено, что зерна всех необлученных образцов имеют зеркальную поверхность, о чем свидетельствует интерференционная картина чистой поверхности образца (рис. 3б), состоящая из параллельных полос.

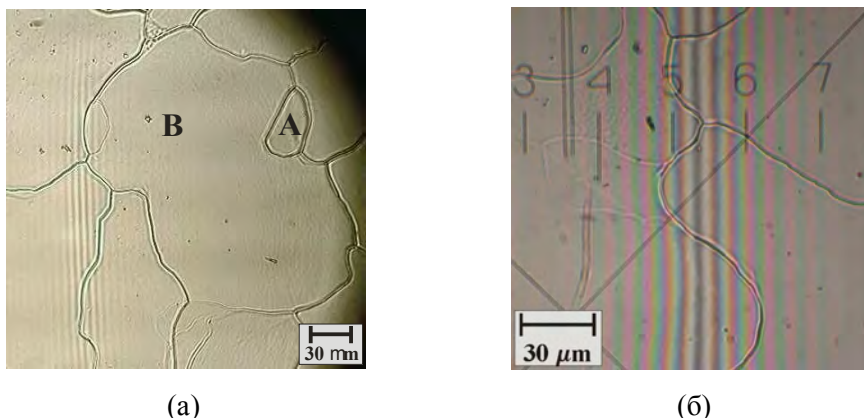


Рис. 3. Структура поверхности необлученных образцов вольфрама: (а) – микрофотография поверхности (А – малое зерно, В – зерно большого размера), (б) – интерференционная картина.

Границы между зернами очень четкие. На рис. 4а приведена интерференционная картина поверхности образца вольфрама в области границы двух зерен. Интерференционные полосы, попадая на границу между зернами, искривляются (пунктирная кривая на рис. 4а), что служит индикатором изменения высоты поверхности. Анализ позволил оценить высоты возникающих при этом ступенек, размеры которых составляют $1.3 \div 5.3$ мкм. С помощью микроинтерферометрии была определена форма границ между зернами. На рис. 4б приведено графическое пояснение хода интерференционного минимума на рис. 4а - формы границы между зернами с характерными размерами. На границе зерен поверхность плавно возвышается с обеих сторон, затем наблюдается резкий спад между «холмами», нижняя точка (между холмами) находится на одном уровне с поверхностью образца.

При микрофотографировании был обнаружен блистеринг на облученной поверхности образцов и выявлена температурная зависимость его появления. При температуре 320К на поверхности W наблюдается незначительный блистеринг диаметром $0.5 \div 2$ мкм (рис. 5а) в соответствии с данными [7]. С увеличением температуры на поверхности образцов увеличивается блистеринг. На рис. 5б приведена микрофотография образца W405, на которой заметно, что количество блистеров увеличилось по сравнению с образцом (W320), облученным при более низкой температуре (рис. 5а).

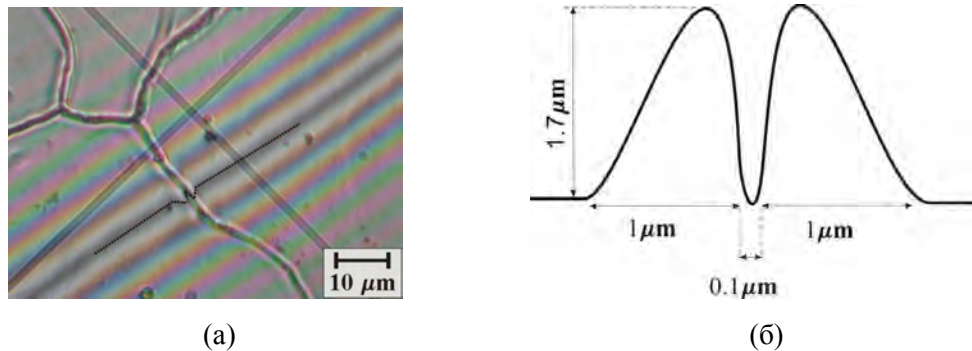


Рис. 4. Структура поверхности необлученных образцов W: (а) – интерференционная картина на границе зерен (пунктиром показан ход интерференционного минимума), (б) – структура и параметры межзеренной границы.

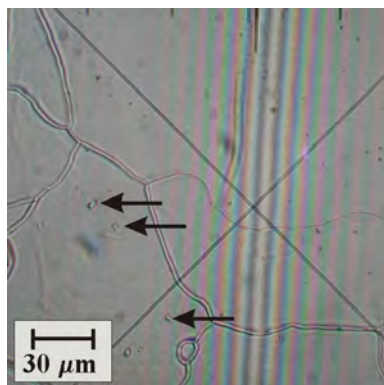
При дальнейшем увеличении температуры плотность блистеров различной формы на поверхности образца увеличивается. Об этом свидетельствует микрофотография образца W483 (рис. 5в). Встречаются как конические (отмечены одинарной стрелкой), так и плоские (отмечены двойной стрелкой) блистеры. Максимум плотности блистеров наблюдается при температуре 535K (рис. 5г).

Дальнейший рост температуры приводит к уменьшению блистеринга, что видно из микрофотографий образцов W600 и W695 (рис. 5д и 5е, соответственно).

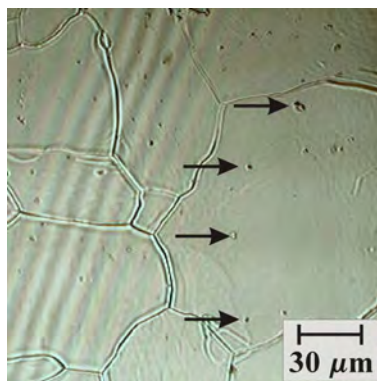
$T \sim 535K$ – особая область температур, которая характеризуется значительным проявлением блистеринга, вследствие чего морфология поверхности образца W535 была изучена более тщательно. Облученная область каждого зерна образца W535 покрыта блистерами, плотность которых в различных зернах различна, что, в соответствии с литературными данными [6], связано с различной ориентацией зерен. На квадрат со стороной 30 μm приходится от 3 до 20 блистеров. На рис. 6 стрелками отмечены области с высокой (А) и низкой (В) плотностью блистеров.

Блистеры можно разделить на два вида: плоские и конические. Плоские – имеют в основном неправильную круглую или овальную форму и характерные размеры $d \sim 4.5 \div 18$ мкм. Характерные высоты плоских блистеров составляют $7 \div 12$ мкм. На рис. 7 двойной черной стрелкой обозначен плоский большой блистер диаметром 20 мкм. По отклонению интерференционного максимума можно оценить величину возвышения плоского блистера над поверхностью зерна ($h \sim 8.5$ мкм). Рядом с ним, в этом же зерне, имеется подобный блистер меньшего размера. Конические блистеры, как правило, имеют меньший размер (диаметр $1 \div 5$ мкм).

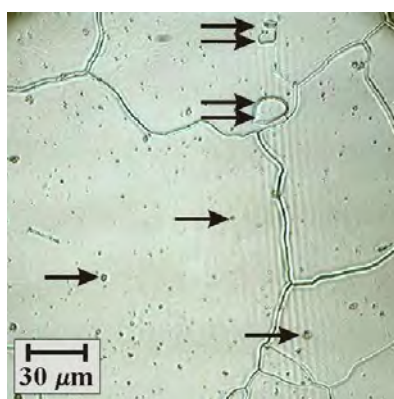
Замечено, что в пределах одного зерна появляются в основном либо только конические блистеры, либо – только плоские. По-видимому, это зерна различной ориентации [6]. Предварительные результаты EBSD-дифракции обратного рассеяния электронов показали, что конические блистеры малых размеров появляются только на поверхности с ориентацией $\langle 111 \rangle$ [13].



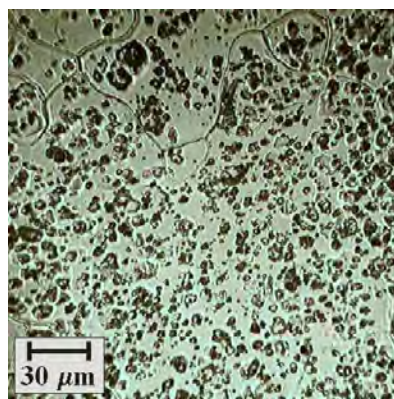
(а)



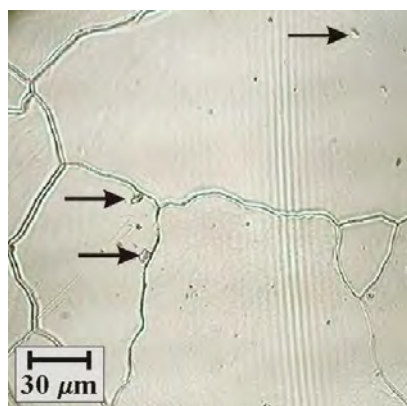
(б)



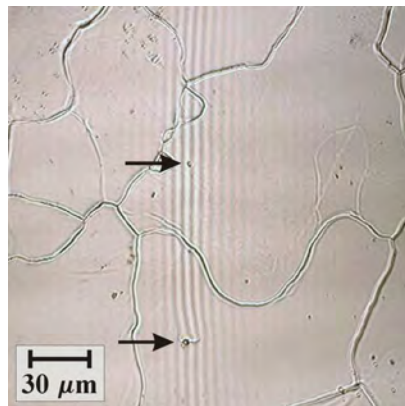
(в)



(г)



(д)



(е)

Рис. 5. Структура поверхности образцов W330 (а), W405 (б), W483 (в), W535 (г), W600 (д), W695 (е).

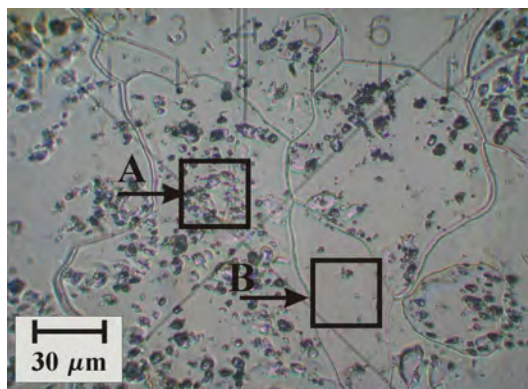


Рис. 6. Поверхность образца W535.

Микрофотография соседних зерен с высокой (область А) и низкой (область В) плотностью блистеринга.

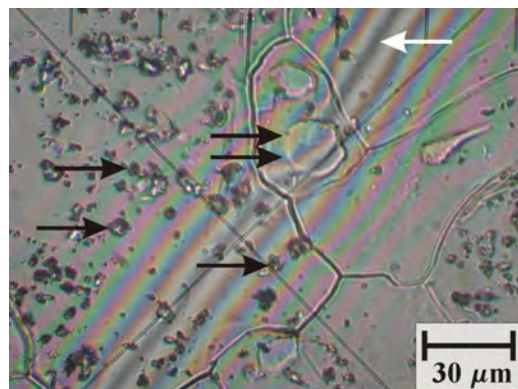


Рис. 7. Поверхность образца W535.

Интерференционная картина в области конических (указаны одинарной черной стрелкой) и плоских (указаны двойной черной стрелкой) блистеров.

2.2. Оптические и эллипсометрические данные

На рис. 8 приведены экспериментальные зависимости величин Ψ и Δ для исследуемых облученных образцов и образца W0 (с целью получения данных о начальном состоянии образцов) от угла падения зондирующего излучения.

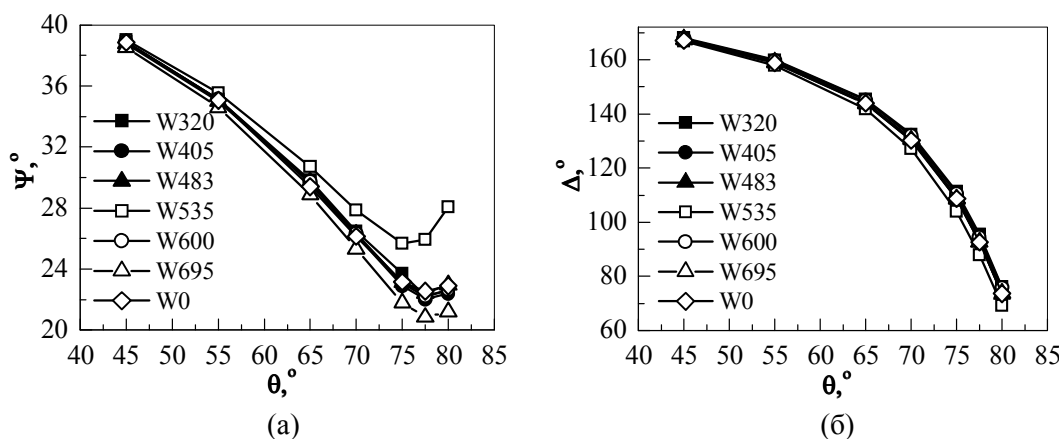


Рис. 8. Угловые зависимости эллипсометрических параметров Ψ (а) и Δ (б) исследуемых образцов.

Видно, что полученные угловые зависимости Ψ и Δ практически совпадают для образцов W320, W405, W483, W600, W695 и W0. Значение Δ для образца W695 совпадает со значением Δ других образцов, но параметр Ψ несколько отличается. Образец W535 значительно выделяется по обоим параметрам. Более детально эти зависимости обсуждаются ниже.

Отличие образца зеркала W535 заметно при сравнении температурных зависимостей главного угла (рис. 9). Главный угол – это угол падения, при котором $\Delta=90^\circ$. Значение главного угла составляет $78^\circ \pm 0.2^\circ$ для всех образцов, кроме W535, для которого главный угол - 77.15° .

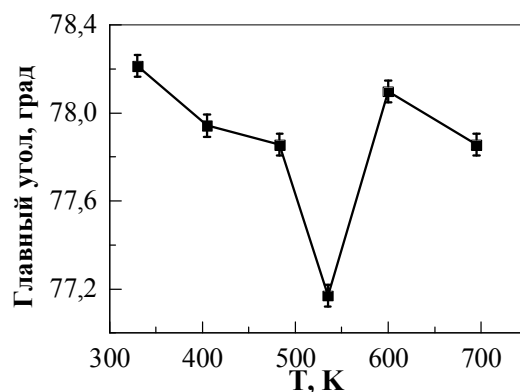


Рис. 9. Зависимость главного угла от температуры образца при облучении.

Подобное отличие образца W535 наблюдается также для оптических параметров n и k (рис. 10а): n падает, а k возрастает. С использованием этих значений n и k был рассчитан коэффициент нормального отражения R (рис. 10б). Необходимо обратить внимание на качественное отличие результатов прямых измерений R для W535 (R падает) и расчетов по данным эллипсометрии (R возрастает). Для остальных образцов результаты практически совпадают.

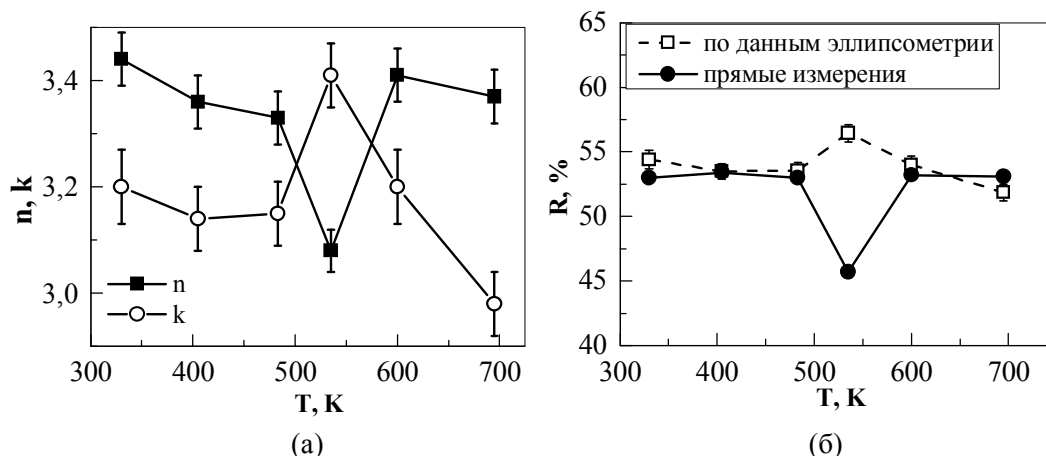


Рис. 10. Зависимости оптических констант n и k образцов W от температуры при облучении (а); сравнение прямых измерений коэффициента отражения R с рассчитанными по данным эллипсометрии при облучении при различных температурах (б).

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Проведенные исследования (рис. 5) демонстрируют зависимость блистеринга от ориентации зерен, т.е. некоторые зерна почти не имеют блистеров, в то время как остальные почти полностью покрыты блистерами. Это связано с тем, что зерна с ориентацией (111) более подвержены блистерингу, чем зерна других ориентаций [7]. Экспериментальные условия [7] достаточно близки к условиям нашего эксперимента. Вполне вероятно, что оптические свойства гладких участков этих образцов отличаются от аналогичных свойств поверхности W с блистерингом.

Рассмотрим более детально эллипсометрические экспериментальные данные. На рис. 11 приведены угловые зависимости величин $\delta\Psi$ и $\delta\Delta$, характеризующих изменения эллипсометрических параметров Ψ и Δ исследуемых образцов в результате облучения при разных температурах относительно этих же параметров для необлученного образца W0. Величины $\delta\Psi$ и $\delta\Delta$ вычислялись по соотношениям:

$$\delta\Psi(\theta) = \frac{\Psi(\theta) - \Psi_{W0}(\theta)}{\Psi_{W0}(\theta)} \cdot 100\%, \quad \delta\Delta(\theta) = \frac{\Delta(\theta) - \Delta_{W0}(\theta)}{\Delta_{W0}(\theta)} \cdot 100\%,$$

где Ψ_{W0} и Δ_{W0} – значения Ψ и Δ для необлученного образца W0.

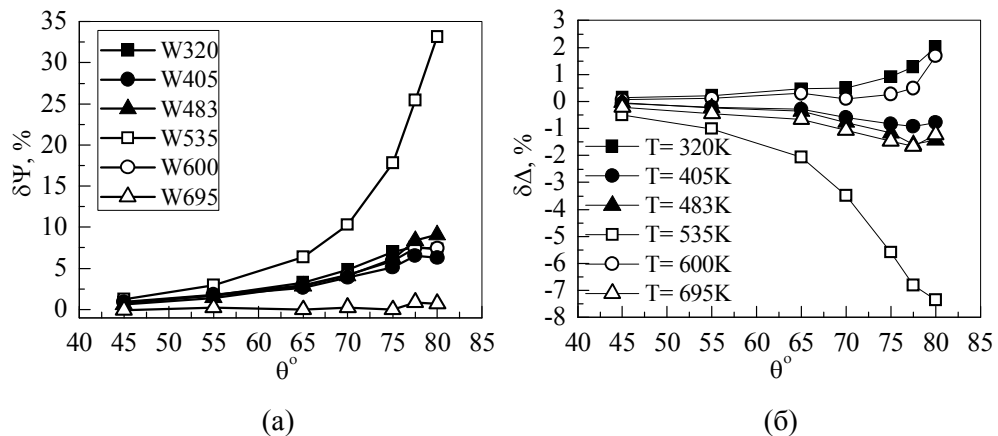


Рис. 11. Угловые зависимости относительных изменений эллипсометрических параметров Ψ (а) и Δ (б) ($\delta\Psi$ и $\delta\Delta$, соответственно) исследуемых образцов в результате облучения при разных температурах.

Видно, что по параметру Ψ (рис. 11а) образцы разбились на 3 четко выраженные группы: в первую группу входят образцы W320, W405, W483 и W600 (среди которых разброс не превосходит 3% даже для самых чувствительных углов), отличающиеся от W0 на 7÷10% в области больших углов. Образцы этой группы в нашей задаче можно считать одинаковыми. Во вторую группу входит один образец W535, который отличается от первой группы и W0 на десятки процентов. Третья группа состоит из образца W695, характеристики которого практически совпадают с W0. Т.е., облучение при максимальной температуре привело к существенно

меньшим изменениям, чем облучение при более низких температурах. Для параметра Δ (рис. 116) только образец W535 сильно отличается от W0; все остальные образцы отличаются друг от друга и от W0 не более, чем на 2% даже для самых чувствительных углов.

В целом можно сказать, что параметр Ψ более чувствителен к облучению, чем Δ (у которого изменения даже для W535 не превосходят 8% по сравнению с 35% у Ψ). Это может свидетельствовать в пользу развития шероховатости, связанной с развитием блистеринга, у W320, W405, W483 и W600, для которых изменения касаются только Ψ , поскольку именно Ψ в первую очередь реагирует на появление шероховатости.

Совпадение угловых зависимостей Ψ и Δ для необлученного образца (W0) и облученного при 695K (W695) свидетельствует о том, что облучение при высоких температурах практически не влияет на состояние поверхности W под влиянием дейтериевой плазмы. Не удивительно, что при $T \geq 700\text{K}$ блистеринг отсутствует. Этот результат находится в соответствии с существующим в настоящее время модельным представлением о взаимодействии дейтериевой плазмы с поверхностью вольфрама в интервале температур 300÷700K.

При воздействии пучка низкоэнергетической плазмы с высоким потоком ($\geq 10^{21}\text{D}/\text{m}^2$) в зоне ионной имплантации вольфрама (на глубине нескольких нанометров) возникает сильное поле сжимающего напряжения. При этом концентрация дейтерия в междоузлиях определяется потоком ионов. При повышении температуры облучения на границе зерен генерируются вакансии, затем вакансионные кластеры, которые являются зародышами образования газонаполненных пузырей. При $T \sim 480\div 500\text{K}$ увеличивается пластичность W, что определяет возможность сброса накопленных напряжений благодаря тому, что образовавшиеся пузыри выдавливают на поверхность вдоль осей скольжения объем вольфрама, сравнимый с объемом полости на границе зерна. Реализация высокого уровня пластичности возможна при наличии двух факторов: поля напряжений и высокой концентрации дейтерия в междоузельных позициях. В этом механизме определяющую роль играют границы между зернами, сформированные в процессе рекристаллизации. Как показали наши исследования, для нерекристаллизованного W блистеринг в данном диапазоне температур не наблюдался.

Температура, при которой происходит десорбция дейтерия, изначально находившего в полостях в виде молекул, составляет 500-600K. С повышением температуры дейтерий не может накапливаться в виде молекул в вакансиях и вакансионных кластерах. Поэтому в условиях нашей плазмы для рекристаллизованного W блистеринг исчезает при $T \geq 700\text{K}$. При этих температурах вакансионные комплексы, формирующиеся в результате стресса, не могут трансформироваться в газонаполненные пузырьки с высоким давлением внутри. Дейтерий не может накапливаться в них в виде молекул. Поэтому нет движущей силы для выдавливания W на поверхность. Блистеринг не формируется и, соответственно, нет причин для модификации поверхности под влиянием облучения. Поэтому и нет воздействия облучения на оптические характеристики поверхности.

Теперь проанализируем качественное отличие между значениями КО, рассчитанными по данным эллипсометрии и измеренными рефлектотроном (рис. 10б). Эллипсометрия и рефлектотрометрия основаны на разных физических эффектах. В рефлектотрометрии зеркального отражения измеряется полная энергия, зеркально отраженная от образца. Соответственно, наличие незначительных дефектов поверхности может приводить к увеличению диффузной компоненты в отражении, и, следовательно, к падению коэффициента зеркального отражения. С другой стороны, эллипсометрия основана на исследовании изменения состояния поляризации зеркальной компоненты зондирующего излучения, которое не зависит от полной энергии падающей и отраженной волн, а зависит только от оптических констант поверхности. В результате, наличие рассеяния при отражении уменьшает энергетический коэффициент зеркального отражения, но в геометрическом приближении не влияет на состояние поляризации зеркальной компоненты, поскольку диффузная компонента не регистрируется.

Таким образом, наличие на поверхности макродефектов, рассеивающих падающее излучение, не влияет на эллипсометрические данные, а сами эти данные содержат информацию об оптических свойствах только тех участков поверхности, которые отражают зеркально.

В принципе, возможна ситуация, когда при развитом рельефе поверхности в результате сложных переотражений излучения существенная часть диффузной компоненты отразится под зеркальным углом (рис. 12а). Это приведет к тому, что отраженное излучение будет представлять собой суперпозицию нескольких лучей, которые из-за различных условий отражения будут иметь разные поляризации (лучи I и II на рис. 12а). В результате, поляризация регистрируемой волны будет иметь сложную структуру (фактически, имеет место деполяризация), которая не может быть проанализирована в рамках классической эллипсометрии, и не будет характеризовать оптические свойства поверхности. Если такая ситуация реализуется, отраженное излучение деполяризуется, и полного затемнения (при нулевом методе измерений) линейными поляризаторами не происходит [14].

При эллипсометрических измерениях образца W535 наблюдалось практически полное гашение отраженного излучения, что свидетельствует об отсутствии деполяризации и, следовательно, незначительности вклада излучения, рассеянного на дефектах, в эллипсометрические результаты. Таким образом, в случае образца W535 модель поверхности имеет вид, приведенный на рис. 12б.

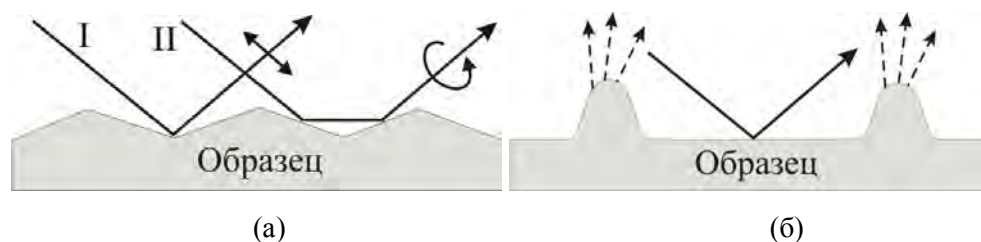


Рис. 12. Модели рассеяния света поверхностями с различной структурой: (а) – зеркальное отражение + деполяризация, (б) – зеркальное отражение + рассеяние без деполяризации зеркальной компоненты.

Наличие рассеяния, связанного с образованием блистеринга, приводит к падению коэффициента отражения, измеренного прямым способом (рис. 10б). Рост коэффициента отражения по данным эллипсометрии означает, что модификация поверхности заключается не только в изменении морфологии в результате блистеринга, но и в изменении электронной структуры той части поверхности, которая не затронута блистерингом; эллипсометрия определяет оптические константы именно этих участков поверхности.

Небольшое увеличение КО (рис. 10б), полученное по данным эллипсометрии, может быть связано либо с увеличением коэффициента поглощения k в результате облучения (рис. 10а), либо с формированием на поверхности W535 квази пленки. Для интерпретации данных эллипсометрии было рассмотрено несколько моделей поверхности. Оптимальной оказалась модель чистой поверхности. Это значит, что толщина модифицированного приповерхностного слоя превышает глубину проникновения света или что этот слой не имеет четких границ и поэтому не может быть определен как пленка.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Оптические свойства образцов зеркал из рекристаллизованного W были изучены после их экспонирования ионам дейтериевой плазмы при различной температуре образцов. Обнаружено резкое изменение коэффициента отражения при экспозиции образца с температурой $T=535$ K.

На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что на поверхности W535 имеют место два процесса: (1) появление блистеринга и (2) изменение электронной структуры поверхностного слоя. Тот факт, что модель чистой поверхности оказалась оптимальной, означает, что модифицированный слой толще, чем глубина проникновения света или что его границы размыты. Очевидно, что эллипсометрия и рефлектометрия эффективно дополняют друг друга при исследовании такого сложного явления, как блистеринг.

Список литературы

1. Key ITER plasma edge and plasma/material interaction issues / Federici G., Andrew P., Barabaschi P. et al. // J. Nucl. Mater. – 2003. – V. 313-316. – P. 11-22.
2. Design Study of Fusion DEMO Plant at JAERI / Tobita K., Nishio S., Enoda M. et al. // Fusion Eng. Des. – 2006. – V. 81. – P. 1151-1158.
3. First mirrors for diagnostic systems of ITER / Litnovsky A., Voitsenya V.S., Costley A. et al. // Nucl. Fusion – 2007. - V. 47. - P. 833.
4. Irradiation test of Mo- and W-mirrors for ITER by low energy deuterium ions / Sugie T., Kasai S., Taniguchi M. et al. // J. Nucl. Mater. – 2004. – V. 329-333. – P. 1481-1485.
5. In situ reflectivity of tungsten mirrors under helium plasma exposure / Sakaguchi W., Kajita S., Ohno N. et al. // J. Nucl. Mater. – 2009. – V. 390-391. – P. 1149-1152.
6. Subsurface morphology changes due to deuterium bombardment of tungsten / Lindig S., Balden M., Alimov V.Kh. et al. // Phys. Scr. – 2009. – T. 138. – 014040.
7. Surface morphology and deuterium retention in tungsten exposed to low-energy, high flux pure and helium-seeded deuterium plasmas / Alimov V.Kh., Shu W.M., Roth J. et al. // Phys. Scr. – 2009. – T. 138. – 014048.

8. Ion species control in high flux deuterium plasma beams produced by a linear plasma generator / Luo G.-N., Shu W.M., Nakamura H. et al. // Rev. Sci. Instrum. – 2004. – V. 75. – P. 4374-4378.
9. Orlinski D.V. First mirrors for diagnostic systems of an experimental fusion reactor. I. Simulation mirror tests under neutron and ion bombardment / Orlinski D.V., Voitsenya V.S., Vukolov K.Yu. // Plasma Dev. Oper. – 2007. – V. 15. – P. 33-75.
10. Optical properties of Al mirrors under impact of deuterium plasma ions in experiments simulating ITER conditions / Bardamid A.F., Belyaeva A.I., Davis J.W. et al. // J. Nucl. Mater. – 2009. – V. 393. – P. 473-480.
11. System for the Automation of a Cryogenic Spectral Ellipsometer / Galuza A.A., Slatin K.A., Belyaeva A.I. et al. // Instruments and Experimental Techniques. – 2003. – V. 46. – P. 477-479.
12. Программно-апаратний комплекс для мікроінтерферометричних досліджень / Беляєва А.И., Галуза А.А., Кудленко А.Д. и др. // Приборы и техника эксперимента. – 2008. – № 6. – С. 135-136.
13. Blister bursting and deuterium bursting release from tungsten exposed to high fluences of high flux and low energy deuterium plasma / Shu W.M., Wakai E., Yamanishi T. et al. // Nucl. Fusion. – 2007. – V. 47. – P. 201-209.
14. On the theory of the ellipsometry of an actual surface / Gainutdinov I.S., Nesmelov E.A., Shaimardanov R.G. et al. // J. Optical Technol. – 2008. – V. 75. – P. 41-43.

Беляєва А.И. Вплив бомбардування іонами дейтерію на морфологію та оптичні властивості поверхні рекристалізованого вольфраму / Беляєва А.И., Галуза О.А., Савченко А.О., Слатін К.О. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 136-148.

Робота присвячена дослідженню впливу бомбардування іонами дейтерію на структуру та оптичні властивості поверхні зразків дзеркал з рекристалізованого вольфраму. Опромінення проводились при різних температурах зразків у інтервалі 300÷700 К. Основними методиками були еліпсометрія, рефлектометрія й мікроінтерферометрія. Виявлено, що температурна залежність оптичних властивостей рекристалізованого W, що опромінено, має аномальну особливість біля температури 535 К. Показано, що при цій температурі значення коефіцієнту відбиття, отримані за допомогою рефлектометрії, та розраховані за даними еліпсометрії, якісно розрізняються. У роботі запропоновано фізична модель цього ефекту.

Ключевые слова: рекристалізований вольфрам, дейтерій, блістерінг, оптичні властивості, рефлектометрія, еліпсометрія.

Belyaeva A.I. Influence of deuterium ions bombardment on the morphology and optical properties of recrystallized tungsten / Belyaeva A.I., Galuza A.A., Savchenko A.A., Slatin A.A. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 136-148.

The paper is devoted to investigation of deuterium ions bombardment influence on the structure and optical properties of the surface of recrystallized. Irradiation was carried out under at different samples temperature within 300÷700 K interval. Ellipsometry, reflectometry and microinterferometry were used as the principle experimental techniques. It was found that the temperature dependencies of the irradiated recrystallized tungsten optical properties have anomalous peculiarity in the neighborhood of 535 K temperature. It is shown that values of reflection coefficient measured directly and calculated after ellipsometric data differ qualitatively near this temperature. A physical model of the found phenomenon is suggested.

Keywords: recrystallized tungsten, deuterium, blistering, optical properties, reflectometry, ellipsometry.

Поступила в редакцію 09.11.2010 г.

УДК 539.2

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ БОРАТА ЖЕЛЕЗА И ГЕМАТИТА

Болотин Д.Д., Максимова Е.М., Стругацкий М.Б.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

E-mail: solidstat@crimea.edu

Проанализированы различия в кристаллической и магнитной структуре ромбоэдрических антиферромагнитных кристаллов FeVO_3 и $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Показано, что рассмотренные структурные особенности могут определять наблюдаемые различия магнитных свойств бората железа и гематита.

Ключевые слова: борат железа, гематит, слабый ферромагнетик, магнитная структура, поверхностный магнетизм.

ВВЕДЕНИЕ

Монокристаллы бората железа, FeVO_3 , и гематита, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, относятся к ромбоэдрическим слабым ферромагнетикам одной и той же группы симметрии. Однако многие магнитные свойства этих кристаллов существенно различаются. Это, в частности, относится к точке Морина, которая существует только в гематите, и эффектам поверхностного магнетизма. В работе анализируются различия в кристаллической и магнитной структуре кристаллов и делается попытка связать такие различия с наблюдаемыми различиями в магнитных свойствах.

1. ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ FeVO_3 И $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$

Гематит $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и борат железа FeVO_3 являются представителями кристаллов с пространственной формулой симметрии $R\bar{3}c\text{-}D_{3d}^6$. Точечная группа симметрии кристаллической структуры – $\bar{3}m\text{-}D_{3d}$, однако борат железа изоструктурен кальциту, CaCO_3 , а гематит – корунду, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Данные кристаллы принадлежат к средней категории тригональной (ромбоэдрической) сингонии. Борат железа в диапазоне температур от 0К до точки Нееля ($T_N = 348\text{K}$) обладает неколлинеарной магнитной структурой. Это легкоплоскостной антиферромагнетик со слабым ферромагнетизмом.

Гематит при температурах от 0К до точки Морина ($T_M = 262\text{K}$) – легкоосный ($11C_3$) коллинеарный антиферромагнетик. При температуре выше T_M происходит спиновая переориентация, и вплоть до $T_N = 948\text{K}$ сохраняется легкоплоскостное слабоферромагнитное состояние.

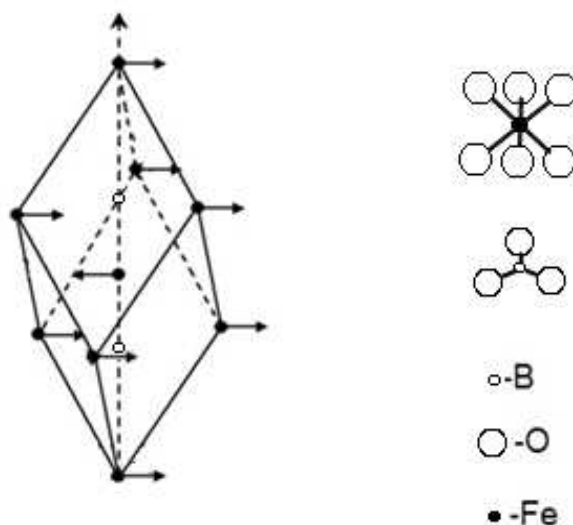


Рис. 1. Ромбоэдрическая ячейка FeBO_3 и координационные многогранники.

На рис. 1 изображена ромбоэдрическая ячейка бората железа, параметры которой $a=5,516 \text{ \AA}$ и угол $\alpha=49,581^\circ$. В ячейке выделены, также, координационные многогранники. Как видно, железо лежит в октаэдрическом окружении кислорода (расстояние Fe-O составляет $2,045 \text{ \AA}$). Бор лежит в центрах кислородных треугольников (расстояние B-O $1,342 \text{ \AA}$), образующих кислородные плоскости. Атомы Fe расположены между этими плоскостями.

Рис. 2 представляет ромбоэдрическую ячейку гематита, которая выбирается не по атомам железа, как это сделано в случае FeBO_3 , а по пустотам, лежащим в центрах кислородных треугольников. Параметры ячейки: $a = 5,424 \text{ \AA}$, $\alpha = 55,283^\circ$. Ячейка содержит 4 атома железа, которые находятся в октаэдрическом окружении кислорода. Существенным является то, что расстояние Fe-O в октаэдрах различное [1]. Для верхней кислородной тройки оно составляет $1,942 \text{ \AA}$, для нижней – $2,111 \text{ \AA}$. В FeBO_3 атомы железа располагаются на равных расстояниях от верхнего и нижнего кислородных треугольников.

Рис. 1 и 2 демонстрируют, также, направления магнитных моментов в борате железа и гематите.

Расстояния между соседними атомами Fe, лежащими на главной оси в борате железа, одинаковы. Их магнитные моменты антипараллельны (с точностью до угла скоса $\sim 1^\circ$, определяющего слабый ферромагнитный момент). В гематите же между атомами железа на главной оси существует два типа расстояний, которые чередуются. Если это расстояние «короткое» – $2,892 \text{ \AA}$, то магнитные моменты антипараллельны, если же расстояние «длинное» – $3,973 \text{ \AA}$, то они сонаправлены.

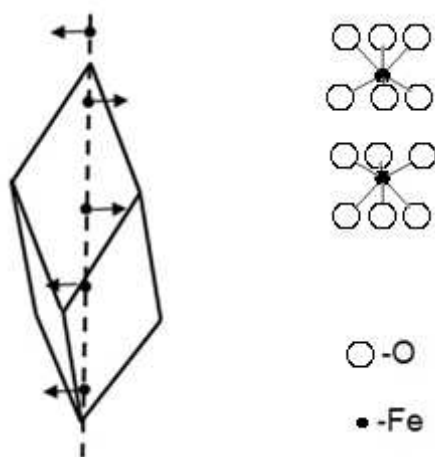


Рис. 2. Ромбоэдрическая ячейка $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ($T > T_M$) и координационные многогранники.

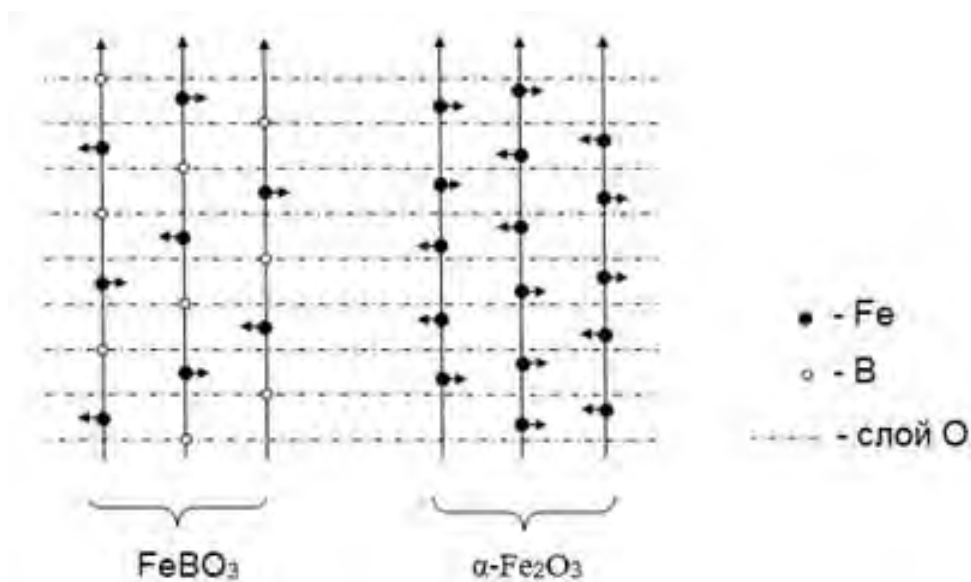


Рис. 3. Расположение атомов Fe вдоль осей C_3 .

Из рис. 3 видно, что атомы железа в FeBO_3 располагаются вдоль оси C_3 через 3 кислородных слоя, а $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ – попеременно: через один или два кислородных слоя. Сами же слои Fe в рассматриваемых кристаллах располагаются между всеми парами соседних кислородных слоев. При этом в гематите слои Fe имеют в 2 раза большую плотность по сравнению со слоями в борате железа. Кроме того, слои

железа, располагающиеся между соседними кислородными слоями в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, являются двойными (рис. 3) с относительным смещением монослоев $\approx 0,6 \text{ \AA}$.

Рис. 4 поясняет особенности структуры слоев Fe в кристаллах. Здесь эти слои изображены в плоскости рисунка. Видно, что двойной слой Fe в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (рис. 4а) отличается от слоя Fe в FeBO_3 (рис. 4б). Монослои, образующие двойной слой в гематите, показаны на рис. 4в и 4г.

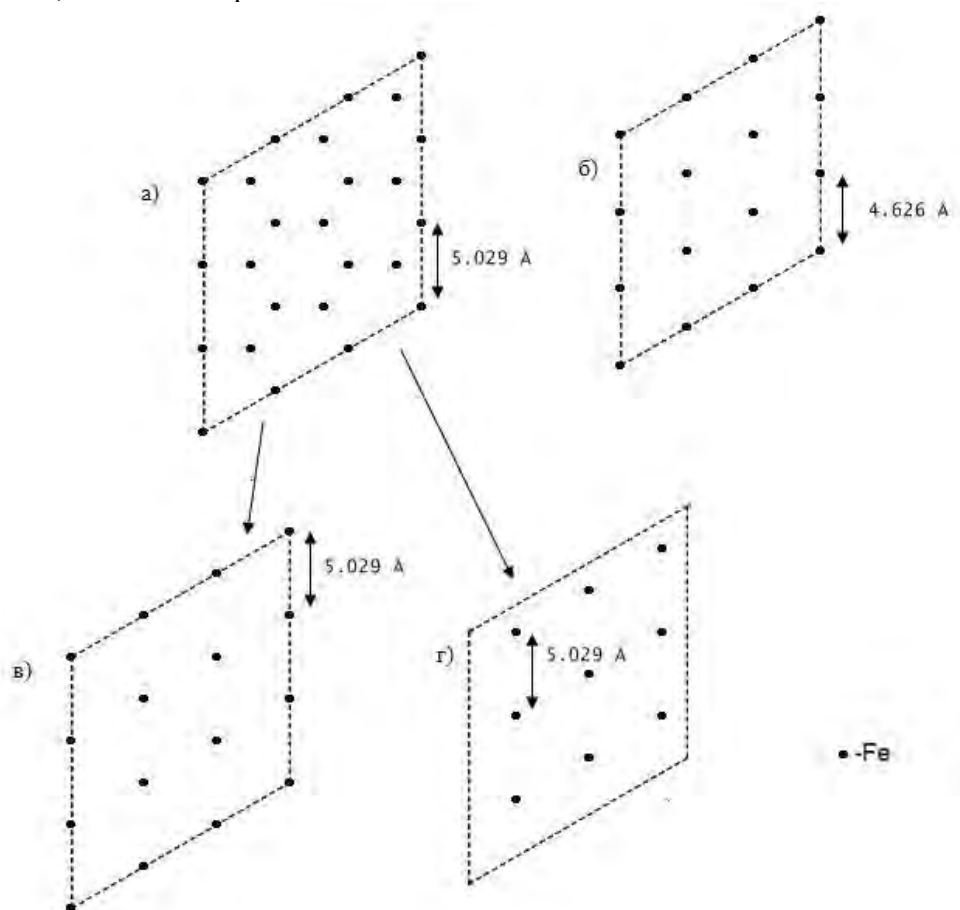
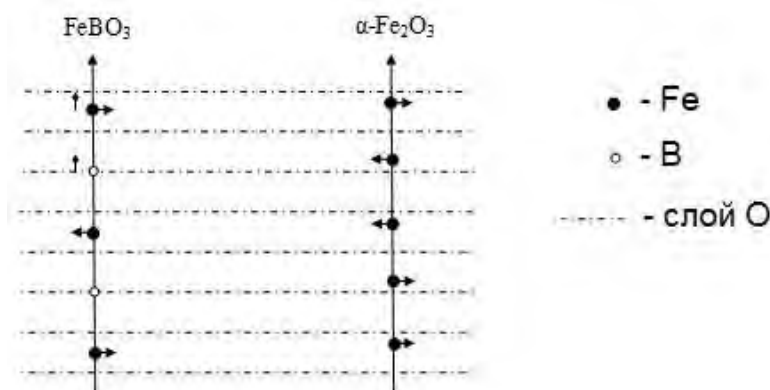


Рис. 4. Слои железа в плоскости перпендикулярной оси C_3 : а – двойной слой Fe в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$; б – слой Fe в FeBO_3 ; в и г – монослои Fe в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, образующие двойной слой.

При очевидном различии в структуре кристаллов существует и внутреннее сходство. Можно «построить» из бората железа гематит по следующему алгоритму (рис. 5):

- Замещение $\text{B} \rightarrow \text{Fe}$
- Перемещение ионов железа (и «старых», и «новых») из центрального положения вверх


 Рис. 5. «Трансформация» $\text{FeBO}_3 \rightarrow \alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$.

2. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА

Удвоенная концентрация атомов железа в гематите по сравнению с боратом железа не может не привести к различиям в магнитных свойствах этих кристаллов. Осознавая, что связь магнитных свойств с концентрацией Fe чрезвычайно сложна (поскольку не только концентрация влияет на эти свойства), мы все же в некоторых случаях изменение магнитных свойств, можем сопоставить с изменением концентрации атомов Fe. В частности, температура Нееля в гематите, $T_N = 948\text{K}$, значительно выше, чем в борате железа, $T_N = 348\text{K}$, что естественно при сближении магнитных атомов и увеличении их количества.

Следующий эффект: гематит обладает точкой Морины ($T_M = 262\text{K}$) – температурой спиновой переориентации из легкоплоскостного состояния ($T > T_M$) в легкоосное ($T < T_M$). В борате железа такая переориентация не обнаружена. Известно, что в гематите одноосная анизотропия включает два механизма – одноионный и магнитодипольный [2], имеющие разные знаки. Эффективное поле одноосной анизотропии в слабоферромагнитной фазе при комнатной температуре таково: $H_a = 210\text{Э}$ [3]. Расчет для дипольного вклада в эту анизотропию дает величину намного большую – $H_{a \text{ dip}} \sim 10^4\text{Э}$. Это означает, что вклады в анизотропию почти сбалансированы и при понижении температуры до T_M полностью компенсируют друг друга. В борате железа экспериментальное значение поля анизотропии таково: $H_a \approx 3\text{кЭ}$ [4]. Расчет дипольного вклада привел к следующей величине: $H_{a \text{ dip}} \approx 3,6\text{кЭ}$ [5], т.е. одноосная анизотропия почти полностью определяется дипольным вкладом. Если смотреть на борат железа как на «разбавленный» гематит, то различия в анизотропии можно пояснить следующим образом. Одноионная анизотропия определяется, главным образом, ближайшим окружением магнитных атомов – атомами кислорода, образующими октаэдры. «Автономия» магнитных атомов при «разбавлении» сохраняется. Дипольная анизотропия определяется парными взаимодействиями магнитных атомов, и она должна при «разбавлении» изменяться значительно сильнее одноионной. Таким образом, при «трансформации» гематита в борат

железа механизмы анизотропии должны измениться, что мы и наблюдаем. Нужно, конечно, учесть еще и то, что ближайшее окружение магнитных атомов в гематите и борате железа различно: в гематите атомы Fe смещены из центров кислородных октаэдров (два типа октаэдров), в борате железа – нет. Последнее обстоятельство должно приводить к существенному различию одноионной анизотропии в этих двух случаях.

Интересный вопрос – влияние взаимодействия Дзялошинского на величину одноосной анизотропии. Инвариант в термодинамическом потенциале, соответствующий энергии Дзялошинского, обладает осевой ($||C_3$) симметрией. С учетом этого вклада анизотропия бората железа должна возрасть. В гематите такой механизм анизотропии, видимо, тоже нужно учитывать. Однако этот вопрос требует отдельного рассмотрения.

Обсудим еще эффекты поверхностного магнетизма в гематите [6] и борате железа [5,7]. На рис. 6 показаны элементарные ромбоэдры с гранями типа $(01\bar{1}2)$ для гематита и бората железа.

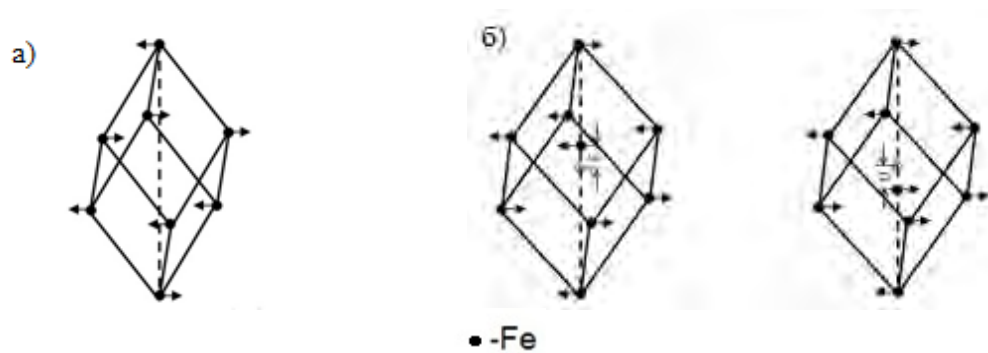


Рис. 6. Наименьший ромбоэдр с гранями $(01\bar{1}2)$ для бората железа (а) и гематита (б). U-смещение атома Fe из центра.

Эксперименты показали, что величина критического поля, намагничивающего приповерхностный магнитный слой для таких граней в гематите $H_c \sim 23$ кЭ [6], по крайней мере, на два порядка превосходит H_c в борате железа. Существенным для интерпретации такого расхождения является наличие «центрального» иона железа в ячейке гематита, что делает расстояния между слоями Fe, параллельными грани $(01\bar{1}2)$, в гематите практически в два раза меньшими, чем в борате железа. Поскольку критическое поле очень сильно зависит от расстояния между соседними магнитными атомами, $H_c \sim 1/r^{10}$ [7], уменьшение расстояния между ними приведет в гематите к резкому возрастанию поверхностной анизотропии.

Отметим, что сдвоенность базисных слоев железа в гематите, проявляется в неоднозначности структуры приповерхностного слоя для небазисных граней $(01\bar{1}2)$ (рис. 6). В этом случае возможно два типа окончания грани $(01\bar{1}2)$ [6]. В борате железа такой неоднозначности нет.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализированы различия в кристаллической и магнитной структуре бората железа и гематита. Показано, что рассмотренные структурные особенности этих кристаллов коррелируют с наблюдаемыми различиями в обменном взаимодействии, поверхностном магнетизме, механизмах одноосной анизотропии.

Список литературы

1. Rollmann G. First-principles calculation of the structure and magnetic phases of hematite / Rollmann G., Rohrbach A., Entel P. and Hafner J. // Phys. RevB. – 2004. – 69(12).
2. Artman J.O. Magnetic anisotropy in antiferromagnetic corundum-type sesquioxides / Artman J.O., Murphy J.C., Poner S. // Phys. Rev. – 1965. – V. 138, No. 3. – P. 912-917.
3. Jacobs I.S. Field induced magnetic phase transitions in antiferromagnetic hematite (α -Fe₂O₃) / Jacobs I.S., Beyerlein R.A., Poner S., Remyka J.P. // Int. J. Magnetism. – 1971. – V. 1, No. 2. – P. 193-202.
4. Высокочастотный антиферромагнитный резонанс в борате железа (FeBO₃) / Великов Л.В., Прохоров А.С., Рудашевский Е.Г., Селезнев В.Н. // Письма в ЖЭТФ. – 1972. – Т. 15, № 12. – С. 722-724.
5. Near-Surface Magnetic Structures in Iron Borate / Zubov V.E., Krinchik G.S., Seleznyov V.N. and Strugatsky M.B. // J. Magn. Magn. Mater. – 1990. – V. 86. – P. 105-114.
6. Кринчик Г.С. Поверхностный магнетизм гематита / Кринчик Г.С., Зубов В.Е. // ЖЭТФ. – 1975. – Т. 69, № 2(8). – С. 707-721.
7. Surface magnetism of real iron borate monocrystal / Maksimova E.M., Nauhatsky I.A., Strugatsky V.B., Zubov V.E. // J. Magn. Magn. Mater. – 2010. – V. 322. – P. 477-480.

Болотін Д.Д. Порівняльний аналіз кристаломанітної структури борату заліза та гематиту / Болотін Д.Д., Максимова О.М., Стругацький М.Б. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 149-155.

Проаналізовані відмінності в кристалічній і магнітній структурі ромбоєдричних антиферромагнітних кристалів FeBO₃ і α -Fe₂O₃. Показано, що розглянуті структурні особливості можуть визначати спостережувані відмінності магнітних властивостей борату заліза і гематиту.

Ключові слова: борат заліза, гематит, слабкий ферромагнетик, магнітна структура, поверхневий магнетизм.

Bolotin D.D. Comparative analysis of crystalomagnetic structure of iron borate and hematite / Bolotin D.D., Maksimova E.M., Strugatsky M.B. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 149-155.

Distinctions in the crystal and magnetic structure of rhombohedral antiferromagnetic crystals FeBO₃ and α -Fe₂O₃ were analysed. It was shown that the considered structural features can determine the observed distinctions in magnetic properties of iron borate and hematite.

Keywords: iron borate, hematite, weak ferromagnetic, magnetic structure, surface magnetism.

Поступила в редакцію 20.10.2010 г.

УДК 537.634.2

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ТРЕХВОЛНОВОЕ МАГНИТОУПРУГОЕ СВЯЗЫВАНИЕ В МОНОКРИСТАЛЛЕ FeBO_3

Евстафьев А.И.^{1,2}, Преображенский В.Л.^{2,3}, Перно Ф.², Бержанский В.Н.¹

Joint European Laboratory LEMAC:

¹*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина*

²*IEMN-DOAE-UMR CNRS 8520, Ecole Centrale de Lille, 59651 Villeneuve d'Ascq, France*

³*Научный центр волновых исследований (НЦВИ ИОФ РАН), Москва, Россия*

*E-mail: alexander.yves@gmail.com, vladimir.preobrajenski@iemn.univ-lille1.fr,
philippe.pernod@iemn.univ-lille1.fr, berj@pop.cris.net*

Экспериментально и теоретически исследована параметрическая генерация связанных триад магнитоупругих волн в кристалле FeBO_3 под поперечной электромагнитной накачкой при температурах 77К – 293К. Теоретические расчеты хорошо согласуются с экспериментальными результатами. Изучены магнитоупругие свойства монокристалла в низких температурах, исследован нелинейный сдвиг частоты резонансной моды образца бората железа.

Ключевые слова: магнитоупругие волны, трехбозонное связывание, нелинейный сдвиг частоты

ВВЕДЕНИЕ

Возбуждение связанных триад гибридных магнитоупругих волн (квазифононов) в магнитоупорядоченной среде представляют собой интерес в качестве примера трехбозонных равновесных состояний в конденсированных средах. Наиболее подходящими объектами для изучения трехквазифононных возбуждений являются антиферромагнетики с анизотропией типа «легкая плоскость» (АФЛП) вследствие очень сильного нелинейного взаимодействия квазифононов в этом типе магнитных кристаллов [1]. Связывание трех квазифононов недавно удалось наблюдать в легкоплоскостной фазе антиферромагнитного кристалла $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ под гомогенной РЧ электромагнитной накачкой [2,3]. Теоретический анализ [2,4] показал наличие нескольких специфических динамических характеристик, которые отличают трехволновое параметрическое связывание от хорошо изученного [7,8] параметрического возбуждения квазифононных пар. Первое отличие – это зависимость порога неустойчивости не только от амплитуды электромагнитной накачки, но и от числа первоначальных квазифононов (т.е. от амплитуды начальной магнитоупругой волны). Второе отличие – это взрывное увеличение числа квазифононов вплоть до создания сингулярности амплитуд связанных волн в конечный промежуток времени накачки за порогом неустойчивости. Для бегущих магнитоупругих волн (МУВ) запороговое усиление сопровождается пространственной локализацией возбуждений [4]. Было показано, что запороговое ограничение амплитуд возбужденных волн в кристалле $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ вызвано, прежде всего, нелинейным

сдвигом частоты (НСЧ) магнитоупругих мод [2]. Взрывная неустойчивость в α -Fe₂O₃ была достигнута, когда эффект НСЧ компенсировался соответствующей квазисингулярной модуляцией фазы поля электромагнитной накачки [3].

В дальнейшем исследование взрывной неустойчивости магнитоупругих возбуждений распространено на монокристалл FeBO₃ в котором также удалось экспериментально пронаблюдать эффект трех квазифононного параметрического возбуждения [12]. Борат железа имеет ту же группу симметрии, что и α -Fe₂O₃, обладает антиферромагнетизмом и анизотропией типа «легкая плоскость». Этот кристалл демонстрирует сильное магнитоупругое взаимодействие, приводящее к особенностям при возбуждении МУВ как в линейном [5,6], так и нелинейном режиме, например, при параметрическом возбуждении квазифононных пар [7,8].

Однако температура Нееля в FeBO₃ значительно ниже, чем в α -Fe₂O₃, и находится вблизи комнатной температуры $T_N=348\text{K}$. По этой причине исследование трехквазифононного связывания [11] целесообразно проводить при низких температурах, когда эффективность магнитоупругого взаимодействия существенно возрастает. Первые результаты низкотемпературных исследований были опубликованы в [13]. В данной работе проведено исследование резонансного возбуждения магнитоупругих волн в диапазоне температур от 77 до 293K как в линейном, так и нелинейном режимах.

1. ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ БОРАТА ЖЕЛЕЗА В ЛИНЕЙНОМ РЕЖИМЕ

Эксперименты по исследованию магнитоупругих свойств образца бората железа были проведены на установке, схема которой изображена на рис. 1.

Образец являлся высококачественным монокристаллом бората железа, выращенным в лаборатории роста кристаллов ТНУ им. В.И.Вернадского, и имел форму диска диаметром 3 мм и толщиной 0.1 мм. Базовая плоскость кристалла была параллельна плоскости образца.

Образец помещался в небольшую герметичную камеру, вокруг которой были намотаны две скрещенные катушки. Одна из них использовалась для возбуждения МУ волн, другая для их детектирования. Камера использовалась для того, чтобы в экспериментах при низких температурах жидкий азот не менял упругих граничных условий образца. Обе скрещенные катушки подключались к панорамному измерителю Hewlett Packard 4195A, который управлялся с компьютера по интерфейсу GPIB и снимал спектральные зависимости. Постоянное поле подмагничивания контролировалось гауссметром, подключенным к компьютеру, и менялось с помощью программируемого блока питания Tti TSX 1820P.

Для проведения экспериментов была выбрана фундаментальная контурная мода с резонансной частотой в окрестности $\omega=1.3\text{ МГц}$. Измерения проводились в диапазоне температур 77 – 293 K и подмагничивающих полей 10 -2000 Э.

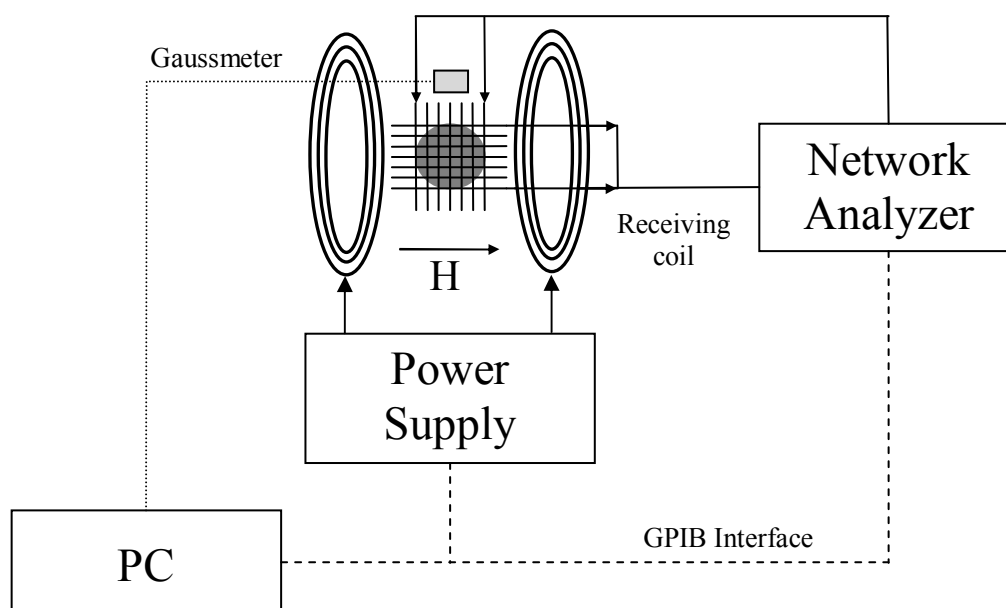


Рис. 1. Схема установки для исследования резонансных свойств бората.

Были измерены зависимости параметров магнитоакустической резонансной моды: значения ее частоты и добротности от величины постоянного подмагничивающего поля в линейном режиме ($h \ll H$) при непрерывной и импульсной накачке.

Полевые зависимости резонансной частоты были аппроксимированы известным выражением [1,5]:

$$\omega_n = \omega_{n0}(T) \sqrt{1 - \zeta_n^2(H, T)}, \quad (1)$$

где $\zeta_n(H, T)$ – коэффициент магнитоупругой связи, ω_{n0} – резонансная частота в насыщающем магнитном поле H . Для полей H , малых по сравнению с полем Дзялошинского H_D , которое отвечает за образование слабого ферромагнитного момента антиферромагнетика, зависимость ω_n от H описывается выражением [1,5]:

$$\zeta_n^2(H, T) = \frac{H_{ms}^{(1)}(T)}{H + H_{ms}^{(2)}(T)}, \quad (2)$$

где $H_{ms}^{(1,2)}(T) = 2H_E H_{me}^{(1,2)} / H_D$ – параметры магнитоупругой щели, которые зависят от температуры. Здесь H_E – обменное поле, $H_{me}^{(1,2)}$ – эффективные магнитоупругие поля. Экспериментальные и аппроксимированные формулами (1,2) зависимости резонансной частоты от постоянного магнитного поля при различных температурах показаны на рис. 2. Значения ω_{n0} , $H_{ms}^{(1)}$ и $H_{ms}^{(2)}$, рассчитанные для разных температур на основе уравнений (1,2) представлены в Таблице 1.

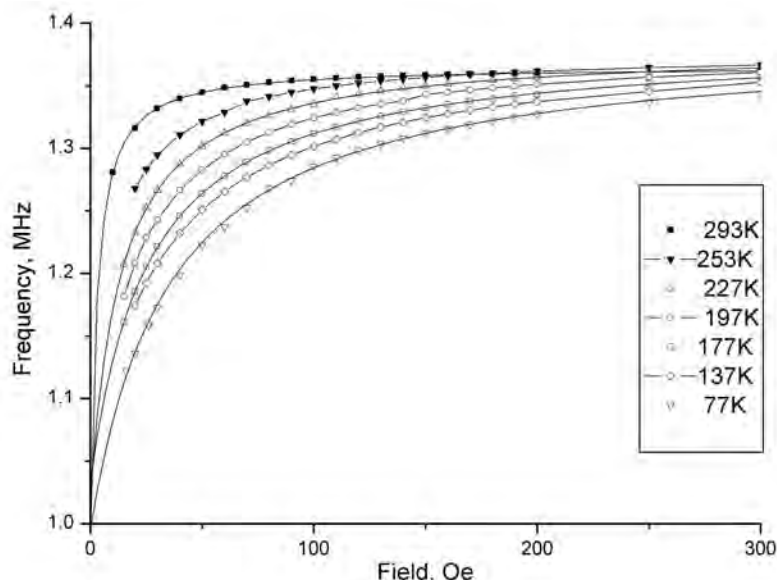


Рис. 2. Зависимости резонансной частоты контурной моды от постоянного магнитного поля H при различных температурах. Символы – эксперимент, сплошные линии – аппроксимация по формулам (1,2).

Таблица 1
Зависимости параметров МА моды FeBO_3 от температуры

Parameter\Temp	293 K	227 K	177 K	77 K
$\omega_{n0}/2\pi$, MHz	1.377	1.380	1.384	1.388
$H_{ms}^{(1)}$, Oe	1.7	7.4	13.2	26.6
$H_{ms}^{(2)}$, Oe	4.1	16.5	29.7	57.1

Влияние постоянного магнитного поля на магнитоупругий резонанс в FeBO_3 аналогичен подобному эффекту в гематите [3]. Однако, в отличие от бората железа, в гематите при понижении температуры происходит спин-переориентационный (переход Морина) – кристалл становится магнитно одноосным. При этом существенно меняется магнитоупругое взаимодействие, что делает невозможным проведение подобных измерений в гематите при низких температурах.

Как видно из рис. 2 максимальное изменение резонансной частоты МУ колебаний при $T=273\text{K}$ в диапазоне полей $10\text{ Э} - 2\text{ кЭ}$ составляет около 7%, в то время как при 77K оно возрастает в 3 раза и составляет уже 22%. Коэффициент магнитоупругой связи в поле $H = 10\text{ Э}$ с понижением температуры увеличивается почти в 2 раза с 0.35 при 293K до 0.62 при 77 K (рис. 3). Это повышение вызвано соответствующим изменением магнитных и магнитоупругих параметров кристалла, которые определяют значение $H_{ms}^{(1,2)}$ и приводят к их почти 10-кратному

увеличению (табл. 1). Уменьшение коэффициента магнитоупругой связи (рис. 2) и соответствующее увеличение резонансной частоты (рис. 1) при увеличении поля подмагничивания связано с возрастанием «жесткости» магнитной подсистемы кристаллов и соответствующим уменьшением МУ восприимчивости. В связи с таким увеличением коэффициента магнитоупругой связи при низких температурах следует ожидать и более сильных нелинейных магнитоупругих эффектов.

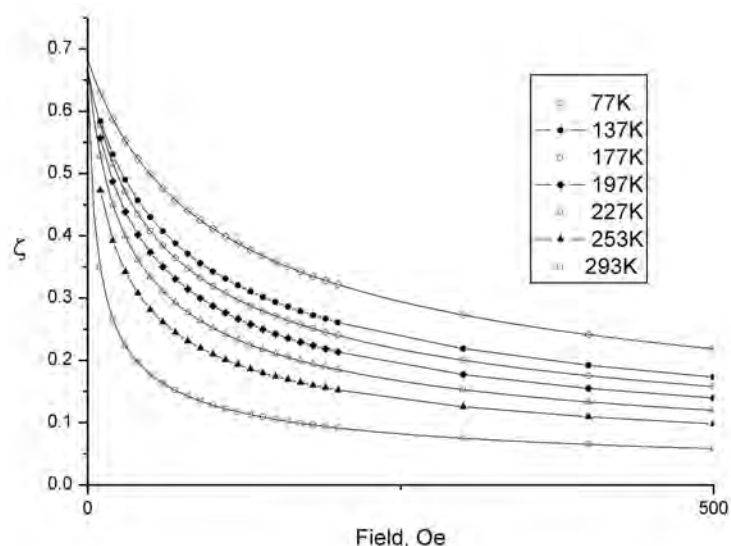


Рис. 3. Зависимость коэффициента магнитоупругой связи от постоянного магнитного поля H при разных температурах.

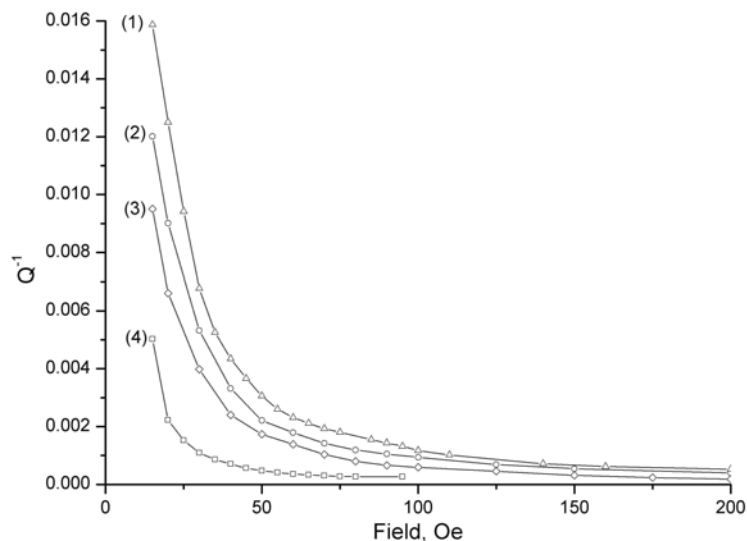


Рис. 4. Зависимость коэффициента затухания магнитоупругой моды от постоянного поля H при температурах: 77K (1), 177K (2), 227K (3) и 293K (4).

В качестве рабочей точки для наблюдения трехфононной взрывной неустойчивости при $T=273\text{K}$ было выбрано поле подмагничивания $H = 20$ Э. В этой точке образец уже обладает достаточно большой добротностью и достаточным коэффициентом магнитоупругого взаимодействия. Однако дальнейшее исследование магнитоупругого спектра образца в выбранной рабочей точке позволило обнаружить множество паразитных гармоник возле резонансной моды и в районе удвоенной и утроенной частоты резонансной моды. Как видно из рис. 3, более оптимальная рабочая точка для наблюдения трехфононной взрывной неустойчивости может быть найдена при низких температурах.

Понижение температуры увеличивает чувствительность резонансной частоты моды к изменению постоянного поля подмагничивания вследствие увеличения коэффициента связи ζ , однако рост магнитоупругой связи вызывает также рост вклада магнитной подсистемы в процессы затухания в образце, понижая его акустическую добротность. Добротность при 293K и $H = 20$ Э составляет $Q = 7 \cdot 10^2$, а при 77K в тех же полях она понижается до $Q = 10^2$. Такое сильное уменьшение затрудняет наблюдение запорогового связывания трех квазифонов. Экспериментально измеренные зависимости коэффициента затухания Q^{-1} от постоянного магнитного поля для различных температур приведены на рис. 4. Влияние магнитоупругой связи на акустическое затухание, показанное на рис. 5, построено на основании данных рис. 4 и рис. 2 и формул (1,2).

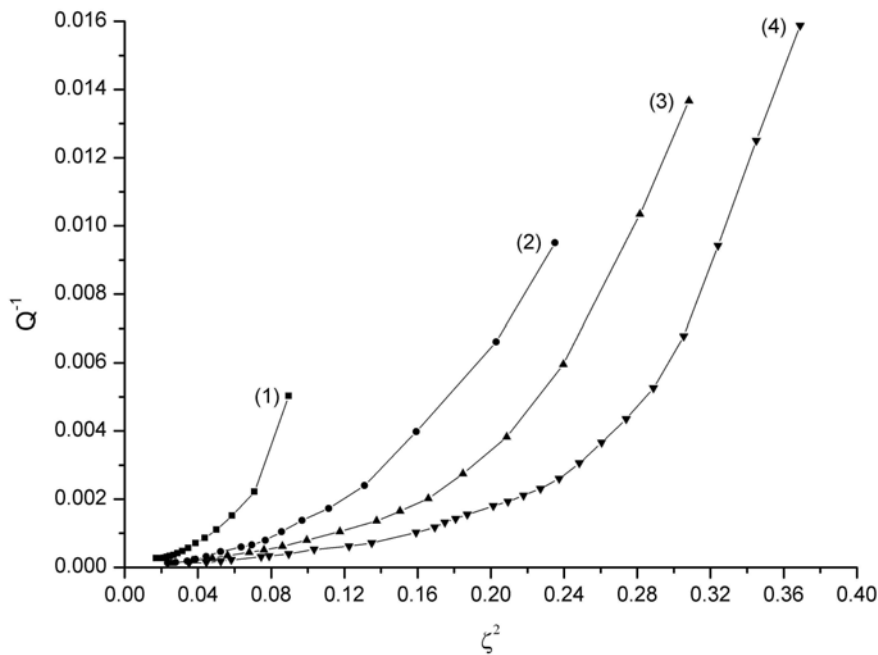


Рис. 5. Зависимости затухания магнитоупругой моды от коэффициента магнитоупругой связи при температурах 293K (1), 227K(2), 177K (3) и 77K (4).

В низких температурах удастся добиться достаточно высоких коэффициента связи и добротности для наблюдения взрывной неустойчивости. Так при 77К добротность порядка 10^3 сочетается с большим коэффициентом связи $\zeta=0.45$ в поле намагничивания $H = 70$ Э. Это поле было выбрано в качестве рабочей точки для дальнейших экспериментов при 77К.

2. НЕЛИНЕЙНЫЙ РЕЖИМ МАГНИТОАКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ FeVO_3 .

При увеличении амплитуды переменного магнитного поля кривая акустического резонанса сдвигается в высокочастотную область, становится несимметричной, а в области асимметрии возникает гистерезис. Эти эффекты являются характерными для нелинейного режима колебаний. Для измерения нелинейного сдвига частоты (НСЧ) образец возбуждался сигналом с генератора качающей частоты различной амплитуды, который подавался на катушку возбуждения. Магнитные осцилляции, сопровождающие акустические колебания, регистрировались катушкой детектирования (рис. 1). Измерения были проведены при 293К и 77К. На рис. 6 представлены резонансные линии при 77К при различных амплитудах возбуждающего магнитного поля, демонстрирующие нелинейный сдвиг частоты.

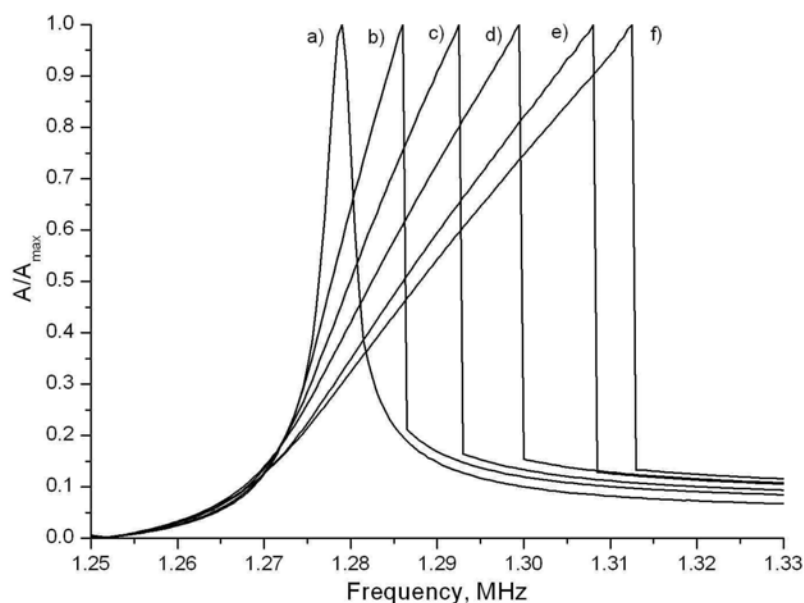


Рис. 6. Форма резонансной линии при различных амплитудах переменного магнитного поля h_o (Э): (a) 0.1, (b) 1.0 (c) 1.7 (d) 2.0 (e) 2.7 (f) 3.0 . $H = 70$ Э, $T = 77\text{K}$.

При больших амплитудах возбуждения проявляется бистабильность нелинейного резонатора, выражающаяся в гистерезисе резонансной линии, как показано на рис. 7. На рис. 8 показаны зависимости НСЧ при 293К и 77К от квадрата амплитуды магнитоупругих колебаний. Причина более сильной

зависимости НСЧ от интенсивности колебаний при 293К в сравнении с аналогичной зависимостью при 77К заключается в действии двух факторов: более резкой зависимости частоты резонанса МА моды от магнитного поля (в том числе, и переменного) и более высокой добротности упругих колебаний при высоких температурах.

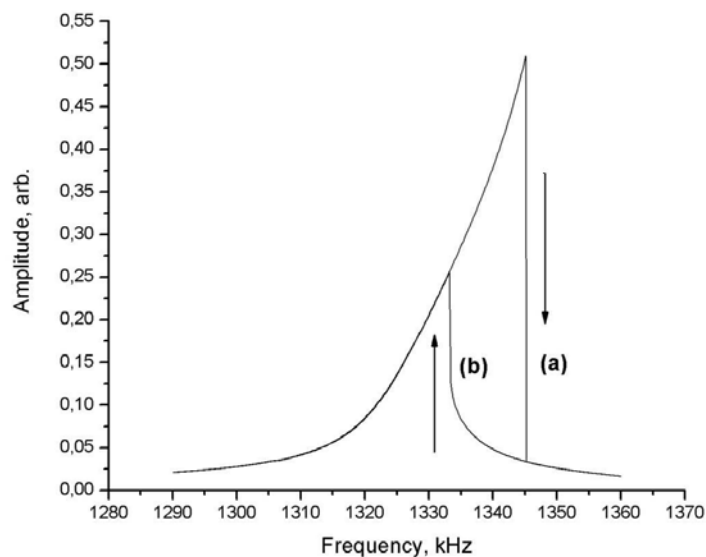


Рис. 7. Бистабильность нелинейного резонатора при больших амплитудах возбуждения при $T=77\text{K}$.

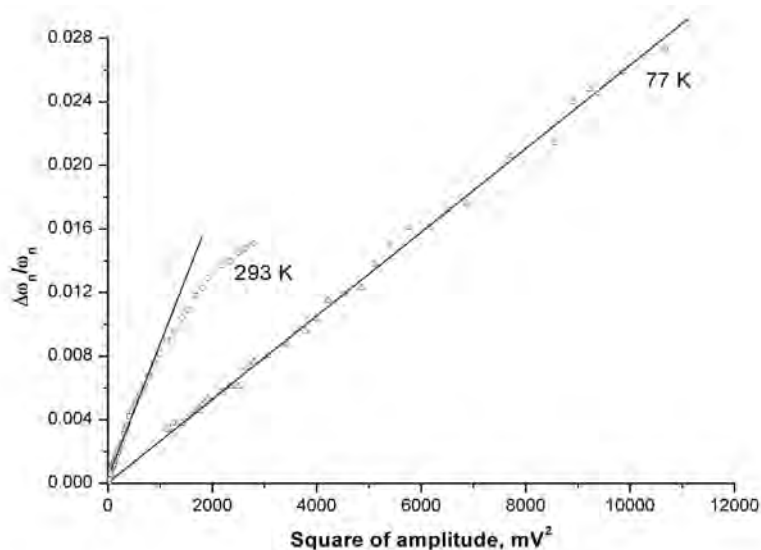


Рис. 8. Зависимости нелинейного сдвига частоты от квадрата амплитуды колебаний при 293К и 77К.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАБЛЮДЕНИЕ ТРЕХКВАЗИФОНОННОГО СВЯЗЫВАНИЯ В БОРАТЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 77 К – 293 К.

Техника эксперимента, использованная для изучения трехквазифононного связывания в образце бората железа аналогична той, которая была разработана ранее для гематита [3]. Схема эксперимента представлена на рис. 9. Одна и та же катушка возбуждения использовалась как для возбуждения переменным полем h_0 начальных резонансных МУ колебаний, так и для создания поля накачки h_p при трехфононном связывании. Вторая катушка, ориентированная ортогонально, использовалась для детектирования МУ колебаний образца. Внешнее магнитное поле H было приложено в базовой плоскости образца под углом α около 80 градусов по отношению к переменному магнитному полю катушки накачки. Небольшое отклонение от 90 градусов использовалось для наведения индукции в детектирующей катушке от колебаний ферромагнитного момента.

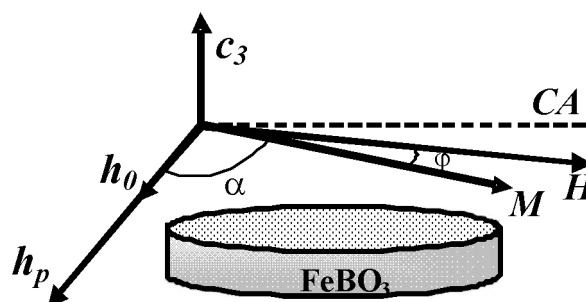


Рис. 9. Схема эксперимента по параметрическому возбуждению квазифононов. H – постоянное магнитное поле, $h_0(\omega_n)$ и $h_p(\omega_{3n})$ – поля в катушке возбуждения от первого и второго импульса, соответственно, M – ферромагнитный вектор. CA – ось катушки детектирования.

Образец возбуждался двумя последовательными электромагнитными импульсами. Первый импульс был на резонансной частоте ω_n выбранной моды n и создавал начальное число квазифононов в образце. Второй импульс с частотой $3\omega_n$ создавал поперечное поле накачки:

$$h_{\perp}(t) = h_p \cos(3\omega_n t + \psi(t)) \quad (3)$$

Фаза переменного поля накачки модулировалась по сингулярному закону, предложенному в [3]:

$$\psi(t) = \psi_0 + \frac{\alpha \cdot Q_n}{\Gamma} \left(\frac{(\Gamma - 1)(1 - e^{-\delta_n t})}{1 - \Gamma(1 - e^{-\delta_n t})} - \frac{\ln(1 - \Gamma(1 - e^{-\delta_n t}))}{\Gamma} \right), \quad (4)$$

где Γ – параметр надкритичности ($\Gamma > 1$), $\delta_n = Q_n^{-1} \omega_n / 2$ – это фактор затухания, обратно пропорциональный времени релаксации резонансной моды, α и ψ_0 являются подгоночными параметрами. Параметры модуляции фазы были выбраны таким образом, чтобы компенсировать НСЧ резонансной моды.

Так как порог взрывной неустойчивости зависит от двух факторов начального уровня возбуждения и величины поля накачки, то амплитуды первого и второго

импульсов были выбраны так, чтобы превосходить порог неустойчивости. Передний и задний фронт первого импульса, а также передний фронт второго импульса, имели огибающую в форме распределения Гаусса, чтобы избежать возбуждения паразитных гармоник, вызванных ступенчатым увеличением амплитуды. Вид импульсов возбуждения использованных для наблюдения параметрического трех квазифононного связывания, представлен на рис. 10.

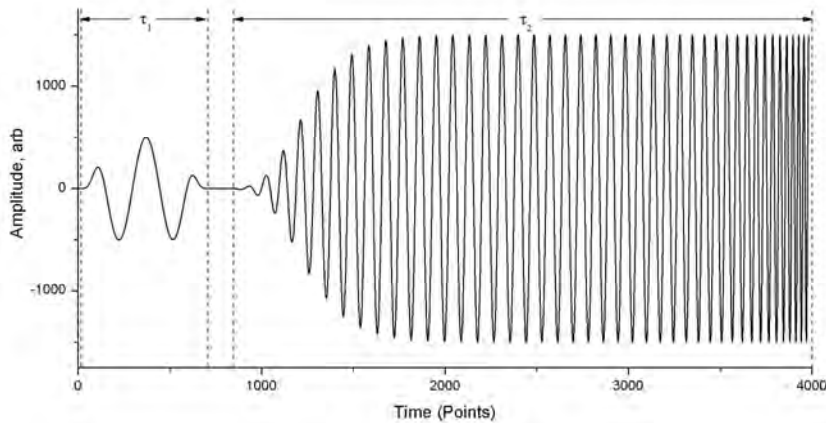


Рис. 10. Последовательность импульсов подкачки τ_1 и частотно-модулированного импульса накачки τ_2 , использованная для наблюдения параметрического трехквазифононного связывания.

Осциллограммы отклика были зарегистрированы с помощью осциллографа, подключенного к детектирующей катушке. Полученные данные были отфильтрованы, чтобы выделить промежуток частот между 1.25 МГц и 1.4 МГц. Результаты исследований при 293К предоставлены на рис. 11.

Наблюдение трехквазифононной взрывной неустойчивости при комнатной температуре осуществлялось при следующих условиях: частота первого импульса $\omega_n/2\pi = 1.322$ МГц, длительность $\tau_1 = 25$ μ s, амплитуда $h_0 = 0.9$ Э, частота второго импульса (импульса накачки) $\omega_{p0} = 3\omega_n$ была промодулирована по закону (4) со следующими параметрами: $Q_n = 700$, $\Gamma = 1.5$, $\alpha = 0.012$. Длительность второго импульса составляла $\tau_2 = 220$ μ s при амплитуде поля накачки $h_p = 15$ Э. Полученная огибающая взрывного развития трехквазифононного процесса предоставлена на рис. 11(а). Взрывной рост амплитуды колебаний ограничивается нелинейностями более высоких порядков. Биения, которые наблюдаются после окончания импульса накачки, были вызваны взаимодействием выбранной моды с другой модой на частоте 1.361 МГц. Последняя возбуждалась вследствие НСЧ выбранной моды при большой амплитуде колебаний. В отсутствие частотной модуляции взрывное поведение не наблюдалось (рис. 11(б)). В отсутствие импульса накачки образец релаксировал как резонатор с добротностью $Q = 700$ (рис. 11(с)). Если был подан только импульс накачки без начального возбуждения фононов, параметрического возбуждения не происходило (рис. 11(д)). Небольшое усиление амплитуды колебаний в конце импульса накачки наблюдается вследствие того, что задний фронт импульса накачки представлял собой ступенчатую функцию.

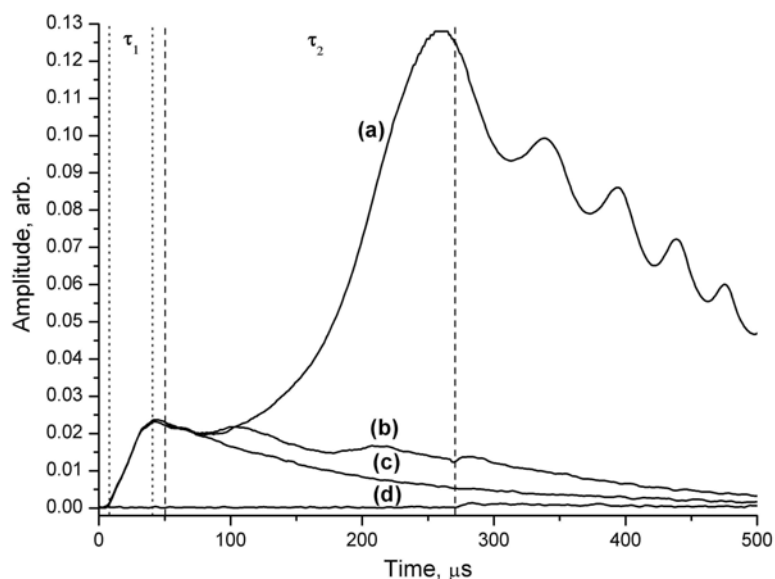


Рис. 11. Экспериментальные временные зависимости амплитуды МУ колебаний при 293 К: (а) – с модуляцией частоты накачки, (б) – без модуляции, (с) – без накачки ($h_p = 0$), (д) – без начального возбуждения ($a_{n0} = 0$); τ_1 , τ_2 – длительности импульсов возбуждения и накачки, соответственно.

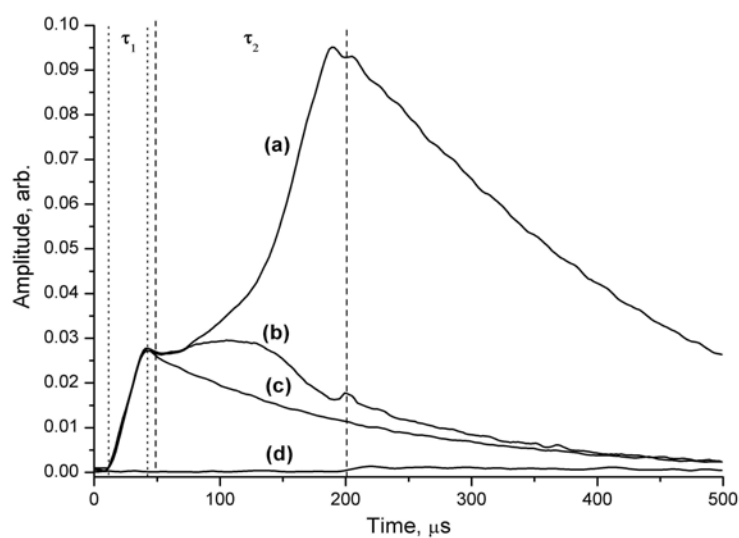


Рис. 12. Экспериментальные временные зависимости амплитуды магнитоупругих колебаний при 77 К: (а) с модуляцией частоты накачки, (б) без модуляции, (с) без накачки ($h_p = 0$), (д) без начального возбуждения ($a_{n0} = 0$); τ_1 , τ_2 – длительности импульсов возбуждения и накачки, соответственно.

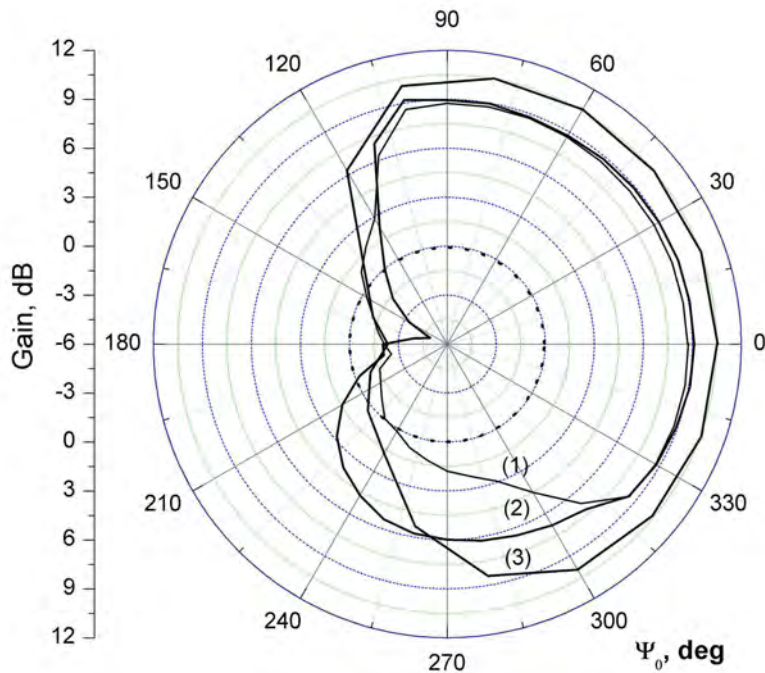


Рис. 13. Фазовая диаграмма трехквaziфононного параметрического связывания при температурах 293 К (1 – эксперимент, 2 – теория) и 77 К (3 – эксперимент).

Трехволновое связывание МУ колебаний при низких температуре 77 К было изучено путем погружения образца в жидкий азот. При этом были использованы следующие параметры: частота первого импульса $\omega_n/2\pi = 1.272$ МГц, длительность $\tau_1 = 25$ мкс, амплитуда $h_0 = 1.3$ Э. Частота второго импульса $\omega_{p0}/2\pi = 3.816$ МГц была промодулирована по закону (3,4), длительность $\tau_2 = 150$, амплитуда $h_p = 20$ Э. Огибающая взрывного трехквaziфононного процесса представлена на Рис. 13(a).

Результаты качественно аналогичны результатам, полученным при комнатной температуре, в том числе и при изменении условий возбуждения (кривые b, c, d).

Одна из особенностей трехквaziфононного процесса это сильная зависимость параметрического усиления от разности фаз между первым и вторым импульсами. Рис. 13 показывает, экспериментальные результаты зависимости трехквaziфононного связывания от начального сдвига фазы ψ_0 импульса накачки относительно фазы первого возбуждающего импульса при различных температурах: 293К (1) и 77К (3). Этот график нормализован на уровень амплитуды в условиях только первого импульса и отсутствия импульса накачки (штриховой круг). Трехволновое связывание является стабильным по отношению к изменению фазы в диапазоне от +100 до -45 градусов при 273 К, и +90 до -60 градусов при 77 К. При определенной разнице фаз в окрестности 180 градусов (+/- 45) импульс накачки приводит к подавлению первоначальных МУ колебаний образца, так что амплитуда в конце второго импульса становится ниже, чем она была бы без импульса накачки.

4. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХКВАЗИФОНОННОГО СВЯЗЫВАНИЯ В БОРАТЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 77 К – 293 К.

Колебания связанных упругой и магнитной систем в акустическом резонаторе из антиферромагнитного кристалла симметрии D_6^{3d} и магнитной анизотропии типа «легкая плоскость» описываются системой уравнений [3]:

$$\ddot{a}_n + 2\delta_n \dot{a}_n + \omega_{n0}^2 (a_n + \sin 2\varphi) = 0 \quad (5)$$

$$\varphi = [HH_D \cos \varphi + \left(\frac{\omega_{f0}^2}{\gamma^2} - HH_D \right) \cos 2\varphi -$$

$$h_{\perp}(t)H_D \sin \varphi - \frac{\omega_{f0}^2}{\gamma^2} \zeta_n^2 a_n \sin 2\varphi]^{-1} \times \quad , \quad (6)$$

$$\left(-\frac{\omega_{f0}^2}{\gamma^2} \zeta_n^2 \frac{1}{2} a_n \cos 2\varphi + H_D h_{\perp}(t) \cos \varphi \right)$$

где a_n – амплитуда упругих колебаний акустической моды, нормализованная на спонтанные магнитострикционные деформации, ω_{n0} – резонансная частота моды в отсутствие магнитоупругой связи, H – постоянное магнитное поле, приложенное в базовой плоскости кристалла, φ – это угол динамического отклонения магнитного момента от направления H , ω_{f0} – это частота антиферромагнитного резонанса, γ – гиромагнитное отношение, ζ_n – коэффициент магнитоупругой связи моды. Резонансная частота и поле накачки описываются формулами (1) и (3, 4) соответственно. Фазовая модуляция (4) соответствует квадратичной зависимости НСЧ от амплитуды накачки [9,10], которая наблюдается в эксперименте как при 273К, так и 77К (рис.8).

Используя систему уравнений (5) и (6) можно найти условие реализации режима взрывной неустойчивости [2]:

$$\Gamma = \frac{9}{16} Q_n \frac{\zeta_n^4}{1 - \zeta_n^2} \left(\frac{\gamma}{\omega_{f0}} \right)^2 H_D h_p a_{n0} > 1, \quad (7)$$

где a_{n0} – начальная амплитуда колебаний, возбуждаемых на частоте ω_n . Обязательное условие для наблюдения трехквазифононного связывания – это превышение порогового значения $(h_p a_{n0})_{th}$ и переход в надкритический режим $\Gamma > 1$ или $h_p a_{n0} > (h_p a_{n0})_{th}$, где

$$(h_p a_{n0})_{th} = \frac{16}{9} Q_n^{-1} \frac{1 - \zeta_n^2}{\zeta_n^4} \left(\frac{\omega_{f0}}{\gamma} \right)^2 H_D^{-1}$$

Произведение $h_p a_{n0}$ в рабочей точке при температуре 77К примерно на порядок меньше, чем в рабочей точке при комнатной. Разница вызвана

соответствующими увеличением почти 3 раза поля подмагничивания при снижении температуры до 77K, изменением ζ и H_D .

Система уравнений (5), (6) с полем накачки (3) и модуляцией фазы (4) были решены численно. Огибающие результатов симуляции зависимости амплитуды магнитоупругих колебаний от времени при температурах 293K и 77K предоставлены на рис. 13 и рис. 14 соответственно. Вычисленные графики колебаний были обработаны преобразованием Гильберта для построения их огибающих. Согласно экспериментальным условиям следующие параметры использовались для расчетов при 293K: $Q_n = 700$, $\Gamma = 1.5$, $\alpha = 0.012$, $\zeta = 0.26$, $H = 20$ Э, $h_p = 15$ Э, начальные значения амплитуды $a_{n0} = 3.5$ и фазы $\psi_0 = \pi/2$. В соответствии с экспериментально полученными результатами, взрывное усиление наблюдалось, когда частота второго импульса модулировалась предложенным законом (4) (рис. 14(a)). Когда частотная модуляция импульса накачки выключалась, взрывное усиление не наблюдалось (рис. 14.(b)). Если начальный уровень возбуждений a_{n0} принимался равный нулю, взрывная неустойчивость не наблюдалась ни при каких условиях (рис. 14(c)).

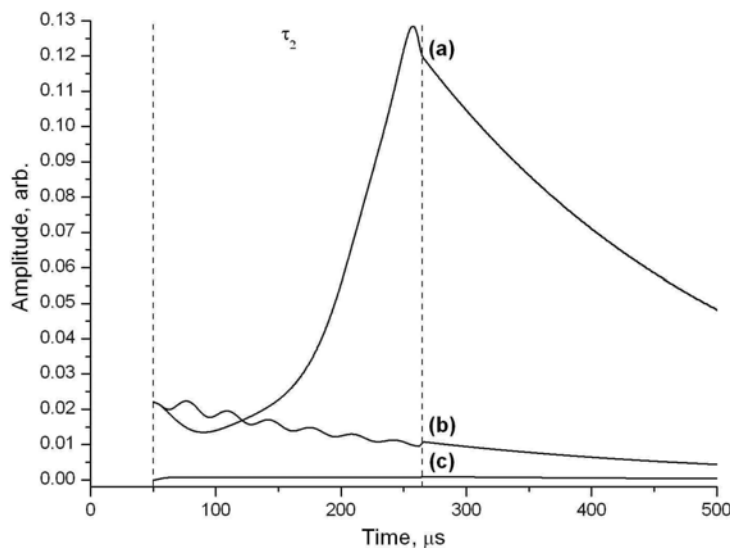


Рис. 14. Теоретические зависимости амплитуды магнитоупругих колебаний при 293 K: (a) – с частотной модуляцией, (b) – без модуляции и (c) – без начального возбуждения $h_0 = 0$, τ_2 – длительность импульса накачки.

Для расчетов, соответствующих температуре 77K, использовались следующие параметры: $Q_n = 10^3$, $\Gamma = 2.2$, $\alpha = 0.003$, $\zeta = 0.45$, $H = 70$ Ое, $h_p = 20$ Э, начальная амплитуда $a_{n0} = 0.17$ и фаза равная $\psi_0 = \pi/2$. Результаты низкотемпературных расчетов предоставлены на рис. 15. Как и при комнатной температуре, взрывное усиление амплитуды колебаний наблюдалось, только в том случае, когда частота импульса накачки модулировалась по закону (4) (рис. 15(a)).

Результаты численных расчетов, предоставленные на рис. 14 и рис. 15 хорошо согласуются с экспериментальными результатами, представленными на Рис. 11 и рис. 12.

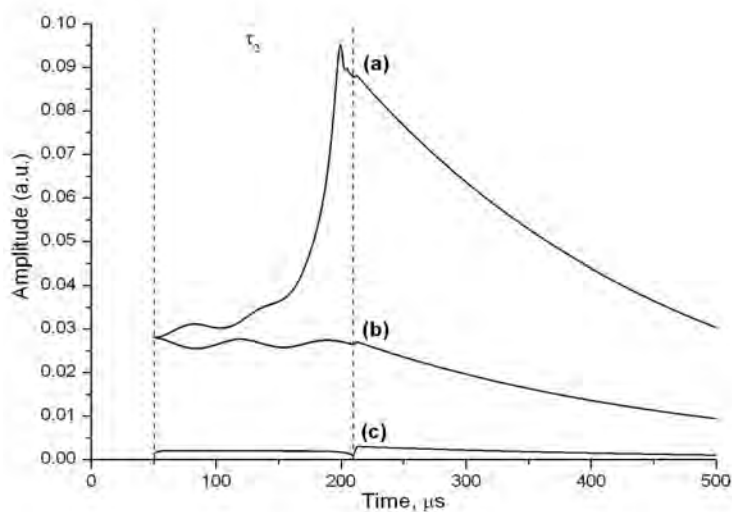


Рис. 15. Теоретические зависимости амплитуды магнитоупругих колебаний при 293 К: (а) с частотной модуляцией, (б) без модуляции и (с) без начального возбуждения $h_0 = 0$, τ_2 – длительность импульса накачки.

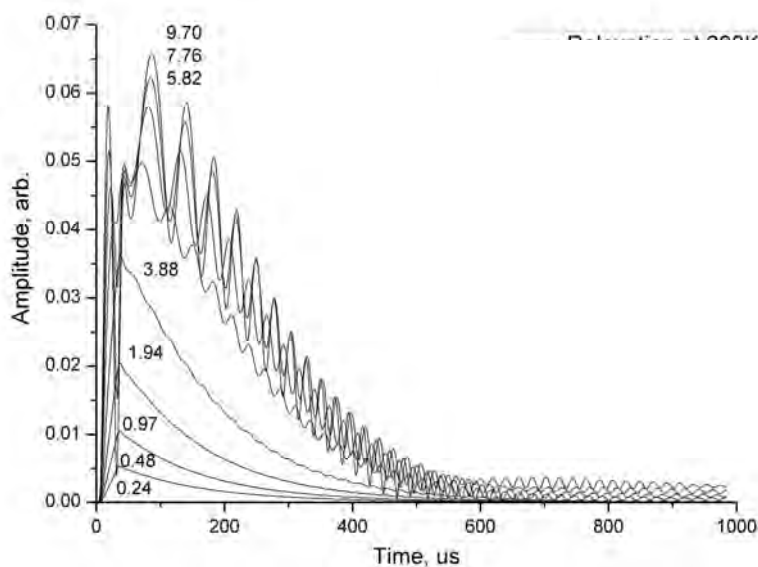


Рис. 16. Свободная релаксация магнитоупругих колебаний контурной моды при 293 К при возбуждении соответствующими амплитудами подкачки h_0 (в Э).

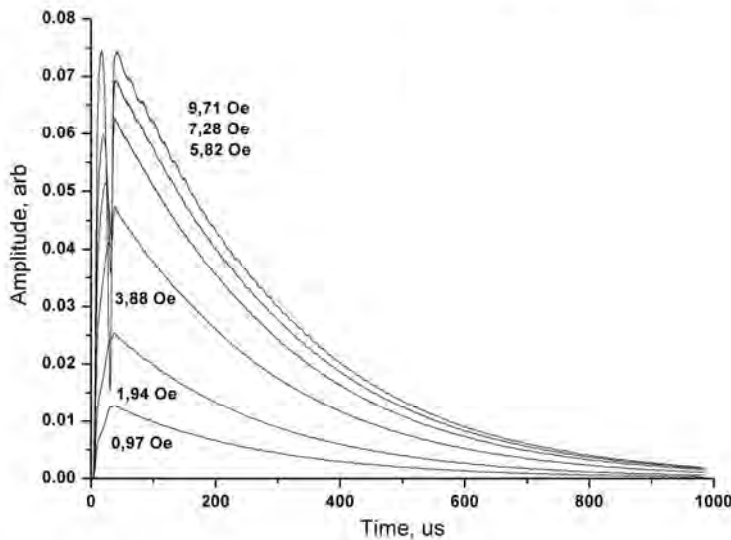


Рис. 17. Свободная релаксация магнитоупругих колебаний контурной моды при 77 К при возбуждении соответствующими амплитудами подкачки h_0 (в Э).

Теоретически рассчитанная фазовая диаграмма запорогового усиления при 293 К (рис. 13(2)) также согласуется с экспериментальными данными при 293 К (рис. 12(1)). Главное различие между взрывной динамикой при 293 К и 77 К выражается в длине временного интервала развития неустойчивости, соответственно, 220 мкс и 160 мкс, а также в величине усиления, которая в 2 раза выше при 293 К. Отношение поля накачки к постоянному полю в экспериментах при 77 К было ниже в сравнении с отношением при комнатной температуре. Несмотря на это, времена нарастания и насыщения запороговых возбуждений существенно короче при 77 К, чем при 293 К вследствие более сильной магнитоупругой связи и большего параметра надкритичности при низкой температуре.

На рис. 16 приведены релаксационные кривые контурной магнитоупругой моды при разных амплитудах первого импульса (подкачки) при 293 К (амплитуды приведены в эрстедах, длительность импульса 20 мкс). В данном случае импульс накачки не подавался. Характер релаксации совпадает с релаксацией образца на графике развития трехфононного процесса рис. 11 после прекращения воздействия импульса накачки. Образец в обоих случаях релаксирует с добротностью $Q = 700$. Биения на высоких амплитудах возникают вследствие возбуждения близлежащей моды. На рис. 17 предоставлены аналогичные релаксационные кривые для температуры 77 К. Образец релаксирует, как и на рис. 12., с добротностью $Q = 1100$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Трех квазифононное связывание, наблюдаемое в монокристалле бората железа FeBO_3 при поперечной электромагнитной накачке, как в комнатной, так и в низкой температурах, демонстрирует типичные характеристики параметрического

возбуждения бозонных триад. Параметрическое усиление триад развивается как взрывная неустойчивость. Порог неустойчивости зависит от амплитуды накачки и амплитуды первоначальных колебаний. Параметрическое усиление ограничено нелинейным сдвигом частоты квазифононов. Когда этот механизм ограничения компенсируется соответствующей модуляцией фазы поля накачки, дальнейшие ограничения определяются нелинейностями магнитоупругой системы высоких порядков. Все эти особенности процесса достаточно хорошо описываются сильно нелинейной моделью магнитоупругих взаимодействий в антиферромагнетике. Наблюдение взрывного усиления квазифононов в FeBO_3 при различных температурах требует оптимального выбора постоянного поля подмагничивания для сочетания достаточно высокого коэффициента магнитоупругой связи с достаточно низким вкладом магнитной составляющей в процессы диссипации упругих возбуждений.

Авторы благодарят Ягупова С.А. и Стругацкого М.Б. за предоставленный кристалл FeBO_3 . Работа была выполнена при поддержке гранта № F33.7/001 Украинского Фонда фундаментальных исследований и посольства Франции в Украине.

Список литературы

1. Ожогин В.И. Анггармонизм смешанных мод и гигантская акустическая нелинейность антиферромагнетиков / Ожогин В.И., Преображенский В.Л. // УФН. – 1988. – Т.155, Вып.4. – С. 593-621.
2. Three-phonon coupled excitations in an antiferromagnet / Preobrazhenskii V.L., Rudenko V.V., Pernod P., and Ozhogin V.I. // JETP Lett. – 2007. – 86 – С. 348
3. Explosive instability of quasi-phonon triads in antiferromagnet under frequency modulated electromagnetic field / Preobrazhensky V., Yevstafyev O., Pernod P., Berzhansky V. // Journ. of Magn. and Magn. Mater. – 2010. – V.322. - N.6. – С.585-588
4. Preobrazhensky V. Explosive dynamics and localization of wave triads in a coupled magnetoelastic system / Preobrazhensky V., Bou Matar O., Pernod P. // Phys. Rev.E. – 2008. – 046603. – С.78
5. Seavey M.H. Acoustic resonance in the easy-plane weak ferromagnets $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and FeBO_3 / Seavey M.H. // Solid State Commun. – 1972. – No. 10. – p.219.
6. Strugatsky M.B. Acoustic resonances in antiferromagnet FeBO_3 / Strugatsky M.B., Skibinsky K.M. // Journ. of Magn. and Magn. Mater. – 2007. – 309 (1). – p.64-70.
7. Andrienko A.V. Study of parallel pumping of magnetoelastic waves in an antiferromagnetic FeBO_3 / Andrienko A.V., Safonov V.L., Yamazaki H. // Journ. Phys.Soc.Japan. – 1998. – V.67, N8. – P.2893-2903.
8. Kotyuzhanski V.Ya. Study of parametric excitation of magnons and phonons in antiferromagnetic FeBO_3 / Kotyuzhanski V.Ya., Prozorova L.A. // Sov. Phys. JETPh. – 1982. – V.83, N4. – P.1567-1575.
9. Pernod P. Dynamic control of elasticity by means of ultrasound excitation in antiferromagnet / Pernod P., Preobrazhensky V. // Journ. of Magn. and Magn. Mater. – 1998. – V.184. – P.173-178.
10. Fetisov Yu. Bistability in a nonlinear magnetoacoustic resonator / Fetisov Yu., Preobrazhensky V., Pernod P. // Journ. of Commun. Tech. and Electr. – 2006. – Vol. 51, N°2. – pp.218-230.
11. Explosive instability of ultrasonic triads under frequency modulated electromagnetic pumping / Preobrazhensky V., Yevstafyev O., Pernod P., Berzhansky V. // Proceedings of IEEE Ultrasonics Symposium, Rome. – 2009. – pp. 2100-2102.
12. Взрывная динамика трехфононной неустойчивости в магнитоупругой системе FeBO_3 / Евстафьев А.И., Преображенский В.Л., Перно Ф., Бержанский В.Н. // Ученые записки

Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия «Физико-математические науки». – 2010. – №1, Ч1. – С. 81-93.

13. Three wave coupling and explosive instability of magneto-elastic excitations in FeBO_3 single crystal / Yevstafyev O., Preobrazhensky V., Pernod P., Berzhansky V. // Journ. of Magn. and Magn. Mater. – 2011. – V.323. – P.1568-1573.

Євстаф'єв О.І. Низькотемпературне трьоххвонне магнітопружне спаровування у монокристалі FeBO_3 / Євстаф'єв О.І., Преображенський В.Л., Перно Ф., Бержанський В.Н. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 159-173.

Експериментально та теоретично досліджена параметрична генерація спарених триад магнітопружних волн у кристалі FeBO_3 під поперечною електромагнітною накачкою у температурах 77 К – 293 К. Теоретичні розрахунки добре узгоджуються з експериментальними результатами. Досліджено магнітопружні властивості монокристалу при низьких температурах, досліджено нелінійний зсув частоти резонансної моди зразка бората заліза.

Ключові слова: магнітопружні хвилі, запорогова вибухова динаміка, трьохбозонне спаровування.

Yevstafyev O. Low temperature three wave magnetoelastic coupling in FeBO_3 single crystal / Yevstafyev O., Preobrazhensky V.L., Pernod P., Berzhansky V.N. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 159-173.

Parametrical generation of coupled magnetoelastic wave triads has been studied experimentally and theoretically in FeBO_3 single crystal under transversal electromagnetic pumping at the temperatures 77K – 293K. Theoretical calculations are in good agreement with experimentally obtained results. Magnetoelastic properties of the sample have been studied in low temperatures, nonlinear frequency shift of the resonance mode of iron borate sample has been researched.

Keywords: magnetoelastic waves, three-boson coupling, nonlinear frequency shift.

Поступила в редакцію 04.11.2010 г.

УДК 539.213

ОТРИМАННЯ НАНОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ШЛЯХОМ КРИСТАЛІЗАЦІЇ АМОРФНИХ СПЛАВІВ

Лисов В.І., Цареградська Т.Л., Турков О.В., Саснко Г.В.

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна
E-mail: tsar_grd@ukr.net*

Проведено експерименти по термообробці аморфних сплавів з метою отримання сплавів в наноструктурному стані. За допомогою високочутливої дилатометричної методики визначено температури початку інтенсивної кристалізації для вихідних зразків та тих, що пройшли термообробку. Показано, що запропоновані режими термообробки приводять до підвищення стабільності аморфних сплавів, про що свідчить збільшення температури початку інтенсивної кристалізації. Отримано сплави в нанокристалічному стані за допомогою запропонованих методів термообробки, що підтверджується результатами рентгенодифракційних експериментів.

Ключові слова: аморфні сплави, нанокристалізація, термообробка.

ВСТУП

Одним з актуальних напрямів сучасної фізики є вивчення структури і властивостей неупорядкованих конденсованих середовищ, до яких відносяться тіла з аморфною структурою, зокрема, аморфні металеві сплави. Відомо, що усі властивості аморфних сплавів залежать від умов їх отримання та наступної обробки. Зовнішні впливи, такі як опромінення частинками різної природи та відпал за температур, значно нижчих за температуру кристалізації T_k (низькотемпературний відпал), призводять до зміни електропровідності, намагніченості, механічних характеристик та ін. [1-4]. Існує ще один тип температурного впливу, дослідження якого було розпочато лише останнім часом – це кріообробка (багатодинний відпал зразків за температури кипіння азоту) [5, 6]. Такий вид обробки призводить до зміни макроскопічних властивостей АМС, а також підвищує часову та температурну стабільність сплавів, що є дуже важливим фактором з практичної точки зору. В зв'язку з цим є актуальним дослідження поведінки аморфних сплавів, як за підвищених, так і за низьких температур, тим більше, що залишаються відкритими питання про механізми впливу зовнішніх факторів на магнітні та механічні властивості аморфних сплавів [7-9].

Отже, важливим напрямком досліджень металевих стекло є розробка методів керованого наноструктурування в процесі термообробки.

Для ряду аморфних сплавів було проведено експерименти по термообробці з метою отримання сплавів в наноструктурному стані. В якості об'єкту досліджень були обрані аморфні сплави на основі бінарної системи Fe-B, які отримувались додаванням до базового сплаву модифікуючих домішок (Si, Nb, Mo, Mn, Ni, Co).

Перший вид термообробки полягав в нагріванні до $T=300^{\circ}\text{C}$ ($t=1$ хвилина) та різкому охолодженні до температури рідкого азоту $T=-196^{\circ}\text{C}$ (77 K) з метою „заморожування” отриманої наноструктури. Іншим видом термообробки було термоцикування: 3 цикла нагрівання до $T=450^{\circ}\text{C}$.

1. ДИЛАТОМЕТРИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ТЕРМООБРОБКИ НА СТАБІЛЬНІСТЬ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ АМОРФНИХ СПЛАВІВ

За допомогою високочутливої дилатометричної методики [10] були визначені температури початку інтенсивної кристалізації для вихідних зразків та тих, що пройшли термообробку.

На рис. 1. наведена температурна залежність відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ для вихідного аморфного сплаву $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ (крива 1) та після нагрівання зразка до $T_{\text{к}}/2+100\text{K}$ +кріообробка, а на рис. 2 – температурні залежності об'ємної частки кристалічної фази $X(T)$ для даного сплаву.

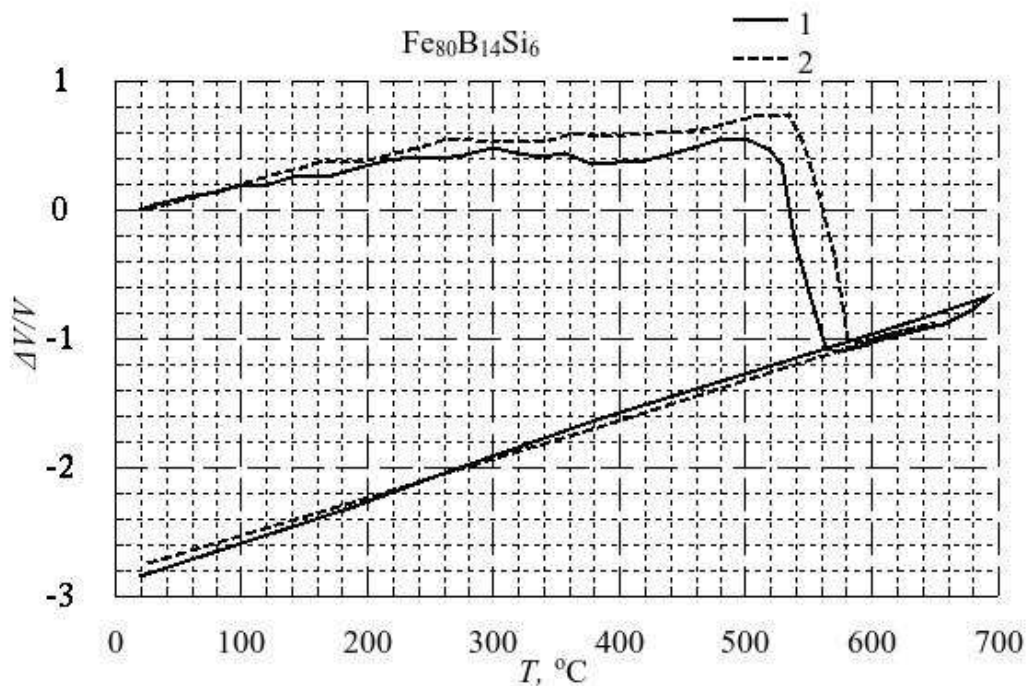


Рис. 1. Температурна залежність відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ для вихідного аморфного сплаву $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ (крива 1) та після нагрівання зразка до $T_{\text{к}}/2+100\text{K}$ +кріообробка (2).

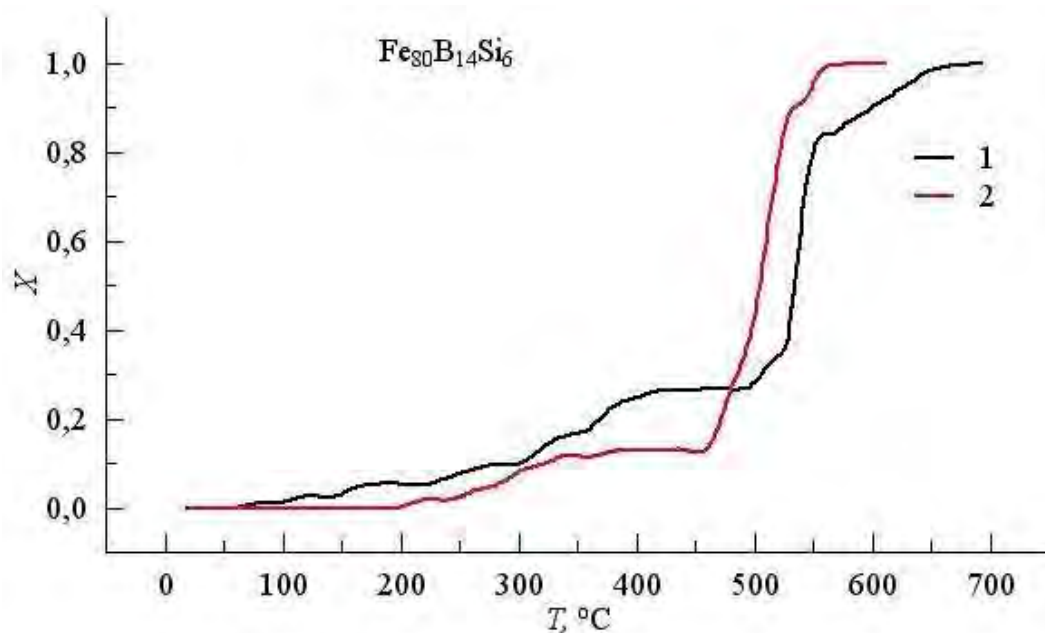


Рис. 2. Залежність об'ємної частки кристалічної фази $X(T)$ сплаву для вихідного аморфного сплаву $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$, (крива 1) та після нагрівання зразка до $T_k/2+50\text{K}$ +криообробка (2).

З рисунків 1 та 2 видно, що температура початку інтенсивної кристалізації після нагрівання до $T_k/2+100\text{K}$ +криообробка збільшилась на 40 K.

Таблиця 1
Температури початку інтенсивної кристалізації для двох випадків: вихідного зразка при неперервному нагріванні та після термообробки

Склад аморфного сплаву	T_k , °C (вихідний)	T_k^1 , °C після термообробки: $T_k/2 + 100\text{K} + \text{криообробка}$
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$	500	540
$\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$	480	520
$\text{Fe}_{75,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_3$	565	560
Склад аморфного сплаву	T_k , °C (вихідний)	T_k^1 , °C після термообробки: $T_k/2 + 50\text{K} + \text{криообробка}$
$\text{Fe}_{76,2}\text{B}_{14}\text{Si}_6\text{Ni}_{3,8}$	500	525
$\text{Fe}_{78}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_1\text{Mo}_3$	525	520

В таблиці 1 наведено дані температур початку інтенсивної кристалізації для двох випадків: вихідного зразка при неперервному нагріванні та після термообробки. З таблиці 1 видно, що запропонована термообробка приводить до збільшення інтервалу температурно-часової стабільності більшості аморфних сплавів, про що свідчить збільшення температури початку інтенсивної кристалізації на (25-40) К. Для сплавів з більш високим вмістом молібдену T_k майже не змінилась, що можна пояснити тим, що наявність високотемпературної домішки (Mo) стабілізує структуру сплаву.

На рис. 3 представлено експериментальні результати досліджень відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ при неперервному нагріванні та охолодженні сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$ у вихідному стані та після термоцикування (3 цикла нагрівання до $T = 450^\circ\text{C}$).

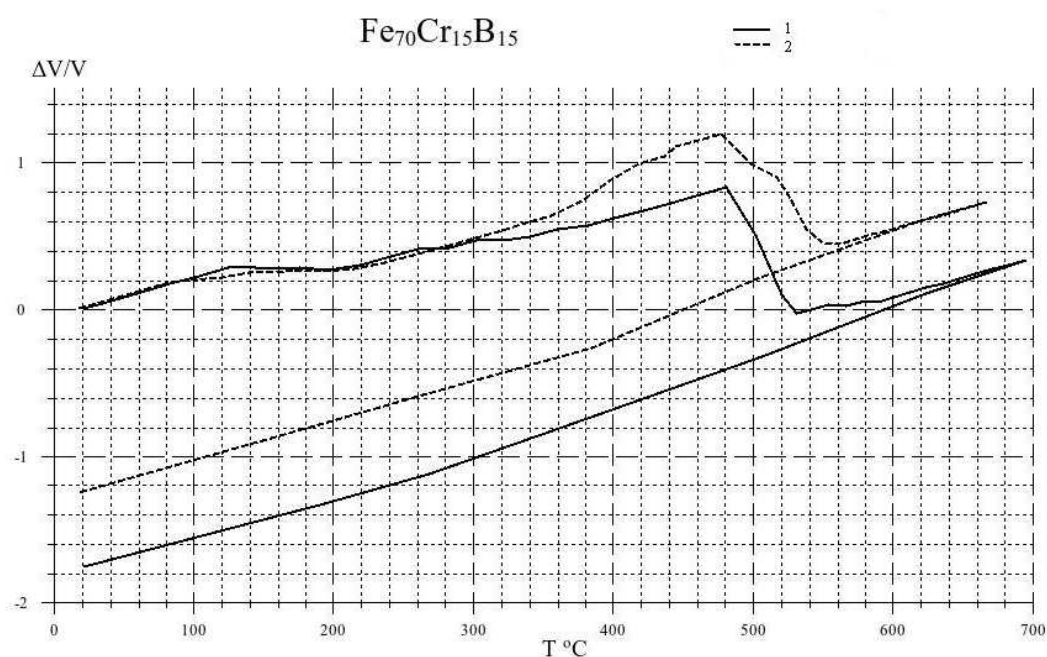


Рис. 3. Температурна залежність відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ при неперервному нагріванні та охолодженні аморфного сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$ у вихідному стані (1) та після термоцикування: 3 цикла нагрівання до $T = 450^\circ\text{C}$ (2).

З порівняння залежностей, наведених на рис. 3, видно, що температура початку інтенсивної кристалізації T_k для вихідного аморфного сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$ складає $T_k = 480^\circ\text{C}$, після термоцикування майже не змінюється (лише суттєво змінюється коефіцієнт лінійного розширення в аморфному стані в діапазоні температур $300^\circ\text{C} \div 480^\circ\text{C}$).

2. РЕНТГЕНОГРАФІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ТЕРМООБРОБКИ НА СТРУКТУРУ АМОРФНИХ СПЛАВІВ

На рис. 4 представлено дифрактограму (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$ у вихідному аморфному стані (1) та після нагрівання зразка до $T_k/2+100\text{K}$ +кріообробка (2).

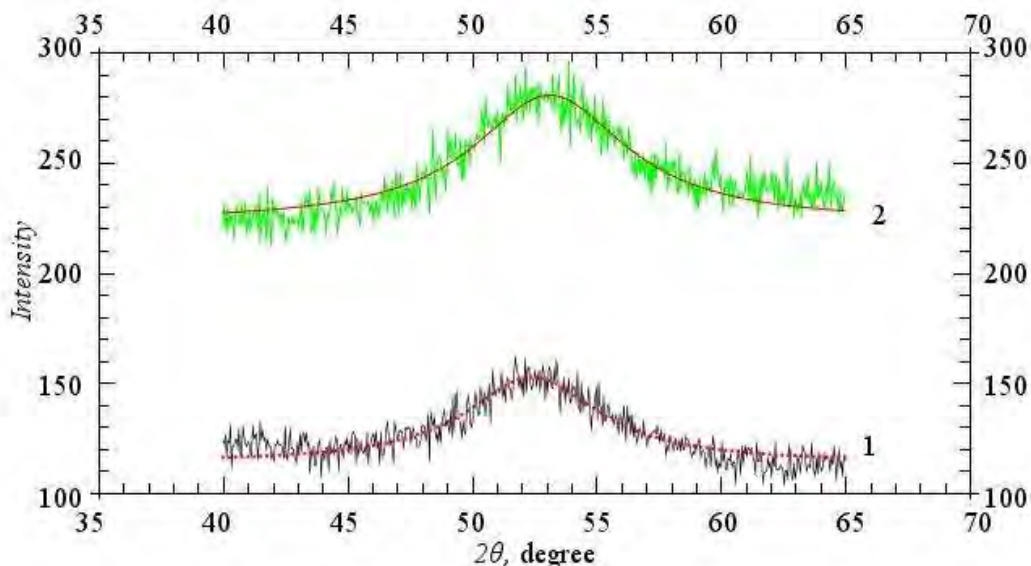


Рис. 4. Дифрактограма (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$ в початковому аморфному стані (1) та після нагрівання зразка до $T_k/2+50\text{K}$ +кріообробка (2).

В таблиці 2 представлено визначені з дифрактограми параметри, а саме: кутове положення максимумів, значення напівширини дифракційної лінії, модуля хвильового вектору та розміру нанокристалів, оцінених за формулою Селякова-Шерера [11]:

$$L = \frac{\lambda}{\cos \theta \Delta}, \quad (1)$$

де L – розмір нанокристалів, що складають зразок, λ – довжина хвилі рентгенівського випромінювання ($\lambda(\text{C}_0) = 0,179026$ нм, θ – кут дифракції (град), Δ – півширина дифракційної лінії (рад).

На дифрактограмах аморфних сплавів, що пройшли кріообробку у порівнянні із вихідними спостерігаються наступні зміни: незначне зміщення положення дифракційного максимуму 2θ в бік більших кутів дифракції; зменшення півширини дифракційного максимуму Δ ; збільшення модуля хвильового вектора $K = 4\pi \sin \theta / \lambda$ та збільшення розміру нанокристалів L .

Таблиця 2
Характеристики, визначені з дифрактограми для сплаву $\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$

$\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$	$(2\theta)_{\max}, ^\circ$	$\Delta, ^\circ$	$K = 4\pi \sin \theta / \lambda \text{ (нм}^{-1}\text{)}$	$L, \text{ (нм)}$
Вихідний(аморфний) зразок	52,37	3,71	30,955	3,11
Після термообробки: нагрівання зразка до $\frac{T_k}{2} + 100\text{K}$ +кріообробка	53,15	3,50	31,376	3,30

На рис. 5 представлено дифрактограму (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$ в початковому аморфному стані та після термоцикування.

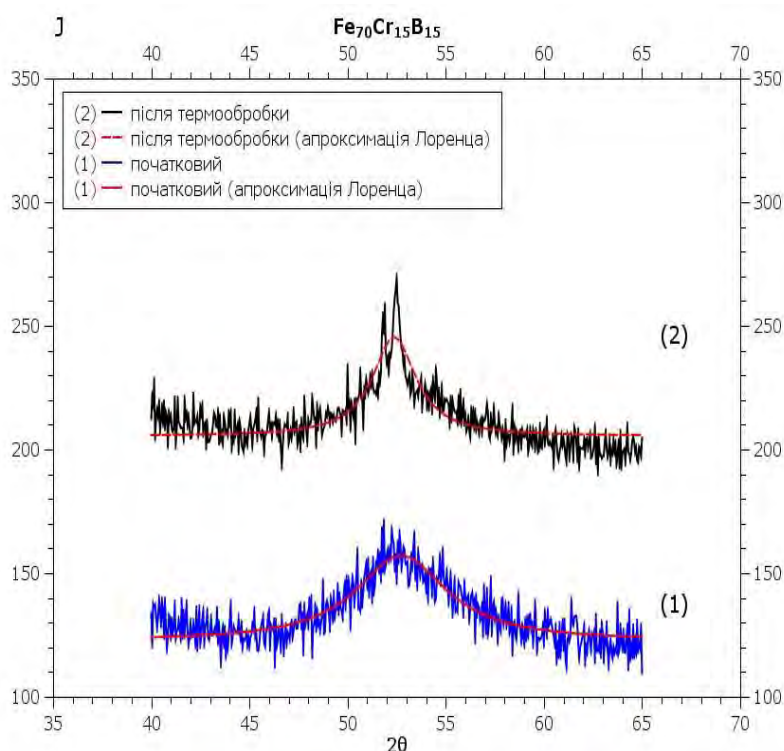


Рис. 5. Дифрактограма (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$ в початковому аморфному стані (1) та після термообробки: 3 цикла нагрівання до 450°C (2).

В таблиці 3 представлено визначені з дифрактограми кутові положення максимумів, значення напівширини дифракційної лінії, хвильового вектор та розміру нанокристалів.

Таблиця 3
Характеристики, визначені з дифрактограми для сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$

$\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$	$(2\theta)_{\text{max}}, ^\circ$	$\Delta, ^\circ$	$K = 4\pi \sin \theta / \lambda \text{ (нм}^{-1}\text{)}$	$L, \text{ (нм)}$
Початковий аморфний зразок	52,626	2,694	31,07	4,2
Після термообробки (3 цикла нагрівання до 450°C)	52,374	1,321	30,93	8,2

Для сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$, що пройшов термоцикування спостерігається зміщення положення дифракційного максимуму 2θ в бік менших кутів дифракції та зменшення хвильового вектора $K = 4\pi \sin \theta / \lambda$. Значення півширини дифракційного максимуму Δ зменшується, а розмір нанокристалів збільшується майже вдвічі: з 4,2 нм до 8,2 нм. Загалом, зміни, що спостерігаються можна пояснити формуванням нанокристалічного стану.

ВИСНОВКИ

1. Запропоновано методи отримання наноструктурного стану з початкового аморфного, а саме кріообробка та термоцикування.
2. За допомогою запропонованих методів керованого наноструктурування отримано сплави в нанокристалічному стані, що підтверджується результатами рентгенодифракційних експериментів.
3. Показано, що за допомогою термоцикування отримується структура з більшим розміром нанокристалів, ніж при кріообробці.

Список літератури

1. Шпак А.П. Кластерные и наноструктурные материалы / Шпак А.П., Куницкий Ю.А., Лысов В.И. – Київ: Академперіодика, 2002. т. 2. – 540 с.
2. Фізика іонно-електронних рідин : монографія / Булавін Л.А., Лисов В.І., Рево С.Л. та ін. – К. : Вид.-поліграфічний центр „Київський університет”, 2008. – 367 с.
3. Золотухин И.В. Физические свойства аморфных металлических материалов / Золотухин И.В. – М.: Металлургия, 1986. – 176 с.
4. Кристалізація і аморфізація металевих систем / Шпак А.П., Лисов В.І., Куницкий Ю.А., Цареградська Т.Л. – Київ: Академперіодика, 2002. – 207 с.
5. Structural relaxation of amorphous metallic alloys / Dokukin M.E., Perov N.S., Beskrovnyi A.I., Dokukin E.B. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2004. – V. 272-276S. – P. 1151.
6. Influence of boundary conditions on the parameters of the low temperature deltaT-effect / Zaichenko S., Radkovskaya A., Sivov A., Glezer A. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2003. – V. 258-259. – P. 567.
7. The cryogenic treatment effect on the magneto-impedance properties of the Co- and Fe-based amorphous ribbons / Dokukin M.E., Perov N.S., Kim Chong-Oh, Kim Cheol Gi // Physica Status Solidi (a). – 2004. – V. 201. – № 8. – P. 1988-1991
8. Neutron Scattering Investigation Of Co- And Fe- Based Amorphous Alloys / Dokukin E.B., Beskrovnyi A.I., Kuklin A.I. et al // Physica status solidi (b). – 2004. – V. 241. – № 7. – P. 1689-1692.

9. Исследование изменения микроструктуры аморфных металлических сплавов, после низкотемпературной обработки, методом нейтронной дифракции / Бескровный А.И., Докукин Е.Б., Докукин М.Е., Перов Н.С. – «Совещание по исследованиям на реакторе ИБР-2», Дубна, Россия. – 2002. – 72 с.
10. Новиков В.Н. Методика дилатометрических исследований металлических стекол / Новиков В.Н., Рябчиков Б.Е. // Заводская лаборатория. – 1989. – т. 55. – № 37. – С. 49-53.
11. Иверонова В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей : учеб. Пособие для физ. спец. вузов, 2-е изд. / Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. – М.: МГУ, 1978. – 277 с.

Лысов В.И. Получение нанокристаллических материалов кристаллизацией аморфных сплавов / Лысов В.И., Цареградская Т.Л., Турков О.В., Саенко Г.В. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия: Физико-математические науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 174-181.

С целью разработки методов управляемого наноструктурирования путем кристаллизации аморфных сплавов проведен ряд экспериментов. С помощью высокочувствительной дилатометрической методики определены температуры начала интенсивной кристаллизации для исходных образцов и тех, что прошли термообработку. Показано, что предложенные режимы термообработки приводят к повышению стабильности аморфных сплавов, о чем свидетельствует увеличение температуры начала интенсивной кристаллизации. Получены сплавы в нанокристаллическом состоянии с помощью предложенных режимов термообработки, которая подтверждается результатами рентгенодифракционных экспериментов.

Ключевые слова: аморфные сплавы, нанокристаллизация, термообработка.

Lysov V.I. Receipt of nanocrystalline materials a way by crystallization of amorphous alloys / Lysov V.I., Tsaregradskaya T.L., Turkov O.V., Saenko G.V. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 174-181.

With the purpose of development of methods of receipts of the nanocrystalline state by crystallization of amorphous alloys the row of experiments is conducted. By the highly sensitive dilatometric method temperatures of began intensive crystallization for initial standards and those, that passed heat treatment were certain. It is rotined that over the offered modes of heat treatment bring to the increase of stability of amorphous alloys, what the increase of temperature of beginning of intensive crystallization testifies to. Alloys in the nanocrystalline state by the offered modes of heat treatment which is confirmed the results of {x-rays diffraction methods experiments were got.

Keywords: amorphous alloys, nanocrystallization, heat treatment.

Поступила в редакцию 10.11.2010 г.

УДК 621.315.592; 535.37

ПОЛІРУВАННЯ ПОВЕРХНІ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО n -InP

Сичікова Я.О., Кідалов В.В., Гайчук А.С.

Бердянський державний педагогічний університет, Бердянськ, Україна

E-mail: yanasuchikova@mail.ru

В роботі розглядається методика електрохімічного полірування монокристалу n -InP. Показано, що за умови використання у якості електроліту розчину плавикової та бромоводневої кислот, можна досягти високої якості полірованої поверхні. Представлено механізм неселективного електрохімічного травлення напівпровідників, результатом якого є отримання дзеркально гладкої поверхні.

Ключевые слова: поруватий InP, анодне травлення, дзеркально-гладка поверхня.

ВСТУП

Від стану поверхні напівпровідникового матеріалу, її дефектності залежить досконалість структури епітаксціальних та поруватих шарів нарощуваних на неї при виготовленні напівпровідникових приладів. Задачею полірування є усунення слідів попередньої обробки та різних поверхневих нерівностей (штрихів, подряпин, неглибоких раковин та інших дефектів) з метою отримання гладкої поверхні, що має високу здатність відбиття світла. Процедура полірування кристалу має критичне значення у тих випадках, коли від стану поверхні кристалу залежить якість подальшої обробки (наприклад, при виготовленні поруватих шарів). Навіть незначні дефекти мікронного порядку можуть значно впливати на перебіг всього технологічного процесу. Наприклад, в роботі [1] досліджувалося явище пороутворення фосфіду індію з нанесеними на його поверхню наноподряпинами. В результаті встановлено, що подряпини являють собою місцями першочергового утворення пор. Різні пояснення процесу полірування можна звести до наступних трьох напрямів:

- 1) механічне полірування – механізм процесу пояснюється «зчищенням» мікронерівностей з поверхневого шару, а хід процесу – такими механічними властивостями матеріалу, як твердість та пластичність.
- 2) хімічне полірування – процес пояснюється в основному видаленням оксидних плівок, що постійно утворюються під дією навколишнього середовища.
- 3) Фізичне полірування – основними причинами, що визначають процес вважають температуру плавлення та теплопровідність поліруючого матеріалу.

Кожен з цих типів полірування матеріалу має свої переваги та недоліки, але слід мати на увазі, що вибір типу залежить від матеріалу та вимогами до його чистоти та поверхневої досконалості.

Слід відмітити, що при використанні напівпровідників у якості сировини для виготовлення наноматеріалів, фізичні та механічні методи не являються ефективними, так як поверхня оброблюваного кристалу може мати рівень шорсткості, що не є допустимим в межах нанотехнологій.

У даній роботі представлено метод електрохімічної поліровки кристалів фосфіду індію. Відомо, що електрохімічне травлення напівпровідників, зокрема InP активно використовується для отримання поруватих та текстурованих структур [2 - 4]. Проте, змінюючи умови травлення, можливо проводити якісне полірування кристалів, що є не менш важливим технологічним аспектом сучасної нанотехнології.

1. ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

Електрохімічне полірування відбувається занурюванням обробленою поверхні у ванну з хімічно активними розчинами, де в результаті виникаючих хімічних та локальних електрохімічних процесів відбувається розчинення напівпровідника. Всі процеси електрохімічного полірування супроводжуються активним виділенням газу та пару кислот (в залежності від складу травника). Одним з основних переваг електрохімічного полірування є його простота. До недоліків такого полірування можна віднести складність коректування (піддержування елементу) розчинів та малий термін їх служби.

Для експерименту були обрані зразки монокристалічного *p*-InP (100) з концентрацією носіїв $2,3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Як електроліт використалися розчини плавикової кислоти. Щільність струму вибиралася в діапазоні від 30 до 180 mA/cm^2 , час травлення від 5-30 хвилин. Катодом в електрохімічній комірці служить пластина платини.

При подачі напруги на електроди починається процес розчинення матеріалу. Розчинення відбувається переважно на виступах мікронерівностей поверхні в наслідок більш високої щільності струму на їх верхівках. Крім того, впадини між нерівностями заповнюються продуктами розчинення: оксидами, солями, що мають понижену провідність. В результаті селективного розчинення, тобто більшої швидкості розчинення виступів, мікронерівності згладжуються і оброблювана поверхня набуває металевий блиск. Електрополірування покращує електрофізичні характеристики зразків, так як зменшується глибина мікротріщин, поверхневий шар оброблюємих поверхонь не деформується, виключаються термічне змінення структури, підвищується корозійна стійкість.

2. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Процес поліруючого травлення може мати місце лише за умови гомогенності фізико-хімічних властивостей оброблювальної пластини напівпровідника. Для гомогенізації поверхні необхідно забезпечити умови, за яких швидкість електронного обміну між гетерогенними у фізико-хімічному відношенні точками поверхні буде більше або дорівнювати швидкості електронного обміну між цими точками і травником.

Згідно відомим теоріям ефект хімічного або електрохімічного полірування може бути досягнуто за умови, що в процесі травлення на поверхні напівпровідника утворюється в'язка плівка з продуктів розчинення напівпровідника. Такі плівки є гомогенними і мають велике значення питомого опору. Це призводить до

зменшення швидкості розчинення, яке в проходить через високоомну гомогенну плівку. Тому для досягнення ефекту поліровки необхідно застосовувати в'язкі розчини, часто при додаванні інгібіторів.

На рис. 1 зображено типову залежність щільності струму від напруги при електрохімічному поліруванні монокристалу фосфіду індію.

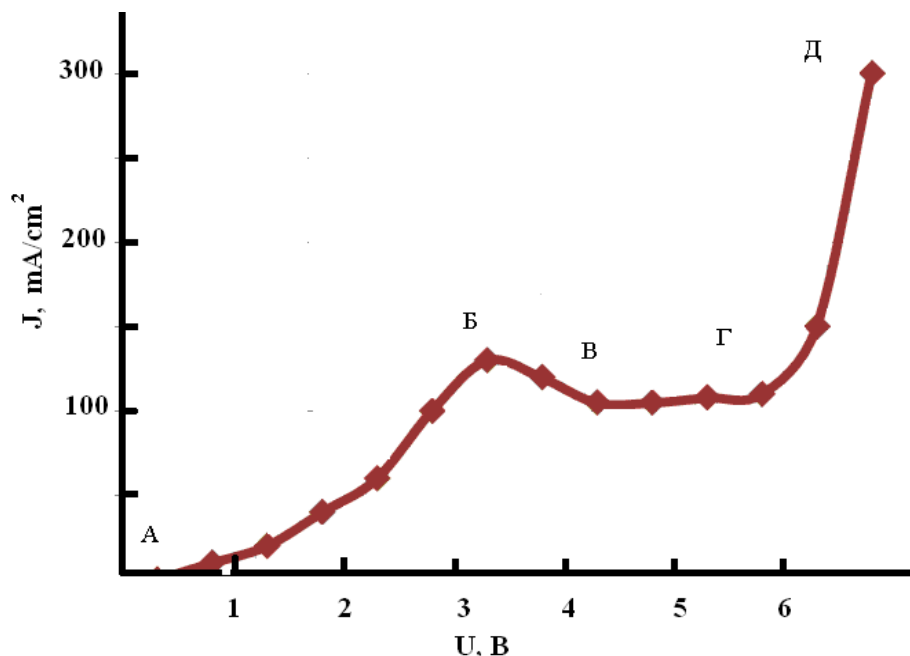


Рис. 1. Типова залежність щільності струму від напруги при електрохімічному поліруванні фосфіду індію.

На ділянці АБ підвищення щільності струму майже пропорційно збільшенню напруги. На ділянці БВ режим нестабільний, спостерігається коливання струму і напруги. Граничний струм, відповідний ділянці ВГ, характеризує процес формування на аноді пасивної плівки. При цьому підвищення напруги в досить широкому інтервалі не супроводжується зміною щільності струму. По досягненні напруги, відповідної точці повороту Г на кривій, починається новий процес – утворення газоподібного кисню. Залежно від концентрації електроліту та оброблюваного кристалу полірування ведуть при режимах, відповідних різним ділянкам кривої.

Слід зазначити, що на цей процес впливають різні чинники (стан поверхні, електроліт, режими травлення тощо).

На рис. 2 показано протікання процесу електрохімічного полірування. Завдяки спеціально підбраному складу електроліту і створюваним умовам (утворення плівки з підвищеного опору) розчинення здійснюється нерівномірно.



Рис. 2. Схема протікання електрохімічного полірування. 1 – кристал, 2 – окисна плівка підвищеного опору, 3 та 4 – макро- та мікрорізступы відповідно.

У першу чергу розчиняються найбільш виступаючі точки 3 (виступи), внаслідок чого шорсткість зменшується, а потім зникає, і поверхня деталі стає гладкою і блискучою. Селективне розчинення елементів протікає з одночасним отриманням блиску.

Видалення великих виступів 3 називається макро-поліруванням, а розчинення мікроскопічно малих нерівностей 4 – мікро-поліруванням. Якщо макро- та мікро-полірування протікає одночасно, то поверхня набуває гладкості і блиск. У ряді випадків ці якості можуть бути незв'язаними один з одним, тобто блиск може досягатися без згладжування, а згладжування – без блиску. У процесі електрохімічного полірування на поверхні анода (полірованої деталі) утворюється окисна або гідроокисна плівка. Якщо ця плівка рівномірно покриває поверхню, то вона створює умови, необхідні для протікання мікро-полірування. Зовнішня частина цієї плівки безперервно розчиняється в електроліті. Тому для успішного проведення процесу необхідно створення умов, в яких існувало б рівновага між швидкостями утворення окисної плівки і швидкістю її хімічного розчинення з тим, щоб товщина плівки підтримувалася незмінною. Наявність плівки обумовлює можливість обміну електронами між поліруючим зразком та іонами електроліту без небезпеки місцевого руйнування кристалу агресивним електролітом. Макрополірування також є процесом, залежним від наявності прианодної плівки. Будучи більш товстою в поглибленнях і більш тонкою на виступах, ця плівка сприяє їх прискореному розчиненню, так як на виступах створюється більш висока щільність струму, а електричний опір над ними менший, ніж над поглибленнями. Ефективність дії плівки збільшується з підвищенням її внутрішнього опору.

Експериментально було встановлено, що для якісного полірування поверхні n -InP необхідно використовувати наступний електроліт: $\text{H}_2\text{O}:\text{HF}:\text{HBr}=5:5:1$. При цьому для досягнення ефекту час процесу повинен складати 15 хв. При цьому для досягнення ефекту час процесу повинен складати 15 хв.

Зміна даного співвідношення у бік збільшення концентрації HF приводить до осадження на полірованій поверхні кристалітів, що містять значну долю фтору. Якщо концентрація плавикової кислоти нижча, то спостерігається розтравлювання поверхні а утворення поруватого шару. Використання бромоводневої кислоти є необхідною умовою для отримання дзеркально гладкої поверхні, за її відсутності зразки після полірування мають високий рівень шорсткості.

ВИСНОВКИ

Таким чином, при використанні травника для неселективного травлення фосфіду індію *n*-типу до складу якого входить плавикова та бромоводнева кислоти у вказаних вище концентраціях, можливим стає якісне полірування поверхні напівпровідника відмінної якості. Перевагою такого способу полірування є його низька вартість, легкість виконання, можливість обробляти партію зразків по всій поверхні злитків.

Список літератури

1. Masahiro Seo. Selective formation of porous layer on n-type InP by anodic etching combined with scratching / Masahiro Seo, Tadafumi Yamaya // *Electrochimica Acta*. -2005, 51. – с. 787–794.
2. Сычикова Я.А. Формирование регулярной пористой структуры *p*-InP / Сычикова Я.А., Кидалов В.В., Сукач Г.А. // *ФИП*. – 2010. – Т. 8, № 1. – с. 81-87.
3. Suchikova J.A. Morphology of porous n-InP (100) obtained by electrochemical method / Suchikova J.A., Kidalov V.V., Sukach G.A. // *Functional materials*. – 2010. – 17. №1. – p. 1-4.
4. Taketomo Sato. Electrochemical Formation of Size-Controlled InP Nanostructures Using Anodic and Cathodic Reactions / Taketomo Sato, Toshiyuki Fujino, and Tamotsu Hashizume // *Electrochemical and Solid-State Letters*. – 2007. – V. 10(5). – P. H153-H155.

Сычикова Я.А. Полирование поверхности монокристаллического *n*-InP / Сычикова Я.А., Кидалов В.В., Гайчук А.С. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия: Физико-математические науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 182-186.

В работе рассматривается методика электрохимической полировки монокристалла *n*-InP. Показано, что при использовании в качестве электролита раствора плавиковой и бромоводородной кислот, можно достичь высокого качества полированной поверхности. Представлен механизм неселективного электрохимического травления полупроводников, результатом которого является получение зеркально гладкой поверхности.

Ключові слова: пористий фосфід індія, анодне травлення, зеркально гладкая поверхность.

Suchikova J.A. Polishing of monocrystalline *n*-InP / Suchikova J.A., Kidalov V.V., Gaichuk A.S. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 182-186.

In this paper the method of electrochemical polishing of single crystal *n*-InP. It is shown that when used as an electrolyte solution of hydrofluoric and hydrobromic acids, can achieve high quality polished surface. The mechanism non-selective electrochemical etching of semiconductors, the result of which is to receive a mirror smooth surface.

Keywords: porous indium phosphide, electrochemical etching, a mirror smooth surface.

Поступила в редакцию 11.11.2010 г.

УДК 621.315.592 (PACS 621.315.592)

ОТРИМАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ПОРУВАТОГО ШАРУ GaP

Яценко Ю.І.¹, Кідалов В.В.¹, Сукач Г.О.²

¹ Бердянський державний педагогічний університет, Бердянськ, Україна

² Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ-041, Україна

E-mail: shadow_jura@mail.ru

У роботі розглянуто метод отримання пористого слою на монокристалічній поверхні фосфіду галію за допомогою методу електрохімічного травлення у розчині $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Досліджено морфологію та хімічний склад отриманої поверхні. У результаті експерименту було встановлено, що утворилася макropориста поверхня, її хімічний склад показав, що поруватий шар достатньо стійкий до окислення.

Ключові слова: фосфід галію, електрохімічне травлення, метод EDAX, поруватий шар.

ВСТУП

Нанокристалічні матеріали — нанокомпозити (НК) привертають увагу дослідників дякуючи якісно новим властивостям, які відсутні в тих же речовинах в чисто аморфній або кристалічній фазах [1,2]. Ці властивості обумовлені як дуже великою питомою поверхнею меж розділу між нанокристалами, так і проявом квантово-розмірних ефектів в окремих нанокристалах. Характерним прикладом матеріалів цього класу може служити пористий кремній, властивості якого інтенсивно вивчаються останнім часом [3-5]. Разом з детальнішим дослідженням структури пористого кремнію і спробами однозначно інтерпретувати природу його інтенсивної фотолюмінесценції (ФЛ) робляться спроби одержати подібні наноструктуровані (пористі) НК на основі інших напівпровідників. По-перше, порівняння і аналіз властивостей цих НК можуть допомогти виявити механізми фотолюмінесценції і, по-друге, нові НК представляють інтерес самі по собі як нові матеріали на основі відомих сполук.

Велика кількість робіт, присвячених отриманню і дослідженню властивостей пористого кремнію, ініційована знайденою можливістю трансформації фізико-хімічних властивостей початкового матеріалу (кремнію) за допомогою достатньо простого способу дії, а саме — анодного травлення. Представляється вельми перспективним розширення області застосування цього способу на інші напівпровідникові матеріали, зокрема на фосфід галію, що є одним з перспективних матеріалів напівпровідникової електроніки. У разі позитивного результату це дозволить розширити спектральний діапазон люмінесцентної електроніки, а також створити нові типи світло діодів і лазерів. Крім того, використовуючи пористий фосфід галію (por-GaP) як проміжний шар, можна одержати нові типи гетеропереходів. Спроби, зроблені в цьому напрямі, показали, що ця проблема може бути успішно розв'язана. Особливий інтерес може викликати зіставлення властивостей пористих структур, виготовлених з таких різних по своїх фізико-хімічних властивостях матеріалів, як кремній і фосфід галію.

У попередніх роботах нами вже були зроблені успішні спроби отримати поруватий шар на монокристалічному фосфіді галію. У роботі [6] було отримано пористий GaP та досліджено його випромінювальну рекомбінацію. У роботі [7] було зроблено вдалу спробу осадження нанорозмірних частинок CdSe на розвинену поверхню пористого GaP. У даній роботі було отримано порувату структуру фосфиду галію за допомогою вдосконаленої, у порівнянні з іншими спробами, методикою електрохімічного травлення монокристалічної підкладки. Та було вперше проведено рентгеноструктурний аналіз та досліджено морфологію отриманих за даною методикою зразків.

1. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ

Для експерименту нами були використані зразки монокристалічного фосфиду галію з дзеркально гладкою поверхнею (111), леговані телуrom до концентрації $n = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Усі зразки мають гладку поверхню навіть на атомному рівні та не мають домішків інших хімічних елементів адсорбованих до поверхні монокристалічного GaP. Останній факт підтверджується тим, що фосфід галію є дуже стійким відносно впливу навколишнього середовища [8].

При попередніх дослідженнях динаміки пороутворення на поверхні монокристалічного GaP, нами було визначено, що ядра нових пор зароджуються при постійній напрузі пороутворення U_p . Також нами було визначено, що для монокристалу з такими параметрами напруга пороутворення складає 16-17 В. За допомогою растрового електронного мікроскопу було показано, що найефективніше для утворення пористого шару використовувати кисле середовище $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ у співвідношенні 1:1. Спираючись на ці данні попередніх досліджень ми встановили, що оптимальні параметри системи катод(платина)-електроліт-анод(зразок GaP) будуть наступні: електроліт – кисле середовище $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$; напруга пороутворення 16-17 В; щільність струму створення поруватої структури $j = 80 \text{ мА} / \text{см}^2$.

На першому етапі експерименту монокристалічний зразок фосфиду галію піддавався електрохімічному травленню на протязі 10 хв. при напрузі пороутворення. Це привело к зародженню нових ядер пор на поверхні монокристалу, густина яких склала приблизно 80% від загальної площі монокристалу. На другому етапі було збільшено щільність струму до 80 мА/см². Зразок травився при таких умовах ще 10 хв. Після створення пористого шару зразок піддавався старінню на протязі тижня.

Результати дослідження хімічного складу на растровому електронному мікроскопі показали що на поверхні відсоткова доля домішок складає близько 1%, а часткова доля кисню 0,43%. Завдяки цьому можна стверджувати, що пориста поверхня є відносно чистою.

2. РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Під час старіння на протязі тижня зразки проявили досить високу стійкість до впливу зовнішнього середовища. За допомогою методу енерго-дисперсійного аналізу рентгенівських променей (EDAX) було досліджено хімічний склад поверхні зразка. Результати хімічного аналізу представлені на спектрограмі рис. 1, а кількісна доля кожного з елементів у процентному співвідношенні представлені у таблиці 1.

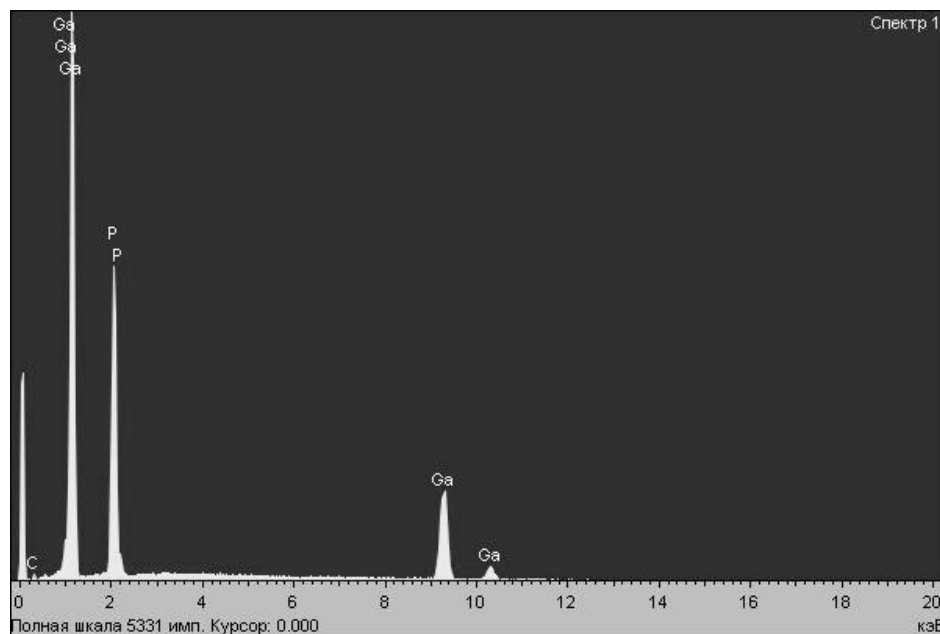


Рис. 1. Спектрограма хімічного складу поруватої поверхні отримана методом EDAX.

Таблиця 1
Кількісний вміст хімічних елементів на поверхні зразка

Хімічний елемент	O	F	P	Ga	Підсумок
Вміст хімічного елементу, %	0.51	0.04	30.28	69.17	100.00

За результатами хімічного аналізу можна зробити висновок, що поруватий фосфід галію досить стійкий до впливу зовнішнього середовища, та досить слабо окислюється. Крім того, речовини, які приймають участь у процесі травлення, майже не впливають на склад поверхні.

На рис. 2. приведено фотографію морфології поруватого шару фосфіду галію отриману на растровому електронному мікроскопі. Діаметр пор складає від 0,5 до

1,5 мкм. Як ми можемо судити з фотографії, пори розташовані у хаотичному порядку. Дослідивши скол поруватого шару на растровому електронному мікроскопі ми визначили, що він має товщину 10 мкм, та складну ветвисту структуру.

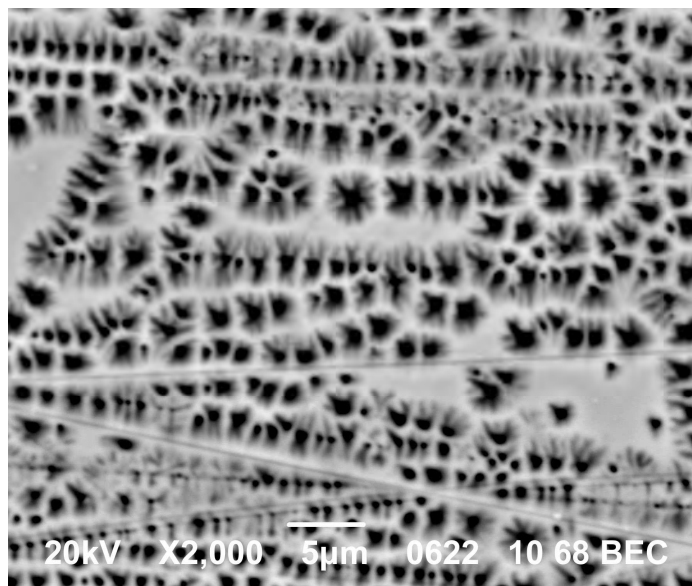


Рис. 2. Зображення пористого слою фосфіду галію.

Травлення монокристалічного зразку за використаною у даній роботі методикою призводить до появи основних ядер пор, при напрузі поро виникнення, які розміщені на місцях виходу на поверхню дислокацій, або іншого роду дефектів поверхні. Коли щільність струму при травленні зразку досягає максимального значення, це є свідченням того, що щільність пор на поверхні досягла максимального значення і далі розпочинається збільшення пор углиб монокристалу. Під час збільшення пор вглиб зразку з'являються додаткові пори які розміщені радіально до основної пори та перпендикулярно до напрямку її росту. Ці додаткові пори іноді утворюються на стільки близько одна до одної, що стінки між сусідніми порами стають досить тонкими, і руйнуються під дією внутрішнього тиску, який виникає в середині пор під час травлення. Цим можна пояснити своєрідні розтрави які ми можемо спостерігати на рис. 2 навколо основних ядер пор.

На рис. 3. приведено результати рентгеноструктурного аналізу пористої поверхні. Фазовий аналіз закристалізованих областей визначали за допомогою рентгенівської установки ДРОН-3 (Cu-K_α- випромінювання). По результатам зйомки виконувався якісний фазовий аналіз, який давав можливість провести ідентифікацію кристалічних фаз. На рентгенограмі присутні, крім основних піків, невеликі додаткові піки. Появу цих піків можна пояснити паразитичним впливом Cu-K_β опромінення.

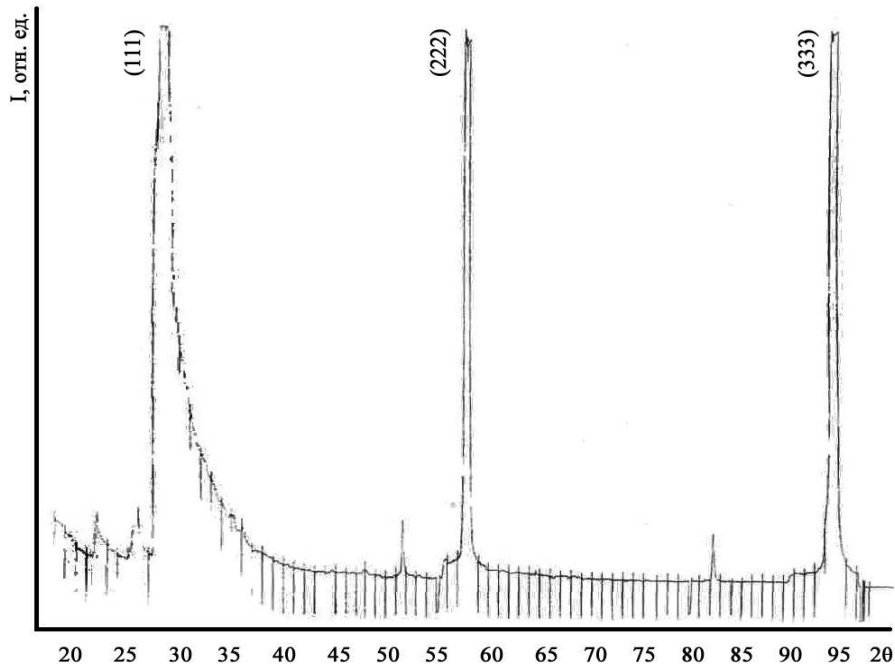


Рис. 3. Рентгенограма поруватої поверхні фосфіду галію.

На отриманих експериментально графіках ми також бачимо, що присутні тільки полоси, які відповідають матеріалу GaP. Якщо на поверхні, або в об'ємі кристалу були присутні інші елементи, або матеріал був би полікристалічним, то на рентгенограмі були б присутні й полоси, які не відповідають фосфіду галію. Це свідчить про те, що як об'ємний зразок, так і пористий шар мають монокристалічну структуру, не мають оксидів та інших елементів. Або їх відсоткова доля на стільки мала, що ними можна знехтувати.

У подальшому планується провести дослідження поруватого шару за методом ковзаючого опромінення. Це дозволить проаналізувати поруватий шар, виключаючи вплив об'ємного зразка на результати експерименту, та більш детально провести дослідження поруватого шару.

ВИСНОВКИ

У даній роботі нами був отриманий пористий шар на поверхні монокристалічного фосфіду галію n-типу. Зразки монокристалічного GaP піддавалися електрохімічному травленню в розчині $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ в процентному співвідношенні 1:1.

За допомогою дослідження пористого шару на растровому електронному мікроскопі ми визначили морфологію поруватого шару, діаметр пор, щільність поруватого шару та товщину поруватого шару. Методом EDAX було визначено хімічний склад поверхні поруватого шару.

Проаналізувавши рентгенограму було зроблено висновок, що як об'ємний зразок, так і пористий шар мають монокристалічну структуру, не мають оксидів та інших елементів. Або їх відсоткова доля на стільки мала, що ними можна знехтувати.

Планується подальше дослідження зразків, для більш детальнішого дослідження структурних змінень.

Список літератури

1. Characterization of porous GaP by photoacoustic spectroscopy: The relation between band-gap widening and visible photoluminescence / Kuriyama K., Ushiyama K., Ohbora K., Miyamoto Y., Kaked S. // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58. – P. 1103-1105.
2. Интенсивная фотолюминесценция в пористом фосфиде галлия / Белогорохов А.И., Караванский В.А., Образцов А.Н., Тимошенко В.Ю. // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – Т. 60. – Вып. 4. – С. 262-266.
3. Campbell I.H. The effects of microcrystal size and shape on the one phonon Raman spectra of crystalline semiconductors / Campbell I.H., Fauchet P.M. // Solid State Commun. – 1986. – V. 58. – P. 739.
4. Cullis G. The structural and luminescence properties of porous silicon / Cullis G., Canham L.T., Calcott P. D. J. // J. Appl. Phys. – 1997. – V. 82. – P. 909.
5. Kashkarov P.K. Photonic bandgap materials and birefringent layers based on anisotropically nanostructured silicon / Kashkarov P.K., Goovan L.A., Fedotov A.B. // J. Op. Soc. Am. B. – 2002. – V. 19. – P. 2273.
6. Процеси випромінювальної рекомбінації в поруватих структурах n-GaP, отриманих методом електролітичного травлення в кислотних розчинах на основі HF та H₂SO₄ / Сукач Г.О., Кідалов В.В., Богословська А.Б., Яценко Ю.І. // Фізика і хімія твердого тіла. – 2009. – Т. 10. – № 2. – С. 476-481.
7. Фотолюминесценція наночастиць CdSe в пористому GaP / Бачериков Ю.Ю., Охименко О.Б., Оптасюк С.В., Яценко Ю.І., Кідалов В.В., Коломинская Е.В., Ваксман Ю.Ф. // Фізика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43. – № 11. – С. 1473-1476.
8. Исследования структуры пористого фосфида галлия / Заварицкая Т.Н., Караванский В.А., Квит А.В., Мельник Н.Н. // ФТП. – 1998. – Т. 32. – вып. 7. – С. 235-240.

Яценко Ю.І. Получение и исследование пористого слоя GaP / Яценко Ю.І., Кідалов В.В., Сукач Г.О. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия: Физико-математические науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 187-192.

В работе рассмотрен метод получения пористого слоя на монокристаллической поверхности фосфида галлия с помощью метода электрохимического травления в растворе HF: C₂H₅OH. Исследованы морфология и химический состав полученной поверхности. В результате эксперимента было установлено, что образовалась макропористая поверхность, ее химический состав показал, что пористый слой достаточно устойчив к окислению.

Ключевые слова: фосфид галлия, электрохимическое травление, метод EDAX, пористый слой.

Yatsenko Y.I. Preparation and investigation of the porous layer GAP / Yatsenko Y.I., Kidalov V.V., Sukach G.O. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 187-192.

The paper presents a method of obtaining a porous layer on a monocrystalline surface of gallium phosphide by the method of electrochemical etching in a solution of HF: C₂H₅OH. The morphology and chemical composition of the surface. The experiment was established that was formed macroporous surface, its chemical composition showed that the porous layer is sufficiently stable to oxidation.

Keywords: gallium phosphide, electrochemical etching, the method of EDAX, porous layer.

Поступила в редакцию 11.11.2010 г.

УДК 530 (075.8)

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ И РЕГИСТРАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В ФИЗИЧЕСКОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Бержанский В.Н., Власова Т.А., Лагунов И.М.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: berj@pop.cris.net, vlasova.ta@gmail.com, lagunov.igor@gmail.com*

В статье рассмотрена автоматизированная система управления и регистрации экспериментальных данных широкого назначения. Система разработана на базе многофункционального AVR-микроконтроллера, современных прецизионных аналогоцифровых и цифроаналоговых преобразователей различной разрядности и изготовлена в лаборатории функциональных материалов и волоконной оптики ТНУ.

Ключевые слова: физический эксперимент, автоматизированная система измерений, микроконтроллер, магнитные материалы, физический практикум.

ВВЕДЕНИЕ

Современный физический эксперимент, как правило, базируется на применении персонального компьютера, связанного со стандартными и уникальными приборами экспериментальной установки, а также с ее отдельными механическими, оптическими, силовой и другими частями. Однако, постоянное развитие компьютерной техники и усложнение физического эксперимента требуют проведения регулярной модернизации автоматизированных систем с учетом современной схемотехники и изменения самой концепции взаимодействия всех частей физической экспериментальной установки с компьютером.

История автоматизации экспериментальных физических установок прошла несколько этапов:

- подключение приборов напрямую к компьютеру через стандартный параллельный интерфейс обмена информацией [1-3];
- подключение приборов экспериментальной установки к компьютеру через внутреннюю специализированную плату расширения с шиной ISA, PCI и т.д. [4, 5];
- подключение частей экспериментальной установки через встраиваемый модуль форм-фактора 3.5 и 5 дюймов, устанавливаемый с лицевой панели компьютера [6];
- взаимодействие всех частей экспериментальной установки (в том числе и приборов) с компьютером через внешний отдельный микропроцессорный блок по последовательному интерфейсу обмена.

Каждый из вышеизложенных вариантов автоматизации физического эксперимента имеет свои положительные и отрицательные стороны, однако в настоящее время последний вариант автоматизации более предпочтителен, так как отличается следующими положительными сторонами:

- независимостью от наличия необходимых для эксперимента внутренних шин компьютера и их незанятостью другими слотами;
- независимостью от форм-фактора корпуса компьютера и его типа;
- возможностью и простотой постоянной модернизации микропроцессорного блока, учитывая новые требования эксперимента, путем добавления в него небольших плат расширения, обменивающихся информацией с центральным модулем блока по 2-х проводной шине;
- наличием собственного источника питания с повышенными требованиями к стабилизации аналоговых частей автоматизированной системы;
- возможностью проведения автономных (демонстрационных, удаленных, учебных и т.д.) экспериментов без применения внешнего компьютера по алгоритмам работы, записанным во flash-память управляющего микропроцессорного блока с отображением текущих системных сообщений и данных эксперимента на встроенном LCD-дисплее.

В настоящей статье рассмотрена автоматизированная система последнего поколения, оптимизированная для проведения экспериментов по изучению физических свойств магнитных материалов, согласно [7, 8]. Состав и функциональность модулей микропроцессорного блока автоматизированной системы определялся в соответствии с требованиями к работе подобных установок.

Данная система разработана и изготовлена в лаборатории функциональных материалов и волоконной оптики Таврического национального университета имени В.И. Вернадского в рамках научно-исследовательской работы № госрегистрации 0106U001749. Дополнительно, система ориентирована для проведения учебных занятий на кафедре экспериментальной физики ТНУ по дисциплинам «Физика магнитных явлений», «Сенсорика», «Автоматизация научных исследований».

1. АППАРАТНАЯ ЧАСТЬ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ

Развитие микроэлектроники за последние годы в области встраиваемых микроконтроллеров (embedded microcontroller) [9, 10] и прецизионных аналогоцифровых (АЦП) и цифроаналоговых (ЦАП) преобразователей, позволило реализовать поставленные перед автоматизированной системой требования согласно варианту автоматизации с внешним (относительно компьютера) управляющим микропроцессорным блоком (рис. 1).

В целом автоматизированная система состоит из: набора аналоговых и цифровых сенсоров; стандартных приборов; микропроцессорного блока управления экспериментом и снятия экспериментальных данных; персонального компьютера.

Встраиваемый многофункциональный микроконтроллер на базе ядра AVR [11] определяет работу микропроцессорного блока, в состав которого также входят аналоговые и цифровые интегральные микросхемы, обеспечивающие снятие информации с сенсоров, ее оцифровку, запись во внутреннее энергонезависимое ОЗУ микропроцессорного блока (для защиты от сбоя компьютера при длительном эксперименте) с одновременной или последующей ее передачей через стандартный интерфейс обмена в персональный компьютер.

Конструктивно микропроцессорный блок выполнен в отдельном корпусе с внешними разъемами. На лицевой панели блока расположены кнопки дополнительного управления и алфавитно-цифровой жидкокристаллический LCD дисплей с внутренней подсветкой для отображения системных сообщений и текущих данных эксперимента. На обратной стороне блока расположены кнопка «Сброс» и разъемы для: ввода аналоговой информации (с сенсоров) и цифровой информации (с приборов, сенсоров конечного положения); вывода аналоговой информации управления внешними силовыми приборами (блоки питания типа СИП-35, СНП-40); вывода оцифрованной информации данных по интерфейсу обмена. Кнопка «Сброс» используется для перезапуска микропроцессорного блока в случае необходимости (зависания системы). Защита от зависания блока дублируется также системой Watch Dog применяемого микроконтроллера и соответствующей программной частью алгоритма.

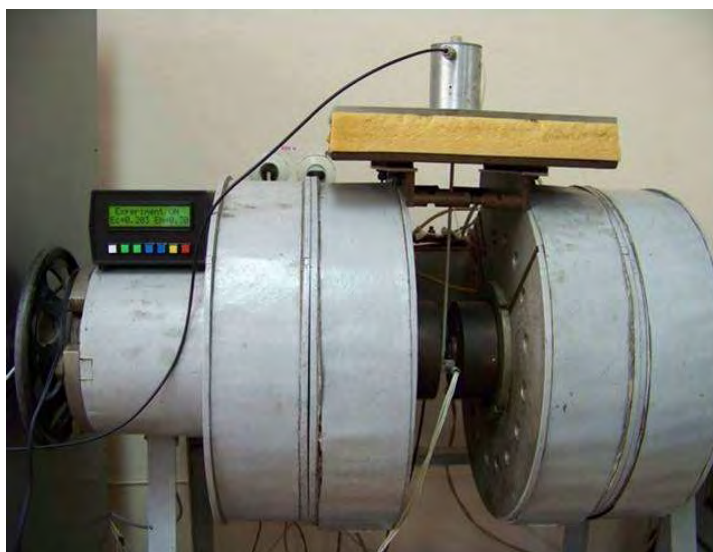


Рис. 1. Микропроцессорный блок в составе автоматизированной установки вибромагнитометра.

Схемотехника микропроцессорного блока базируется на микроконтроллере фирмы Atmel (ATmega8535) [12]. Функциональная схема блока приведена на рис. 2. Аналоговая информация с сенсоров поступает в модуль аналогового сигнала на буферные каскады предварительного усиления и затем на масштабирующие усилители. Сигнал, отмасштабированный с помощью операционных усилителей (типа INA122) к диапазону конкретного аналого-цифрового преобразователя, поступает на АЦП (типа 24-разрядных ADS1210, ADS1211 и 12-ти разрядных AD7896, ADS7816) и далее по внутреннему последовательному интерфейсу на микроконтроллер. Аналоговые сигналы, для которых требуется меньшая разрядность (8-10 разрядов, например, ручек управления отдельных частей экспериментальной установки и т.д.) после масштабирования поступают напрямую

на встроенные АЦП самого микроконтроллера. Аналоговый вывод информации (для управления внешними силовыми устройствами) реализован на двух последовательных 16-ти разрядных ЦАП AD5542 и внутреннем 16-ти разрядным широтно-импульсном модуляторе ШИМ (с накоплением заряда на RC-цепочке с последующим буферированием).

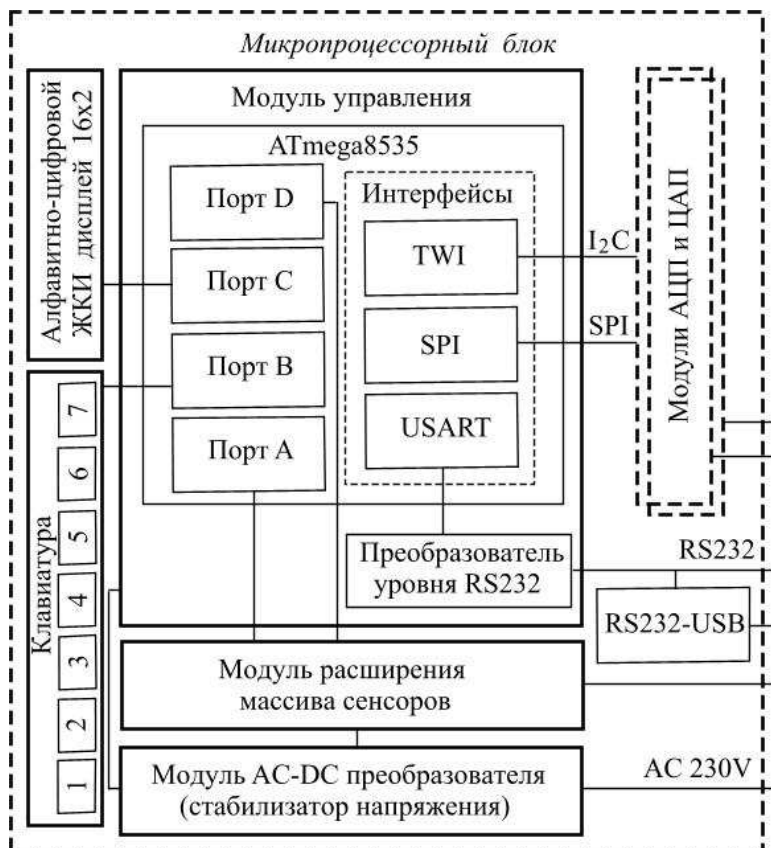


Рис. 2. Функциональная схема микропроцессорного блока.

Кнопка «Сброс» используется для перезапуска микропроцессорного измерительного блока в случае необходимости (зависания системы). Защита от зависания микропроцессорного блока дублируется также системой Watch Dog применяемого микроконтроллера и соответствующей программной частью алгоритма.

С целью минимальной модернизации микропроцессорного блока при возможном последующем расширении технического задания, блок выполнен по модульной схеме рис. 2. Для этого предусмотрено включение в блок различных модулей расширения, обменивающегося информацией с микроконтроллером по параллельным портам Порт A-D (или их отдельных групп бит), а также

внутреннему интерфейсу TWI (Two-Wire serial Interface) и SPI (Serial Peripheral Interface) микроконтроллера.

Для реализации интерфейса TWI достаточно два информационных провода. Более того, модули расширения могут быть подключены параллельно к данным двум проводам. Однако, интерфейс TWI менее скоростной, по сравнению с SPI. Таким образом, подключение модулей (или сенсоров напрямую) к микроконтроллеру по интерфейсу TWI можно рекомендовать только в таких случаях, когда желательно минимальное число соединительных проводов, но допустима небольшая частота выборки данных.

Для работы по интерфейсу SPI необходимы три информационных провода к каждому модулю (параллельно) и один провод выборки конкретного модуля. Интерфейс SPI более скоростной по сравнению с TWI и допускает производить выборку данных от модулей в несколько раз быстрее. Поэтому, подключение модулей к микроконтроллеру по интерфейсу SPI можно рекомендовать в тех случаях, когда для обработки данных необходима максимальная скорость их выборки, но допустимо увеличение числа соединительных проводов.

Микроконтроллер блока обменивается информацией с жидкокристаллическим дисплеем по 4-х битовому параллельно-последовательному внутреннему интерфейсу [13] с дополнительными стробирующими сигналами (выбор команды, запись/чтение, строб данных).

Учитывая, что уровни напряжения функционального блока USART (Universal Synchronous and Asynchronous Serial Receive and Transmitter) микроконтроллера не соответствуют требованиям уровней напряжений последовательного интерфейса RS232, в микропроцессорный блок была введена интегральная схема MAX232 (4-х канальный преобразователь уровня напряжения). Данная микросхема преобразует уровни логического 0 и 1 микроконтроллера (0.4 ; 5 В) в уровни 0 и 1 интерфейса RS232 (-9 В ; +9 В). Интерфейс USB реализован через стандартный конвертор RS232-USB, встроенный в блок.

Для возможности изменения различных режимов работы блока на его лицевую панель выведена клавиатура из 7-ми кнопок. Данная клавиатура подключена к параллельному порту микроконтроллера. Назначение кнопок (см. рис. 2) следующее (на рис. 1 последовательно слева направо):

- кнопка «режим» (1) - главное меню выбора режима изменения параметров эксперимента (часто используемые методики проведения эксперимента; время сканирования данных; установка максимального магнитного поля для проведения эксперимента и т.д.);
- две кнопки «движение вниз», «движение вверх» (2, 3) - подменю первого уровня, используемое для конкретизации выбора режима работы измерительного блока, работающее при движении по циклу выбора (например, снятие кривой намагничивания, петли гистерезиса, многократного прохода по петле и т.д.);
- две кнопки (4, 5) изменения численного значения (также по циклу вверх-вниз) отображаемого в первой строке LCD дисплея параметра эксперимента (например, численного значения времени сканирования данных, развертки

магнитного поля, численного значения максимального магнитного поля при проведении конкретного эксперимента);

- кнопка «переполюсовка» (6) - переполюсовка электромагнита (кнопка блокируется при проведении эксперимента);
- кнопка «запуск» (7) - начало работы блока по выбранным параметрам (аналог кнопки Enter), нажимается, когда выбор режима работы и численных значений различных определяющих величин осуществлен.

Все части микропроцессорного блока работают согласно алгоритму, находящегося в постоянном запоминающем устройстве ПЗУ микроконтроллера (flash-memory). В блоке предприняты меры для дополнительной стабилизации напряжения питания, что связано с необходимостью увеличения коэффициента стабилизации аналоговой части блока. Для этой цели в схемотехнику блока введены интегральные микросхемы – линейные стабилизаторы напряжения фирмы Motorola.

Технические характеристики микропроцессорного блока

число аналоговых каналов ввода данных.....	8
число аналоговых каналов вывода.....	3
память программ, кБ	8
скорости обмена по интерфейсу RS232 до, б/с	57600
тип интерфейса обмена	RS232, USB2.0
скорость обмена по интерфейсу RS232, б/с	9600
напряжение питания, В	220
частота напряжения питания, Гц.....	50
потребляемая мощность (без компьютера), Вт.....	10
время непрерывной работы	не ограничено
время безотказной работы, ч (не менее)	4000
масса (без соединительных шнуров), кг	1
линейные размеры корпуса, см	20x10x5

Предусмотрена возможность (установлены разъемы) увеличения числа сенсоров с аналоговым и цифровым выходом при минимальной модернизации микропроцессорного блока.

Персональный компьютер выполняет функции промежуточной табличной и графической визуализации получаемой информации с сенсоров в режиме реального времени, внешнего управления микропроцессорным блоком, записи экспериментальных данных на носители информации различного типа.

2. ПРОГРАММНАЯ ЧАСТЬ

Работа автоматизированной системы осуществляется при взаимодействии всех ее составных частей, программное обеспечение которых выполнено на языках различного уровня: программа микропроцессорного блока написана на языке ассемблер соответствующего микроконтроллера, программа персонального компьютера на объектно-ориентированном языке C++Builder; программа обработки экспериментальных данных на языках Maple и MathCAD.

Программа микропроцессорного блока, выполняет следующие функции:

- получение данных от аналоговых сенсоров (датчик Холла, измерительные катушки, термопары и т.д.);
- мультиплексирование аналоговых каналов при съеме данных;
- различные вспомогательные действия по инициализации внутренних функциональных узлов микроконтроллера;
- запуск АЦП и ЦАП;
- формирование информационного блока со всех сенсоров за одну временную выборку и в течении эксперимента;
- передачу информационного пакета (данных и системных сообщений) в персональный компьютер по последовательному интерфейсу.

Алгоритм программы персонального компьютера ориентирован на:

- создание файла (или набора файлов при длительном эксперименте) на жестком диске для записи экспериментальных данных (имя файла формируется согласно календарю и таймеру внутренних часов компьютера);
- получение информационного пакета от микропроцессорного блока (и его отображения в шестнадцатичном виде в режиме терминала для отладки и тестирования системы);
- отображение получаемых экспериментальных данных на дисплее компьютера;
- градуировки сенсоров (выставление коэффициентов аппроксимационных полиномов).

В данной программе не предусмотрена математическая обработка экспериментальных данных, так как подобная работа выполняется программой математического пакета удобного для конкретного экспериментатора.

3. АПРОБАЦИЯ И ТЕСТИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ

Апробация и тестирование автоматизированной системы управления проводилась при модернизации вибромагнитометра, принцип работы которого основан на измерении ЭДС, наводимой в измерительных катушках переменным магнитным полем вибрирующего образца. Исследуемый образец помещается между измерительными катушками, расположенными на полюсах электромагнита, и приводится в движение вибрационной системой. Сигнал, индуцированный в приемных катушках, пропорционален магнитному моменту образца. Управление магнитным полем осуществляется микропроцессорным блоком (после ЦАП, через аналоговые опторазвязки ЗОД129Б) с помощью двух источников питания СНП-40, которые позволяют получить между полюсами электромагнита поле до 10 кЭ. Для измерения магнитного поля используется датчик Холла. Таким образом, основными сенсорами являются измерительные катушки вибромагнитометра и датчик Холла, при необходимости проведения температурных измерений применяется термопара. Система позволяет осуществлять развертку магнитного поля с заданной скоростью (0.1...30 с между временными выборками, всего 4096 шагов квантования по времени), осуществлять реверс направления магнитного поля при снятии петли гистерезиса, аварийно уменьшать поле электромагнита до нуля с шагом 0.5 с.

Для проведения тестовых экспериментов был выбран образец никелевого феррита. В ходе измерений в автоматическом режиме была получена зависимость намагниченности образца от внешнего поля (рис. 3).

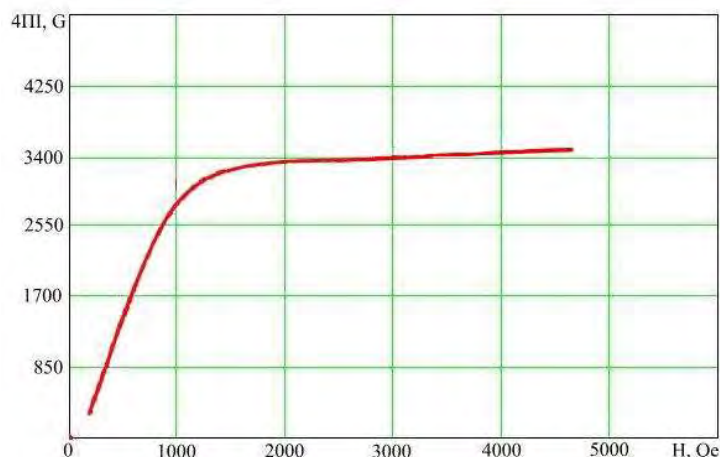


Рис. 3. Зависимость намагниченности никелевого феррита от постоянного магнитного поля, измеренная в автоматическом режиме.

Анализ полученных экспериментальных данных подтверждает работоспособность автоматизированной системы в составе физической экспериментальной установки, тем самым определяя возможность ее дальнейшей эксплуатации.

Далее планируется использование подобной автоматизированной системы управления и регистрации данных для модернизации экспериментальной установки по исследованию гальванотерромагнитных свойств магнитных материалов [14], спектрометра ферромагнитного резонанса и других экспериментальных установок отдела функциональных материалов и волоконной оптики и кафедры экспериментальной физики.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана и изготовлена автоматизированная система управления и регистрации данных физического эксперимента. Функциональность и работоспособность системы продемонстрирована в составе экспериментальной установки по измерению одного из основных параметров магнитных материалов – намагниченности.

Данная автоматизированная система может быть использована для научных и учебных целей в высших учебных заведениях, лабораториях и конструкторских бюро.

Список литературы

1. Сопряжение датчиков и устройств ввода данных с компьютерами IBM PC: Пер. с англ. / под ред. Томпкинса У., Уэбстера Дж. – М.: Мир, 1992. – 592 с.
2. Бержанский В.Н. 2-D и 3-D гальваноманитные сенсоры в компьютерных системах / Бержанский В.Н., Лагунов И.М., Веренкиотова Ю.И. // Ученые записки Симферопольского государственного университета. – 1998. – №5 (44). – С.128-132.

3. Пономаренко В.И. Обработка зависимостей «частота-сигнал» при измерении коэффициента отражения в волноводе / Пономаренко В.И., Попов В.В., Руденко В.В. // Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского, серия «Физика». – 2003. – Т. 15-16 (54-55), №1. – С.94-102.
4. Евдокимов С.В. Установка для исследования фототоков короткого замыкания в сегнетоэлектриках / Евдокимов С.В., Яценко А.В. // Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского, серия «Физика». – 2003. – Т. 15-16 (54-55), №1. – С. 44-49.
5. Автоматизированный импульсный ультразвуковой спектрометр с индукционным возбуждением для исследования магнитных материалов / Бержанский В.Н., Полулях С.Н., Преображенский В.Л., Руденко В.В. // Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского, серия «Физика». – 2005. – Т. 17-18 (56-57), №1. – С.115-120.
6. Сапига А.А. Многофункциональный комплект виртуальных приборов в лабораторном практикуме по общей физике / Сапига А.А., Сапига А.В. // Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского, серия «Физика». – 2008. – Т. 21 (60), №1. – С. 110 – 116.
7. Преображенский А.А. Магнитные материалы и элементы / Преображенский А.А., Бишард Е.Г. – М.: Высш. шк., 1986. – 352 с.
8. Кучис Е.В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования / Кучис Е.В. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.
9. Мікропроцесорна техніка: Підручник / Ю.І. Якіменко, Т.О. Терещенко, Е.І. Сокол и др. – К.:ІВЦ «Видавництво «Політехніка», 2004. – 440 с.
10. Бабич М.П. Комп'ютерна схемотехніка. Методи побудови та проектування: Навчальний посібник / Бабич М.П., Жуков І.А. – К.: МК-Пресс, 2004. – 576 с.
11. Трамперт В. AVR-RISC микроконтроллеры / Трамперт В. ; Пер. с нем. – К.: «МК-Пресс», 2006. – 464 с.
12. Трамперт В. Измерение, управление и регулирование с помощью AVR-микроконтроллеров / Трамперт В. ; Пер. с нем. – К.: «МК-Пресс», 2006. – 208 с.
13. Самарин А.В. Жидкокристаллические дисплеи. Схемотехника, конструкция и применение / Самарин А.В. – М.: СОЛОН-Р, 2002. – 304 с.
14. Magnetoresistive properties of manganese ferrites / Berzhansky V.N., Yevstaf'ev I.I., Lagunov I.M., Terlenko Yu.A. //International conference «Functional Materials», Partenit. – 2001. – P.54.

Бержанський В.Н. Автоматизована система управління і реєстрації експериментальних даних у фізичному експерименті /Бержанський В.Н., Власова Т.А., Лагунов І.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 193-201.

У статті розглянута автоматизована система управління і реєстрації експериментальних даних широкого призначення. Система розроблена на базі багатофункціонального AVR-мікроконтролера, сучасних прецизійних аналогоцифрових і цифроаналогових перетворювачів різної розрядності і виготовлена в лабораторії функціональних матеріалів і волоконної оптики ТНУ.

Ключові слова: фізичний експеримент, автоматизована система вимірів, мікроконтроллер, магнітні матеріали, фізичний практикум.

Berzhansky V.N. The automated system of control and experimental data registration in physical experiment / Berzhansky V.N., Vlasova T.A., Lagunov I.M. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 193-201. The multipurpose automated control system and registration of experimental data has been considered in the article. The system has been developed on the basis of the multifunctional AVR-microcontroller, modern precision analog-digital and digit-analog converters of different bit and has been made in laboratory of functional materials and fiber optics of Taurida V. Vernadsky National University.

Keywords: physical experiment, automated system of measurings, microcontroller, magnetic materials, physical practical work.

Поступила в редакцію 23.11.2010 г

УДК 524.387

**ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ЭМУЛЯЦИИ СПЕКТРОВ
УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО КОСМИЧЕСКОГО ЭШЕЛЛЕ СПЕКТРОГРАФА
«TUES»**

Ляшко Д.А., Алентьев Д.В.

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: dlyashko@gmail.com, sl4m@ukr.net*

Описан алгоритм моделирования трансформации света от искусственного объекта, представленного рассчитанным теоретическим спектром через оптический тракт эшелле спектрографа и регистрацию его на фотоприемнике. Полученное изображение представлено в виде стандартного FITS файла, которое может быть использовано для выбора экспозиции и параметров наблюдений реального прибора, при заданном значении отношения сигнал/шум.

Ключевые слова: Эшелле спектр, экстракция, эмуляция.

ВВЕДЕНИЕ

Стремление вынести наблюдательные инструменты за пределы атмосферы связано с тем, что её прозрачность ограничена лишь двумя сравнительно узкими спектральными областями: видимым светом (длина волны 3000-7500Å) и радиодиапазоном (от 1,25 см до 30 м). Приходящие от астрономических объектов излучение в других длинах волн в той или иной степени поглощаются в основном водяным паром, углекислым газом, озоном. Поглощение быстро убывает с высотой над поверхностью Земли. Значительные помехи в наземных наблюдениях обусловлены также запылённостью атмосферы, облаками и преломлением света на термических неоднородностях атмосферы, вызывающих мерцание. Внеатмосферные исследования дополняют результаты наземных астрономических наблюдений и позволяют получить новые астрофизические результаты.

При подготовке миссий космических телескопов необходимо заранее предусмотреть все особенности, возникнуть в процессе полета и заранее спланировать программу наблюдений. Процесс подготовки осложняется еще и тем, что разработкой и изготовлением аппаратуры занимаются другие фирмы и получить реальные характеристики приборов возможно только после проведения его наземных испытаний.

В настоящее время основными спектральными приборами, устанавливаемыми на современных космических телескопах, являются эшелльные спектрографы (спектрографы со скрещенной дисперсией). Основными преимуществами таких приборов являются большая разрешающая способность, регистрация большого спектрального диапазона, возможность применения в качестве регистрирующих элементов приборов с зарядовой связью (CCD матриц). На небольшой площади

такие приборы позволяют поместить спектр объекта в виде разнесенных в пространстве старших порядков дифракционной решетки.

Разработанный программный комплекс позволяет моделировать процесс регистрации эшелле спектра в спектрографе и по наблюдаемым характеристикам объекта оценить время экспозиции при заданном отношении сигнал/шум. Для моделирования и проверки результатов был выбран эшелле спектрограф TUES, который был установлен на космическом аппарате ORFEUS II, совершивший полет в ноябре-декабре 1996 года. Данный прибор был выбран потому, что его конструкция была положена в основу разрабатываемому спектрографу для международного проекта "Спектр-УФ", запуск которого планируется в 2014 года. Структура программного комплекса разработана таким образом, что позволяет задавать основные параметры любого спектрографа и получать на выходе изображение эшелле спектра. Т.е. отработав методику моделирования на хорошо известном приборе можно применить данный инструмент для спектрографа, разрабатываемого в рамках проекта "Спектр-УФ".

1. ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ СПЕКТРОГРАФА

Для построения эшелле спектра искусственного объекта используется следующая информация:

1. Так как любой эшелле спектрограф является составной частью всего космического телескопа, то необходимо учитывать такие оптические характеристики, как диаметр главного зеркала, количество отражающих поверхностей на пути от зеркала до фотоприемника, спектральную эффективность всей оптической системы в целом. Основные характеристики телескопа ORFEUS II и спектрографа TUES приведены в работе [1]. Приведенная в работе спектральная эффективность представлена на рис. 1.

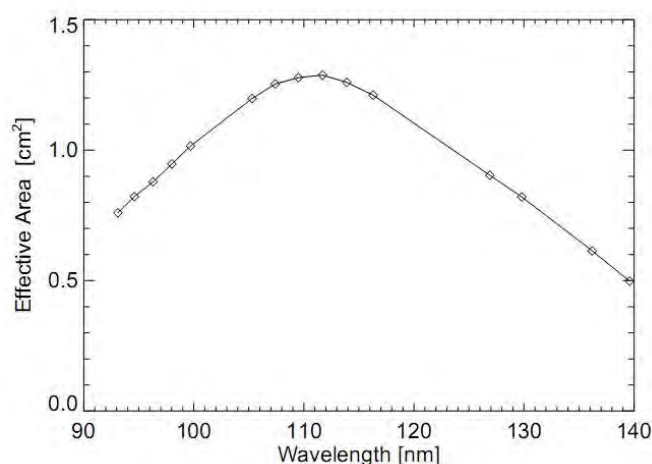


Рис. 1. Спектральная эффективность спектрографа TUES измеренная по спектру белого карлика G191B2B.

Данная спектральная зависимость была аппроксимирована полиномом 5 степени и включена в базу данных спектрографа.

2. Второй важной характеристикой спектрографа является рабочий диапазон длин волн. Данный спектрограф работает в дальней ультрафиолетовой части спектра. Спектр, получаемый на приборе, занимает 21 спектральный порядок в диапазоне длин волн от 900 до 1400 ангстрем.

3. Спектральное разрешение прибора и размерность матрицы фотоприемника.

4. Следующей характеристикой, которая позволит создать искусственный спектр является положение порядков. В реальном спектрографе положения порядков на матрице фиксированы, но в зависимости от температуры и положения прибора относительно Земли их координаты незначительно меняются. Для задания положений порядков была использована пиксельная координатная сетка. В рамках выбранной системы координат, по изображению полученных на данном спектрографе изображений были определены и аппроксимированы полиномом 3 степени положения порядков и коэффициенты аппроксимации занесены в базу данных по спектрографу.

5. Дифракционная решетка и кроссдисперсионная призма искривляют спектр и делают дисперсионную кривую прибора нелинейной. Для корректного учета этой нелинейности в базу данных занесены коэффициенты аппроксимации дисперсионной кривой для каждого порядка эшелле спектра.

6. Дифракционная решетка внесет искажение в относительное распределение интенсивности в исследуемом спектре. Данная зависимость коэффициента отражения дифракционной решетки может быть представлена в виде:

$$\rho(\lambda) = \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2$$

Для учета данных искажений эта теоретическая функция u может быть представлена в виде:

$$u = \pi m \alpha \left(1 - \frac{\lambda(m)}{\lambda} \right)$$

где, m – номер спектрального порядка α – параметр, влияющий на полуширину функции, $\lambda(m)$ – длина волны на которую приходится максимум излучения порядка с номером m , λ – длина волны. На рис.2. показана функция блеска для 7 порядка спектрографа TUES

Коэффициенты аппроксимации функции блеска для каждого порядка, являются параметрами базы данных спектрографа.

7. Для расчета освещенности пикселей на светоприемнике в базу данных спектрографа были добавлены физические размеры и площадь каждого элемента матрицы.

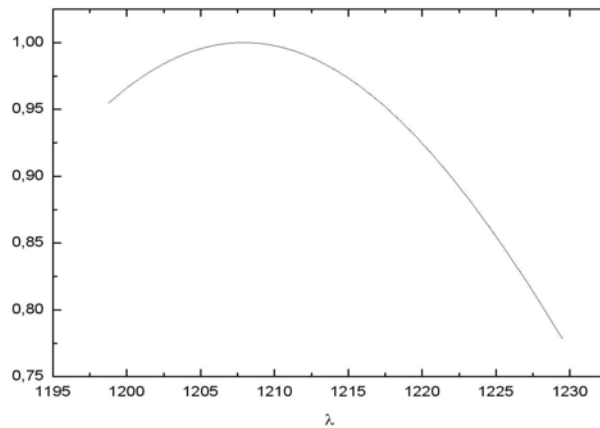


Рис. 2. Функция блеска для 7 порядка спектрографа TUES.

2. ПАРАМЕТРЫ НАБЛЮДАЕМОГО СПЕКТРА

Выходящий поток излучения на поверхности звезды, вычисляемый программой расчета синтетических спектров [2] есть поток в смысле Эддингтона (момент потока):

$$H_{\nu}(\text{erg} / \text{sec} / \text{cm}^2 / \text{Hz}) = \frac{4\pi c}{\lambda^2} F_{\lambda},$$

где, F_{λ} – поток, выходящий из атмосферы звезды.

Поток на орбите Земли определяется как:

$$f_{\lambda} = \left(\frac{R_{*}}{d} \right)^2 F_{\lambda},$$

где, R_{*} - радиус звезды, d – расстояние до объекта наблюдения.

Или, используя угловой диаметр a :

$$f_{\lambda} = \frac{1}{4} a^2 F_{\lambda},$$

Обычно угловой диаметр выражается в угловых милиарксекундах.

$$I'' = 2*206264806 \text{ mas}$$

Для того, чтобы “переместить” полученный спектр на орбиту Земли, нам нужно знать угловой диаметр звезды. Для этого свернем полученное распределение энергии в спектре с кривой реакции фильтра V фотометрической системы Джонсона, переведем его в звездные величины, используя нуль-пункт из работы [3]. Задавая наблюдаемое значение цвета в фильтре V , которое является наблюдаемой звездной величиной, мы получаем видимый угловой диаметр, который является коэффициентом перехода к потокам на орбите Земли.

Для того, чтобы рассчитать цвет V на поверхности звезды, приходится рассчитывать синтетический спектр в интервале до 7500Å и проводить свертку с кривой реакции фильтра. Проведение свертки в программе вызвано тем, что в качестве темплейтов могут быть использованы наблюдаемые распределения энергии объектов таких как квазары, галактики, активные ядра галактик и т.д. По этой же причине в программу включена свертка с аппаратной функцией спектрографа.[4].

Согласно теории работы эшелле спектрографа [5], распределение интенсивности в фокальной плоскости прибора описывается следующим выражением:

$$f(\lambda) = f_0(\lambda) \cdot r(\lambda),$$

здесь $f(\lambda)$ -интенсивность излучения в фокальной плоскости спектрографа, $f_0(\lambda)$ -интенсивность излучения на щели спектрографа, $r(\lambda)$ - функция блеска спектрографа.

Следовательно, нашей задачей является изменить амплитуды пикселей с учетом интенсивности синтетического спектра. Для того, чтобы корректно провести трансформацию, необходимо откорректировать падающую интенсивность с физическими размерами пикселей и шагом длин волн. Полученный поток излучения соответствует экспозиции в 1 секунду. Так как разрядная сетка считывателя фотоприемника спектрографа TUES позволяет регистрировать отсчеты до максимального значения 32768, то можно определить максимальное значение экспозиции, которое не приведет к искажению формы сигнала. Кроме максимального значения экспозиции, можно определить время, необходимое для получения заданного значения отношения сигнал/шум. Предположив, что отношение сигнал/шум пропорционально $\sqrt{N}$, где N значение отсчета пикселя, можно рассчитать поток в каждом пикселе, который соответствует заданным параметрам, и время экспозиции для данного объекта. Важную роль при проведении наблюдений играет и максимальная амплитуда шумов, искажающая результирующий спектр. Считая шум регистрации и считывания чисто пуассоновским, можно рассчитав случайную величину нормировать ее на значение $\sqrt{N}$ и исказить результирующий спектр. На рис.3. Показан 10 порядок спектрографа TUES до и после наложения шумов.

Трансформация синтетического спектра поперек оси дисперсии осуществляется в предположении гауссова падающего пучка. Профиль порядка поперек оси дисперсии задается гауссианой, амплитуда которой трансформируется согласно интенсивности падающего излучения в каждой точке спектра. Механизм трансформации подробно описан в работе [6].

Результатом работы программы является двумерное изображение, «считанное» с ПЗС матрицы и записанное в общепринятом в астрофизике FITS формате.[7]

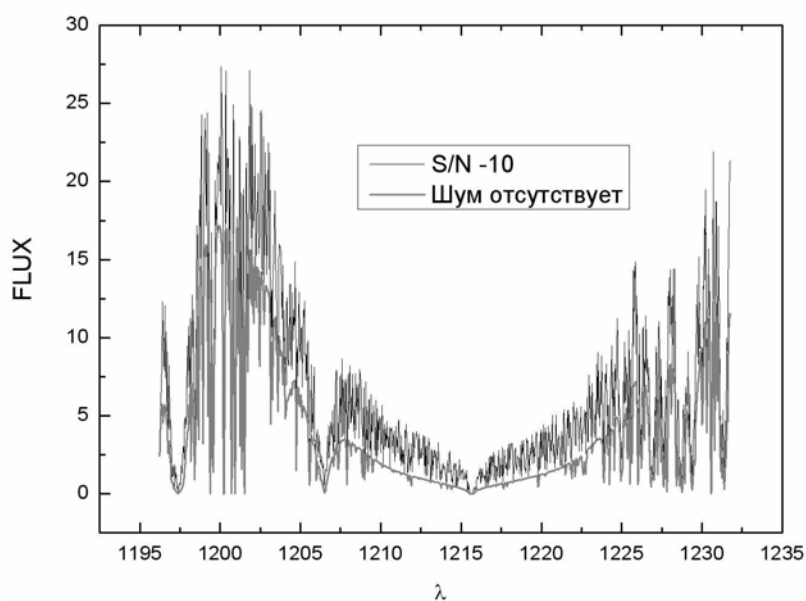


Рис. 3. 7 порядок спектрографа TUES до и после наложения шумов.

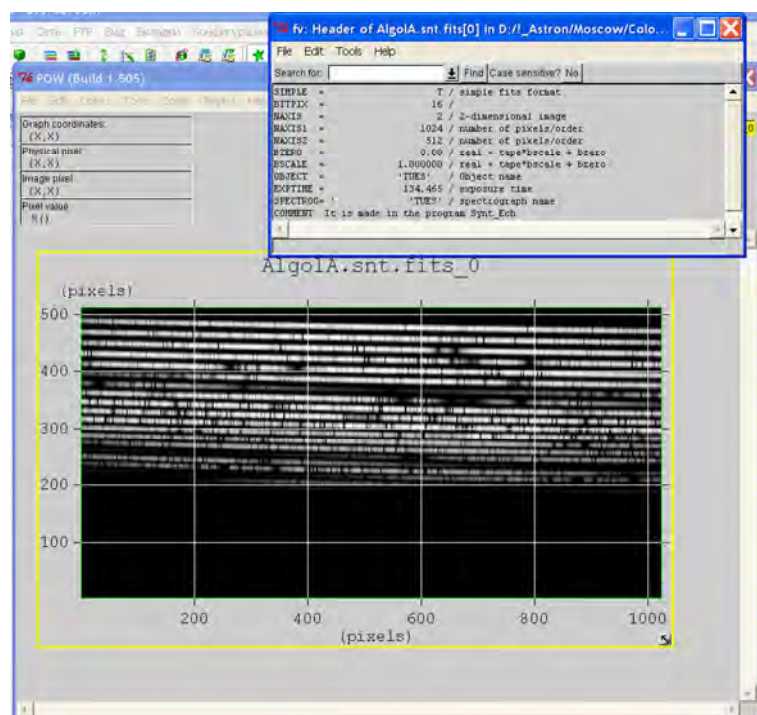


Рис. 4. Просмотр полученного изображения в программе просмотра FITS файлов FV.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный программный комплекс позволяет моделировать процесс получения эшелле спектра искусственного объекта .

Полученная методика позволяет:

- Смоделировать процессы регистрации спектров в спектрографах со скрещенной дисперсией на CCD матрицу.
- Изменять параметры спектрографа для получения нужных параметров наблюдений.
- Оптимизировать проведение наблюдений для получения спектрального материала нужного качества
- Протестировать комплексы программ обработки, исследуя спектр объекта, для которого заранее известен абсолютно правильный результат обработки.
- Оценить реальную разрешающую способность спектрографа.
- Подготовить программу наблюдений, отобрав объекты, которые реально можно наблюдать с нужным отношением сигнал/шум.
- Оптимизировать параметры спектрографа до окончания его разработки.

Список литературы

1. Barnstedt J. The ORFEUSII Echelle spectrometer Instrument description, performance and data reduction / Barnstedt J., Kappelman N., Appenzeller I. // *Astronomy & Astrophysics*. – 1999. – vol.134. – p.561-567.
2. Tsymbal V. in *Processing Stellar Echelle Spectra*, IAU Symp 210 / Tsymbal V., Lyashko D., & Weiss W. W. // editors Piskunov N., Weiss W., Gray F., Astr. Soc. Pacific, 2003.
3. Colina L. Absolute nflux calibrated spectrum of Vega / Colina L., Bohli R., Castelli F. // *Instrument Science Report CAL/SCS-008*, 1996.
4. Tsymbal V.V. in *Model Atmospheres and Spectral Synthesis* / Tsymbal V.V. // ed. Adelman S.J., Kupka F. & Weiss W.W., ASP, 1996.
5. Зайдель А.Н. Техника и практика спектроскопии / Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. – М.: Наука. – 1972. – 375 с.
6. Ляшко Д.А. Методика создания эшелле спектра искусственной звезды / Ляшко Д.А. // *Ученые записки Таврического национального университета имени В.И.Вернадского*. – 2005. – Том 17-18 (54-55). – С. 94-101.
7. Francisco Valdes *The IRAF_NOAO Spectral World Coordinate Systems*

Ляшко Д.А. Програмний комплекс для емуляції спектрів ультрафіолетового космічного ешелле спектрографа «TUES»/ Ляшко Д.А., Алєнтьєв Д.В. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 202-209.

Описаний алгоритм моделювання трансформації світла від штучного об'єкту, представленого розрахованим теоретичним спектром через оптичний тракт ешелле спектрографа і реєстрацію його на фотоприймачі. Отримане зображення представлено у вигляді стандартного файлу FITS, яке може бути використане для вибору експозиції і параметрів спостережень реального приладу, при заданому значенні відношення сигнал/шум.

Ключові слова: Ешелле спектр, екстракція, емуляція.

Lyashko D.A. Programmatic complex for emulation of spectrums of ultraviolet space eshelle spectorgraph «TUES»/ Lyashko D.A., Alentiev D.V. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 202-209.

The algorithm of modeling of transformation of light from the artificial object presented by the calculated theoretical spectrum through an optical path echelle spectrograph and its registration on a photodetector is described. The received image is presented in the form of standard FITS a file which can be used for a choice of an exposition and parameters of supervision of the real device, at a preset value of the relation a signal/noise.

Keywords: Echelle spectrum, extraction, emulation.

Поступила в редакцию 07.11.2010 г.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Алексеев Константин Николаевич	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: c.alexeyev@yandex.ua
Алентьев Дмитрий Викторович	аспирант кафедры радиофизики и электроники Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: sl4m@ukr.net
Баршак Елена Владимировна	студентка 5 курса кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4
Беляева Алла Ивановна	доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и экспериментальной физики Национального технического университета «Харьковский политехнический институт» 61002, Харьков, Украина e-mail: belyaeva@kharkov.com
Бержанский Владимир Наумович	доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: roton@crimea.edu
Боклаг Наталья Александровна	аспирант кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 инженер Национального центра управления и испытаний космических средств 97419, Евпатория-19

Болотин Дмитрий Дмитриевич	аспирант кафедры физики твердого тела Таврического национального университета им. Вернадского; 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: dbolotin@mail.ru
Власова Татьяна Августовна	научный сотрудник НИЧ Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: vlasova.ta@gmail.com
Гайчук Антон Сергеевич	специалист-инженер второй категории Бердянский государственный педагогический университет
Галуза Алексей Анатольевич	доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института электрофизики и радиационных технологий НАН Украины Харьков, 61002, Украина e-mail: Galuza76@mail.ru
Гореликов Геннадий Андреевич	студент 4-го курса кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: gorelikov.gennadii@rambler.ru
Дзедолик Игорь Викторович	доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: dzedolik@crimea.edu
Евстафьев Александр Иванович	аспирант кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского Postgraduate student at Ecole Centrale de Lille, France. e-mail: alexander.yves@gmail.com
Каракчиева Ольга Сергеевна	аспирант кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: olga.karakchieva@mail.ru

Кидалов Валерий Витальевич	доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной физики и математического моделирования Бердянский государственный педагогический университет
Клевещ Филипп Николаевич	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: phil_klevets@mail.ru
Краснюк Игорь Борисович	кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Донецкого физико-технического института им. А.А. Галкина НАН Украины e-mail: krasnjukigr@rambler.ru
Кулиш Владимир Викторович	кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры прикладной физики Физико-Технический института Национального Технического Университета Украины «КПИ» НТУУ «КПИ», проспект Победы 37, Киев, 03056 e-mail: kulish_volv@ukr.net
Лагунов Игорь Михайлович	старший преподаватель кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: lagunov.igor@gmail.com
Леяков Александр Петрович	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: leryakov@tnu.crimea.ua
Лысов Владимир Иванович	доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Киевского национального университета имени Тараса Шевченко

Ляшко Дмитрий Аркадьевич	кандидат физ.-мат. наук; доцент кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. Вернадского; 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: dlyashko@gmail.com
Максимова Елена Михайловна	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела Таврического национального университета им. Вернадского; e-mail: lenamax112@rambler.ru
Мельник Татьяна Николаевна	кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Донецкого физико-технического института им. А.А. Галкина НАН Украины e-mail: melnik@depn.fti.ac.donetsk.ua
Микульская Юлия Павловна	магистр кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского e-mail: ipmikulska@gmail.com
Нарманский Владимир Яковлевич	Лаборатория «Гелиоритм» e-mail: heliomechanics@gmail.com
Перно Филипп	доктор физико-математических наук; профессор Ecole Centrale de Lille, Франция Ecole Centrale de Lille, BP 48, 59651 Villeneuve d'Ascq CEDEX e-mail: philippe.pernod@iemn.univ-lille1.fr
Пономаренко Владимир Иванович	доктор физико-математических наук; профессор кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 тел.: 63-75-95 e-mail: roton@crimea.edu
Попов Вячеслав Валериевич	ассистент кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: slavapop@gmail.com

Преображенский Владимир Леонидович	доктор физико-математических наук; профессор Ecole Centrale de Lille, Франция Ecole Centrale de Lille, BP 48, 59651 Villeneuve d'Ascq CEDEX e-mail: ladimir.preobrajenski@iemn.univ-lille1.fr
Пушкарёв Александр Борисович	кандидат физико-математических наук, с.н.с. НИИ «Крымская астрофизическая обсерватория» 98409 пгт Научный e-mail: pushkarev.alexander@gmail.com
Рощупкин Сергей Николаевич	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: rsn@tnu.crimea.ua
Рябушкин Дмитрий Сергеевич	кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: druabushkin@crimea.edu
Савченко Алла Александровна	аспирант кафедры общей и экспериментальной физики Национального технического университета «Харьковский политехнический институт» Харьков, 61002, Украина
Саенко Галина Владимировна	инженер кафедры общей физики Киевского национального университета имени Тараса Шевченко e-mail: saenko@mail.univ.kiev.ua
Скальская Оксана Леонидовна	студентка 4 курса кафедры экспериментальной физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского
Слатин Кирилл Александрович	ассистент кафедры общей и экспериментальной физики Национального технического университета «Харьковский политехнический институт» Харьков, 61002, Украина

Стругацкий Марк Борисович	доктор физико-математических наук, зав. кафедрой физики твердого тела Таврического национального университета им. Вернадского e-mail: strugatsky@crimea.edu
Сукач Георгий Алексеевич	доктор физико-математических наук; профессор кафедры общей физики Национального университета биоресурсов и природопользования Украины
Сычикова Яна Александровна	ассистент кафедры дидактики естественнонаучных дисциплин и информационных технологий, аспирант кафедры прикладной физики и математического моделирования Бердянский государственный педагогический университет e-mail: yanasuchikova@mail.ru
Томчук Петр Михайлович	доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент НАН Украины, зав. отделом теоретической физики Института Физики НАН Украины Киев, проспект Науки, 46 e-mail: ptomchuk@iop.kiev.ua
Турков Олег Владимирович	ведущий инженер кафедры общей физики Киевского национального университета имени Тараса Шевченко e-mail: turkov@mail.univ.kiev.ua
Усачев Александр Сергеевич	студент 4-го курса кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: as213@mail.ru
Фридман Юрий Анатольевич	доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Таврического национального университета им. В.И. Вернадского 95007, Симферополь, проспект акад. Вернадского, 4 e-mail: frid@tnu.crimea.ua

**Цареградская
Татьяна Леонидовна**

кандидат физико-математических наук, доцент
кафедры общей физики Киевского национального
университета имени Тараса Шевченко
e-mail: tsar_grd@ukr.net, tsar_grd@mail.univ.kiev.ua

**Юрченко
Владимир Михайлович**

доктор физико-математических наук, профессор,
зав. отделом Донецкого физико-технического
института им. А.А. Галкина НАН Украины
e-mail yurch@yurch.fti.ac.donetsk.ua

**Яворский
Максим Александрович**

кандидат физико-математических наук, старший
преподаватель кафедры теоретической физики
Таврического национального университета
им. В.И. Вернадского
95007 Симферополь, пр. Акад. Вернадского 4, ТНУ
e-mail: maxyavorsky@yahoo.com

**Яценко
Юрий Игоревич**

ассистент кафедры физики и методики
преподавания физики, аспирант Бердянского
государственного педагогического университета
e-mail: shadow_jura@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

1. Лемяков А.П. Распределение потенциала скалярного поля для «размазанной» нуль струны постоянного радиуса.....	3
2. Усачев А.С., Лемяков А.П. Квадратичная форма, описывающая гравитационное поле радиально расширяющейся замкнутой нуль струны в плоскости $z = 0$	13
3. Пушкарев А.Б. Исследование парсековой структуры выброса квазара 1642+690.....	17
4. Нарманский В.Я. Корреляционная связь погоды-климата с планетными циклами.....	24
5. Алексеев К.Н., Баршак Е.В., Яворский М.А. Структура мод и эволюция оптических вихрей в оптических волокнах с акустооптическим взаимодействием.....	42
6. Алексеев К.Н., Яворский М.А., Боклаг Н.А. Векторная теория высших мод параллельных волноводов.....	54
7. Дзедолик И.В., Каракчиева О.С., Микульская Ю.П. Управление спектром поляритонов в диэлектрической среде.....	64
8. Кулиш В.В., Томчук П.М. Одноэлектронные оптические свойства эллипсоидальных металлических нанооболочек.....	75
9. Краснюк И.Б., Мельник Т.Н., Юрченко В.М. Идеальная турбулентность в нелинейной "квантовой" физике полимеров.....	94
10. Фридман Ю.А., Гореликов Г.А., Клевец Ф.Н. Влияние большой двухосной анизотропии на фазовые состояния магнитоупорядоченного кристалла с $S=1$	108
11. Рошупкин С.Н. Восстановление корреляционной функции по ее моментам.....	117
12. Рябушкин Д.С. Точность вычисления моментов линии ЯМР в твердых телах.....	125
13. Пономаренко В.И., Попов В.В., Скальская О.Л. Эффективная диэлектрическая проницаемость тонкой пластины в поле продольной электромагнитной волны.....	131

14. Беляева А.И., Галуза А.А., Савченко А.А., Слатин К.А. Влияние бомбардировки ионами дейтерия на морфологию и оптические свойства поверхности рекристаллизованного вольфрама.....	136
15. Болотин Д.Д., Максимова Е.М., Стругацкий М.Б. Сравнительный анализ кристалломагнитной структуры бората железа и гематита.....	149
16. Евстафьев А.И., Преображенский В.Л., Перно Ф., Бержанский В.Н. Низкотемпературное трехволновое магнитоупругое связывание в монокристалле FeVO ₃	156
17. Лысов В.И., Цареградская Т.Л., Турков О.В., Саенко Г.В. Получение нанокристаллических материалов кристаллизацией аморфных сплавов.....	174
18. Сычикова Я.А., Кидалов В.В., Гайчук А.С. Полирование поверхности монокристаллического n-InP.....	182
19. Яценко Ю.И., Кидалов В.В., Сукач Г.О. Получение и исследование пористого слоя GaP.....	187
20. Бержанский В.Н., Власова Т.А., Лагунов И.М. Автоматизированная система управления и регистрации экспериментальных данных в физическом эксперименте.....	193
21. Ляшко Д.А., Алентьев Д.В. Программный комплекс для эмуляции спектров ультрафиолетового космического эшелле спектрографа «TUES».....	202
Сведения об авторах	210
Содержание	217
Table of Contents.....	219

Table of Contents

1.	Lelyakov A.P. Distribution of potential of a scalar field for “thick” null string of constant radius.....	3
2.	Usachyov A.S., Lelyakov A.P. Quadratic form, describing gravitational field of the radially expanding closed null string.....	13
3.	Pushkarev A.B. Investigation of a parsec-scale structure of the quasar 1642+690.....	17
4.	Narmansky V.J. Correlation of weather, climate and planetary cycles.....	24
5.	Alexeyev C.N., Barshak E.V., Yavorsky M.A. The structure of the modes and the evolution of optical vortices in optical fibres with acousto-optic interaction.....	42
6.	Alexeyev C.N., Yavorsky M.A., Boklag N.A. Vector theory of higher order modes of parallel waveguides.....	54
7.	Dzedolik I.V., Karakchieva O.S., Mikulska J.P. Polariton spectrum control in dielectric medium.....	64
8.	Kulish V.V., Tomchuk P.M. One-electron optical properties of ellipsoid metal nanoshells.....	75
9.	Krasnyuk I.B., Melnik T.N., Yurchenko V.M. Ideal turbulence in nonlinear “quantum” physics of polymers.....	94
10.	Fridman Yu.A., Gorelikov G.A., Klevets Ph.N. Influence of biaxial anisotropy on phase states of magnetoordering crystal with $S=1$	108
11.	Roshchupkin S.N. The constructing correlation function from its frequency moments.....	117
12.	Ryabushkin D.S. Accuracy of evaluation of NMR line moments in solids.....	125
13.	Ponomarenko V.I., Popov V.V., Skalskaya O.L. Effective dielectric permittivity of thin strip in the field of longitudinal electromagnetic wave.....	131

14.	<i>Belyaeva A.I., Galuza A.A., Savchenko A.A., Slatin A.A.</i> Influence of deuterium ions bombardment on the morphology and optical properties of recrystallized tungsten.....	136
15.	<i>Bolotin D.D., Macksimova E.M., Strugatsky M.B.</i> Comparative analysis of crystalomagnetic structure of iron borate and hematite.....	149
16.	<i>Yevstafyev O., Preobrazhensky V.L., Pernod P., Berzhansky V.N.</i> Low temperature three wave magnetoelastic coupling in FeBO ₃ single crystal.....	156
17.	<i>Lysov V.I., Tsaregradskaya T.L., Turkov O.V., Saenko G.V.</i> Receipt of nanocrystalline materials a way by crystallization of amorphous alloys.....	174
18.	<i>Suchikova J.A., Kidalov V.V., Gaichuk A.S.</i> Polishing of monocrystalline n-InP.....	182
19.	<i>Yatsenko Y.I., Kidalov V.V., Sukach G.O.</i> Preparation and investigation of the porous layer GAP.....	187
20.	<i>Berzhansky V.N., Vlasova T.A., Lagunov I.M.</i> The automated system of control and experimental data registration in physical experiment.....	193
21.	<i>Lyashko D.A., Alentiev D.V.</i> Programmatic complex for emulation of spectrums of ultraviolet space eshelle spectograph «TUES».....	202
Information About Authors.....		210
Table of Contents.....		217